



UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
MESTRADO ACADÊMICO EM FÍSICA

JOÃO PEDRO LIMA VERDE DE MEDEIROS

UMA PROPOSTA DE OPERADOR DE TRANSLAÇÃO DEPENDENTE DA POSIÇÃO
PARA A MECÂNICA QUÂNTICA RELATIVÍSTICA

FORTALEZA

2024

JOÃO PEDRO LIMA VERDE DE MEDEIROS

UMA PROPOSTA DE OPERADOR DE TRANSLAÇÃO DEPENDENTE DA POSIÇÃO
PARA A MECÂNICA QUÂNTICA RELATIVÍSTICA

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado Acadêmico em Física do Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de mestre em Física. Área de Concentração: Física

Orientador: Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho

FORTALEZA

2024

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Sistema de Bibliotecas
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

M439p Medeiros, João Pedro Lima Verde de.
Uma Proposta de Operador de Translação Dependente da Posição para a Mecânica Quântica Relativística /
João Pedro Lima Verde de Medeiros. – 2024.
69 f. : il.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação
em Física, Fortaleza, 2024.

Orientação: Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho.

1. Operador. 2. Translação. 3. Dependente. 4. Posição. 5. Espaço-tempo. I. Título.

CDD 530

JOÃO PEDRO LIMA VERDE DE MEDEIROS

UMA PROPOSTA DE OPERADOR DE TRANSLAÇÃO DEPENDENTE DA POSIÇÃO
PARA A MECÂNICA QUÂNTICA RELATIVÍSTICA

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado Acadêmico em Física do Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de mestre em Física.
Área de Concentração: Física

Aprovada em: 22/07/2024

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa
Filho (Orientador)
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. João Milton Pereira Junior
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Job Saraiva Furtado Neto
Universidade Federal do Cariri (UFCA)

A todos que acreditaram em mim e no meu potencial quando nem eu mesmo acreditava que era capaz de chegar tão longe.

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus familiares, especialmente aos meus pais Juliana e Michael, aos meus irmãos Marina, Lucas e Isabella e aos meus avós Maria de Fátima e Luiz Wilson por tudo que fizeram por mim nesses últimos anos. Sem vocês eu com certeza não teria chegado até aqui.

Agradeço aos amigos que fiz ao longo dessa jornada: Andrei, Thais, Bruno, Genivaldo, Jackson, Thiago, Wagner, Bruna, Willian, Hélio, Katarine, Afonso, Larissa, Agnaldo, Andressa, Maurício e Ingrid por estarem presentes nesse ciclo e tornarem os momentos mais difíceis em leveza.

Agradeço ao Departamento de Física como um todo por essa oportunidade na minha vida acadêmica. Ao Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho por todas as conversas e troca de ideias que tivemos ao longo dos anos para que essa dissertação pudesse ser feita e aos Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa, Prof. Dr. João Milton Pereira Junior e Prof. Dr. Job Saraiva Furtado Neto por terem a disponibilidade de participarem dessa banca e engrandecer o trabalho com suas críticas e sugestões.

Agradeço ao CNPq pelo financiamento da bolsa de mestrado. Graças a esta foi possível me estabelecer e dar continuidade ao projeto de pesquisa.

"O importante é não deixar de questionar. A curiosidade tem sua própria razão de existir."

(Albert Einstein, 1955)

RESUMO

No contexto da Mecânica Quântica não-relativística existem operadores de translação espacial e de evolução temporal que indicam o estado final do sistema a partir da aplicação desses operadores em um estado inicial. O presente trabalho visa definir as propriedades de um operador de translação para a Mecânica Quântica Relativística no espaço-tempo de Minkowski. Deste modo, foi possível obter a forma do quadri-operador momento na representação de posição e propor uma solução para o operador de translação a partir da equação diferencial encontrada. Aplicando o quadri-operador momento contraído com ele mesmo obtemos uma equação do tipo Klein-Gordon para o operador de translação. Inserindo então a solução previamente proposta em tal equação calculamos a relação energia-momento da partícula em estudo. Em seguida, com uso das matrizes gamma de Pauli, encontramos uma equação do tipo Dirac para o operador de translação e, a partir do acoplamento mínimo, fomos capazes de encontrar a energia de um elétron na presença de um campo eletromagnético externo na qual verificamos o termo de acoplamento spin-órbita e o fator giromagnético correto de tal partícula. Posteriormente construímos um operador de translação dependente da posição para o espaço-tempo de Minkowski. Calculamos os novos termos da métrica e o quadri-operador momento modificado. Ao propor uma mudança de variável foi possível analisar a solução da equação do tipo Klein-Gordon modificada encontrada para obter a relação energia-momento da partícula que agora é válida apenas em um domínio definido a partir das características impostas aos elementos da métrica dependente da posição. Por meio do limite não-relativístico e retornando ao conceito do tempo como parâmetro e não mais como coordenada, provamos que a equação de Klein-Gordon modificada se reduz à equação de Schrödinger modificada obtida por Costa Filho *et al.* Em seguida, obtemos uma equação de Dirac modificada e suas soluções livres. Para entender a interpretação das funções de onda modificadas obtidas, calculamos uma equação de continuidade e analisamos as grandezas relacionadas às possíveis densidade e corrente de probabilidade. Por fim, resolvemos o problema do poço de potencial infinito utilizando a equação de Dirac modificada. Ao impor que o fluxo de probabilidade nas paredes do poço seja nula, obtemos uma equação transcendental cuja solução está relacionada com o comprimento de onda Compton e nos fornece a relação-energia momento. Tomando esta mesma equação no limite não-relativístico, obtemos os mesmos níveis de energia discretos calculados por Costa Filho *et al* utilizando a equação de Schrödinger modificada.

Palavras-chave: operador; translação; dependente; posição; espaço-tempo.

ABSTRACT

In the context of non-relativistic Quantum Mechanics, there are spatial translation and time evolution operators that indicate the final state of the system through the application of these operators in an initial state. The present work aims to define the properties of a translation operator to be used in Relativistic Quantum Mechanics in Minkowski's spacetime. Thus, it was possible to obtain the 4-moment operator's form in the position representation and propose a solution for the translation operator through the differential equation that has been found. By applying the 4-moment operator contracted in itself, we obtained a Klein-Gordon equation for the translation operator. Inserting, thus, the previously proposed solution into the aforementioned equation, we calculated the energy-momentum relation of the particle under study. Afterwards, using Pauli's gamma matrices, we found a Dirac-type equation for the translation operator and, through minimal coupling, we were able to find the energy of an electron in the presence of an external electromagnetic field, in which we verified the spin-orbit coupling term and the correct gyromagnetic factor of the aforementioned particle. Subsequently, we constructed a position-dependent translation operator for Minkowski's spacetime. The new terms of the metric and the modified 4-moment operator were calculated. By proposing a variable change, it was possible to analyze the solution of the modified Klein-Gordon equation found in order to obtain the energy-momentum relation of the particle. This particle is now valid only in a domain defined from the characteristics imposed on the position-dependent metric elements. Through the non-relativistic limit, and returning to the concept of time as a parameter and no longer as a coordinate, we prove that the modified Klein-Gordon equation reduces itself to the modified Schrödinger equation obtained earlier by Costa Filho *et al.* Thereafter, we obtained a modified Dirac equation and its free solutions. In order to understand the interpretation of the modified wave function obtained, we calculated the continuity equation and analyzed the quantities related to the possible density and probability current. Finally, the infinity potential well problem was resolved by means of a modified Dirac equation. By imposing that the flux of probability in the well's walls was null, we obtained a transcendental equation whose solution is related to the Compton wavelength and that supplies the energy-momentum relation. Taking this same equation in the non-relativistic limit, we obtain the same discrete energy levels calculated by Costa Filho *et al* using the modified Schrödinger equation.

Keywords: operator; translation; dependent; position; spacetime.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Coordenadas do evento medidas nos dois referenciais.	13
Figura 2 – Exemplo visual da execução ativa para a função de onda.	23
Figura 3 – Esquema proposto por Dirac para explicar as energias negativas e a validação experimental de Anderson para o pósitron.	38
Figura 4 – Poço de potencial infinito com um elétron confinado em seu interior.	60
Figura 5 – Plots de $\tan(k_l)$ e $-k_l L_c / \eta(a)$. As soluções da equação transcendental são os pontos de interseção dessas curvas.	63

LISTA DE SÍMBOLOS

i	Unidade imaginária
\hbar	Constante reduzida de Planck
m_0	Massa de repouso
g	Fator giromagnético
∇	Operador diferencial tridimensional
∂_μ	Operador diferencial quadridimensional
ϵ^{ijk}	Símbolo de Levi-Civita
δ^{ij}	Delta de Kronecker
c	Velocidade da luz
Γ	Fator gamma relativístico
γ^μ	Matrizes gamma de Dirac
$g^{\mu\nu}$	Tensor de métrica
σ^i	Matrizes de Pauli
ρ	Densidade de probabilidade
\mathbf{J}	Corrente de probabilidade
Υ^μ	Parâmetro upsilon do PDTO

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	11
2	PRINCÍPIOS DA RELATIVIDADE RESTRITA	13
2.1	Relatividade Galileana	13
2.2	Transformações de Lorentz	14
2.3	Quadri-Vetores	15
2.4	Relação Energia-Momento	18
3	FUNDAMENTOS DA MECÂNICA QUÂNTICA	20
3.1	Interpretação Probabilística da Função de Onda	20
3.2	Operadores de Translação Espacial e de Evolução Temporal	21
4	MECÂNICA QUÂNTICA RELATIVÍSTICA	28
4.1	Equação de Klein-Gordon	28
4.2	Equação de Dirac	32
5	OPERADOR DE TRANSLAÇÃO NO ESPAÇO-TEMPO DE MINKOWSKI	39
5.1	STTO na Métrica de Minkowski Usual	39
5.1.1	<i>Equação de Klein-Gordon para o STTO</i>	42
5.1.2	<i>Equação de Dirac para o STTO</i>	43
5.2	Operador de Translação Dependente da Posição para o Espaço-Tempo .	48
5.3	Equação de Klein-Gordon Modificada	51
5.3.1	<i>Limite Não-Relativístico</i>	54
5.3.2	<i>Densidade e Corrente de Probabilidade para a Equação de Klein-Gordon</i> <i>Modificada</i>	55
5.4	Equação de Dirac Modificada	56
5.4.1	<i>Densidade e Corrente de Probabilidade para a Equação de Dirac Modificada</i>	58
6	PARTÍCULA DE <i>SPIN</i> 1/2 EM UMA CAIXA UNIDIMENSIONAL . .	60
6.1	Solução do Problema Proposto	60
7	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS	65
	REFERÊNCIAS	67

1 INTRODUÇÃO

No início do século XX a Física experimentava uma verdadeira revolução. As novas ideias provenientes dos trabalhos de Einstein, Minkowski e Lorentz, dentre outros, explicavam como as coordenadas entre referenciais inerciais com velocidades relativas próximas à da luz se relacionavam, como a velocidade da luz no vácuo era invariante entre esses referenciais e, principalmente, como o espaço e o tempo agora seriam estudados sob a ótica dos futuros cientistas do século. Dessa forma, originava-se a Teoria da Relatividade Restrita na qual os conceitos de espaço e tempo absolutos descritos por Galileu e por Newton nos séculos XVI e XVII seriam reformulados, dando lugar à estrutura do espaço-tempo de Minkowski.

Alguns anos depois, os primeiros fundamentos da Mecânica Quântica eram publicados por Schrödinger, Heisenberg e Pauli, dentre outros, explicando os fenômenos físicos na escala atômica ou subatômica. Diversas evidências científicas validavam os novos conceitos apresentados, como por exemplo o experimento de Stern-Gerlach que comprovou a existência de um momento angular intrínseco (spin), a dualidade onda-partícula da luz, a hipótese da quantização da energia de um feixe de fótons proposta por Planck, o comprimento de onda de De Broglie e o modelo de Bohr para o átomo de hidrogênio.

Recentemente, diversos trabalhos de sistemas quânticos com massa dependente da posição (Aguiar *et al.*, 2020) e (Costa Filho *et al.*, 2021) foram publicados inspirados nas ideias inicialmente propostas por Costa Filho *et al* para operadores de translação dependentes da posição (do inglês *Position Dependent Translation Operator* ou, abreviadamente, PDTO). Neste tipo de formalismo temos, para a equação de Schrödinger, uma métrica modificada que depende da posição atual do estado do sistema. A atuação do operador de translação unidimensional é tal que (Costa Filho *et al.*, 2011):

$$T_{\Upsilon}(dx) |x\rangle = |x + g(x)^{-1/2} dx\rangle, \quad (1.1)$$

onde o parâmetro Υ indicado no operador em (1.1) vem do fato de que podemos expandir a função $g(x)^{-1/2}$ em série de potências até primeira ordem (Costa Filho *et al.*, 2016):

$$g(x)^{-1/2} = \sum_0^{\infty} a_n x^n \approx 1 + \Upsilon x, \quad (1.2)$$

e, por conseguinte, o operador de translação dependente da posição atua tal que:

$$T_{\Upsilon}(dx) |x\rangle = |x + (1 + \Upsilon x)dx\rangle. \quad (1.3)$$

Observe que, para $\Upsilon = 0$, retornamos às translações espaciais comuns ao espaço de Hilbert (Tannoudji *et al.*, 2019). No espaço modificado, o operador momento é descrito por (Costa Filho *et al.*, 2016):

$$\hat{P}_\Upsilon = -i\hbar(1 + \Upsilon x) \frac{\partial}{\partial x}, \quad (1.4)$$

e, portanto, a equação de Schrödinger dependente do tempo, assume a forma:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}(1 + \Upsilon x) \frac{\partial}{\partial x} \left[(1 + \Upsilon x) \frac{\partial}{\partial x} \right] + V(x) \right\} \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t). \quad (1.5)$$

Essa forma pode ser um tanto quanto trabalhosa a depender do potencial escolhido, dificultando os cálculos matemáticos necessários. Uma mudança de variável sugerida é:

$$\eta = \frac{\ln(1 + \Upsilon x)}{\Upsilon}, \quad (1.6)$$

tal que a mesma equação (1.5) agora pode ser reescrita e obtemos a mesma forma da equação de Schrödinger dependente do tempo já conhecida:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + V(\eta) \right] \psi(\eta, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\eta, t). \quad (1.7)$$

Nossa proposta surge então da necessidade de estender o formalismo do PDTTO para o espaço-tempo, analogamente às ideias de unificação da Teoria da Relatividade Restrita com a Mecânica Quântica no início do século XX (Klein, 1926),(Gordon, 1926) e (Dirac, 1982), devido ao sucesso científico de ambas as teorias. Nesse novo formalismo, propomos um operador de translação dependente da posição para o espaço-tempo, ou PDTTO-ST, no qual o tensor de métrica terá dependência nas coordenadas x^μ . Conheceremos a forma dos operadores hamiltoniano e momento nessa nova métrica, os quais serão utilizados para obter as equações de Klein-Gordon e de Dirac modificadas, bem como suas equações de continuidade.

Para atingir este objetivo, faremos uma revisão sobre os princípios básicos da Relatividade Restrita no capítulo 2 e da Mecânica Quântica Não-Relativística no capítulo 3. Em seguida, estudaremos as equações de Klein-Gordon e de Dirac e suas implicações físicas no capítulo 4. Proporemos, no capítulo 5, o formalismo do operador de translação para o espaço-tempo de Minkowski, tanto na métrica usual quanto na métrica dependente da posição. Por fim, no capítulo 6, resolveremos o problema do poço de potencial infinito à partir da equação de Dirac modificada e discutiremos os níveis de energia obtidos.

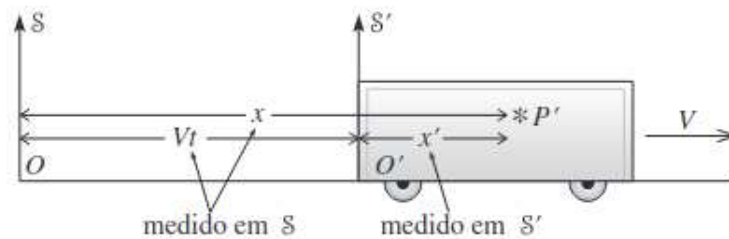
2 PRINCÍPIOS DA RELATIVIDADE RESTRITA

Neste capítulo apresentaremos os principais fundamentos da Relatividade Restrita. Definiremos as características do espaço-tempo de Minkowski e os conceitos de componentes covariantes e contravariantes a partir do tensor de métrica encontrado. Apresentaremos o operador diferencial e a forma das integrações em tal espaço. Introduziremos os conceitos de quadri-vetores e, por fim, indicaremos como obter a famosa relação energia-momento.

2.1 Relatividade Galileana

Na mecânica desenvolvida por Galileu e por Newton o conceito de tempo era absoluto. Por exemplo, consideremos dois observadores: um está fixo ao solo (S) e o outro está fixo ao vagão de um trem (S') que viaja a uma velocidade constante V em relação ao primeiro observador e na direção positiva do eixo x . As origens dos dois referenciais coincidem no instante de tempo $t = 0 = t'$.

Figura 1 – Coordenadas do evento medidas nos dois referenciais.



Fonte: Taylor (2004).

Ao estudar referenciais inerciais (aqueles nos quais a velocidade relativa entre ambos é constante) as coordenadas espaciais x e x' de um evento P que ocorre dentro do trem (identificado pelo asterisco na Figura 1) medidas pelos dois observadores estarão relacionadas da seguinte forma:

$$x' = x - Vt, \quad (2.1)$$

na qual o produto Vt é a distância percorrida pela origem do referencial S' mensurada em relação ao referencial S após decorrer um certo intervalo de tempo t . Visto que a concepção de tempo era absoluta nos limites da Mecânica Clássica, para ambos os observadores o tempo decorrido é o mesmo, ou seja:

$$t = t'. \quad (2.2)$$

Essas relações entre as coordenadas de referenciais inerciais são conhecidas como transformações Galileanas. Se derivarmos a equação (2.1) em relação ao tempo, obtemos a lei de adição de velocidades $u' = u - V$. Se derivarmos novamente com relação ao tempo, obtemos que as acelerações percebidas entre esses dois referenciais são iguais, isto é, $a' = a$. Portanto, uma vez que as medidas da massa entre esses referenciais são as mesmas ($m' = m$), as transformações de Galileu garantem a invariância das Leis de Newton entre referenciais inerciais.

Contudo, com o advento das equações de Maxwell, foi descoberto que a luz se comportava como uma onda cuja velocidade de propagação c no vácuo é, aproximadamente $c = 3 \times 10^8$ m/s (Griffiths, 2017). De acordo então com a lei de adição de velocidades, a velocidade de propagação da luz seria diferente para cada referencial inercial. Isso nos conduz a uma contradição entre a Mecânica Clássica e o Eletromagnetismo, pois significaria que as equações de Maxwell eram válidas somente para um referencial inercial específico.

Diante desse impasse, era necessário portanto um novo conjunto de transformações que relacionassem as coordenadas de referenciais inerciais e que estivesse em conformidade com as Equações de Maxwell e o limite clássico da Mecânica desenvolvida por Newton e por Galileu.

2.2 Transformações de Lorentz

Dessa forma, surgem os postulados básicos da Relatividade Restrita: todos os referenciais inerciais são válidos para a realização de todos os experimentos físicos e que a velocidade de propagação da luz no vácuo é a mesma independente do referencial inercial considerado. Buscando então uma relação entre as coordenadas temporais e as coordenadas espaciais (abolindo o conceito de espaço e de tempo absolutos), se estabelecem as transformações de Lorentz (para um movimento relativo entre os referenciais apenas na direção x):

$$dx' = \Gamma(dx - V dt), \quad (2.3)$$

$$dy' = dy, \quad (2.4)$$

$$dz' = dz, \quad (2.5)$$

$$dt' = \Gamma \left(dt - \frac{V}{c^2} dx \right). \quad (2.6)$$

Observamos agora a dependência das coordenadas espaciais em relação às coordenadas temporais e vice-versa. Se desejarmos as transformações inversas, basta trocar mutuamente as coordenadas com linha pelas sem linha e tomar $V \rightarrow -V$. O fator gamma Γ é uma função da

velocidade definido positivo e maior que 1, tal que:

$$\Gamma(V) = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}} \geq 1. \quad (2.7)$$

No limite de baixas velocidades, isto é, dentro do contexto da Mecânica Clássica, observamos que $V/c \approx 0$ então $\Gamma \rightarrow 1$. Aplicando esses limites em (2.3) e em (2.6) retornamos às transformações Galileanas descritas em (2.1) e em (2.2), respectivamente.

Visto que a velocidade da luz é igual para todos os observadores entre os referenciais inerciais, definimos então o deslocamento quadrado entre dois eventos:

$$ds^2 = c^2 dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2 = c^2 dt'^2 - dx'^2 - dy'^2 - dz'^2, \quad (2.8)$$

no qual as transformações de Lorentz garantem que essa quantidade seja um invariante. A forma quadrática acima pode ser reescrita, tal que:

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu, \quad (2.9)$$

onde utilizamos a notação de Einstein para símbolos contraídos indicando soma e as letras gregas indicando as coordenadas do espaço-tempo de Minkowski ($\mu = 0$ para a coordenada temporal ct e $\mu = 1, 2, 3$ para as coordenadas espaciais x, y, z , respectivamente). Para garantirmos a invariância de ds^2 , o termo $g_{\mu\nu}$ deve ser um tensor de rank 2 (Rindler, 2006). Este é chamado de tensor de métrica e, ao compararmos as expressões (2.8) e (2.9), vemos que, para o espaço-tempo de Minkowski:

$$g_{\mu\nu} = \text{diag}(+1, -1, -1, -1) = g^{\mu\nu}, \quad (2.10)$$

na qual fazemos agora a distinção entre o tensor covariante (índice em baixo) e o tensor contravariante (índice em cima). Seja então δ^μ_σ a delta de Kronecker, o tensor de métrica deve satisfazer:

$$g^{\mu\nu} g_{\nu\sigma} = \delta^\mu_\sigma = \begin{cases} 1, & \text{se } \mu = \sigma, \\ 0, & \text{se } \mu \neq \sigma. \end{cases} \quad (2.11)$$

2.3 Quadri-Vetores

Uma vez que as transformações de Lorentz são utilizadas para relacionar as coordenadas entre os referenciais inerciais em estudo, chamamos as quantidades que se comportam

tensorialmente sob essas transformações de tensores de Lorentz ou quadri-tensores. Para definirmos a posição de um evento no espaço-tempo de Minkowski precisamos informar as coordenadas espaciais e temporais que o caracterizam. Introduzimos então o chamado quadri-vetor (ou quadri-tensor de rank 1) posição, onde convencionalmente é definido contravariante, tal que:

$$x^\mu = (ct, x, y, z) = (x^0, \mathbf{x}). \quad (2.12)$$

A fim de compararmos as componentes covariantes e contravariantes dos quadri-tensores, utilizamos uma operação tensorial básica na qual o tensor de métrica é aplicado da forma:

$$x^\mu = g^{\mu\nu} x_\nu, \quad (2.13)$$

$$x_\mu = g_{\mu\nu} x^\nu. \quad (2.14)$$

De acordo com a assinatura de métrica indicada em (2.10) e as operações presentes em (2.13) e em (2.14), a componente temporal do quadri-vetor posição se transforma como $x^0 = x_0$ enquanto as componentes espaciais se transformam tal que $x^i = -x_i$, com $i = 1, 2, 3$ referentes às coordenadas x, y, z , respectivamente. Essa convenção do sinal também será aplicada para todos os quadri-tensores ao longo do presente trabalho.

Inicialmente devemos estabelecer como serão realizadas operações básicas do cálculo como derivação e integração no espaço-tempo de Minkowski. Nesse espaço, um paralelepípedo de quadri-volume infinitesimal dV é chamado de hiperparalelepípedo. Este é construído a partir do produto misto dos vetores de base que geram tal espaço (Gourgoulhon, 2013). Assumindo um sistema dextrógiro, ou seja, aquele que obedece a regra da mão direita, e coordenadas como indicado em (2.12), o quadri-volume infinitesimal pode ser escrito da forma:

$$dV = \sqrt{-g} dx^0 dx^1 dx^2 dx^3 = \sqrt{-g} d^4x, \quad (2.15)$$

no qual g é o determinante da métrica (2.10). Se desejamos calcular um quadri-volume \mathcal{V} bem delimitado no espaço-tempo de Minkowski, basta integramos (2.15) sobre o espaço que desejamos:

$$\mathcal{V} = \int_{\mathcal{V}} dV = \int_{\mathcal{V}} \sqrt{-g} dx^0 dx^1 dx^2 dx^3 = \int_{\mathcal{V}} \sqrt{-g} d^4x. \quad (2.16)$$

Agora estamos aptos a definir as derivadas em relação às coordenadas contravariantes x^μ e covariantes x_μ . Aplicando a regra da cadeia, vemos inicialmente que :

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} = \frac{\partial x^\nu}{\partial x^\mu} \frac{\partial}{\partial x^\nu}, \quad (2.17)$$

onde observamos que a diferenciação com respeito às coordenadas contravariantes se comportam como transformações de componentes de um operador vetorial covariante (Jackson, 1999). Sejam então ∂_0 a derivada em relação à coordenada ct e ∇ o operador diferencial usual em relação às coordenadas x, y, z , podemos utilizar a métrica para relacionar as componentes do quadri-operador diferencial ∂_μ , tal que:

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(\frac{\partial}{\partial(ct)}, \nabla \right) \equiv \partial_\mu, \quad (2.18)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} = \left(\frac{\partial}{\partial(ct)}, -\nabla \right) \equiv \partial^\mu. \quad (2.19)$$

Definiremos a seguir alguns conceitos primordiais para a cinemática relativística. O intervalo diferencial ds é um escalar importante ao longo da linha de mundo de uma partícula em movimento. O tempo próprio pode ser obtido a partir da inversa da equação (2.6). Para isso, trocamos as coordenadas com linha para sem linha (e vice-versa) e tomamos $V \rightarrow -V$. Em seguida, basta considerarmos dois relógios: um está parado em relação ao referencial S e o outro está parado em relação ao referencial S' . Dessa forma, temos que $dx' = 0$ e o intervalo de tempo dt' , para esse caso, será o intervalo de tempo próprio $d\tau$. Uma vez que $\Gamma \geq 1$ então $dt \geq d\tau$. Esse fenômeno é conhecido como dilatação temporal (pois o relógio do referencial S' está mais a um passo mais lento comparado com o relógio do referencial S) e pode ser representado então por:

$$dt = \Gamma \left(dt' + \frac{V}{c} dx' \right) \Rightarrow dt = \Gamma d\tau, \quad (2.20)$$

e, em muitos casos é conveniente trabalhar com o intervalo de tempo próprio $d\tau$ correspondente à trajetória que essa partícula percorre:

$$ds^2 = c^2 dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2 = c^2 dt^2 \left(1 - \frac{\mathbf{V}^2}{c^2} \right) = c^2 \frac{dt^2}{\Gamma^2} = c^2 d\tau^2. \quad (2.21)$$

A velocidade \mathbf{V} definida no espaço euclidiano usual é a derivada com relação ao tempo t das coordenadas espaciais x, y, z . Contudo, buscamos um quadri-vetor cuja lei de transformação seja invariante sob transformações de Lorentz. Como obtido em (2.21), o tempo próprio τ garante essa invariância. Portanto, definimos a quadri-velocidade V^μ tal que:

$$V^\mu = \frac{dx^\mu}{d\tau}. \quad (2.22)$$

Logo, considerando a expressão (2.20) e aplicando a regra da cadeia, podemos reescrever a equação (2.22) da forma:

$$V^\mu = \frac{d}{d\tau} (ct, x, y, z) = \frac{dt}{d\tau} \frac{d}{dt} (ct, x, y, z) = \Gamma(c, \mathbf{V}). \quad (2.23)$$

Observe que, utilizando a regra de contração a partir da relação entre componentes covariantes e contravariantes, temos, ao contrair a quadri-velocidade com ela mesma:

$$V_\mu V^\mu = \Gamma^2(c^2 - \mathbf{V}^2) = \frac{1}{1 - \frac{\mathbf{V}^2}{c^2}}(c^2 - \mathbf{V}^2) = c^2, \quad (2.24)$$

ou, do ponto de vista das equações (2.9), (2.21) e (2.22), obtemos o mesmo resultado:

$$V_\mu V^\mu = \frac{dx_\mu}{d\tau} \frac{dx^\mu}{d\tau} = \frac{ds^2}{d\tau^2} = c^2. \quad (2.25)$$

Desejamos agora definir o quadri-momento P^μ . Analogamente à forma clássica onde temos o produto da massa pela velocidade da partícula, mas que seja invariante sob transformações de Lorentz assim como a quadri-velocidade V^μ . Seja então m_0 a massa de repouso da partícula:

$$P^\mu = m_0 V^\mu = m_0 \Gamma(c, \mathbf{V}) = m(c, \mathbf{V}) = (mc, \mathbf{p}). \quad (2.26)$$

A expressão $m = \Gamma m_0$ é comumente chamada de massa inercial relativística e, devido ao fator Γ , aumenta a medida que a velocidade da partícula também cresce. O termo $\mathbf{p} = \Gamma m_0 \mathbf{V}$ é conhecido como momento relativístico e observe que, para baixas velocidades, se reduz ao momento linear da Mecânica Clássica.

2.4 Relação Energia-Momento

Para obter a famosa relação $E = mc^2$ de Einstein, expandimos em série a massa inercial relativística até termos de ordem $1/c^2$ e em seguida multiplicamos ambos os lados por c^2 :

$$m = m_0 \left(1 - \frac{\mathbf{V}^2}{c^2}\right)^{-\frac{1}{2}} \approx m_0 + \frac{1}{c^2} \left(\frac{1}{2} m_0 \mathbf{V}^2\right) + \dots \Rightarrow mc^2 = m_0 c^2 + \frac{1}{2} m_0 \mathbf{V}^2, \quad (2.27)$$

o qual nos informa que a energia total $E = mc^2$ é a soma da energia de repouso $E_0 = m_0 c^2$ com a energia cinética T da partícula. Uma vez que agora sabemos a equivalência massa-energia, estamos aptos a reescrever o quadri-momento (2.26) como:

$$P^\mu = \left(\frac{E}{c}, \mathbf{p}\right). \quad (2.28)$$

Vamos utilizar as expressões (2.26) e (2.28) para contrair o quadri-momento com ele mesmo, da forma:

$$P_\mu P^\mu = m_0^2 V_\mu V^\mu = m_0^2 c^2 = \frac{E^2}{c^2} - \mathbf{p}^2. \quad (2.29)$$

Comparando ambos os lados da última igualdade acima obtemos a relação energia-momento da Relatividade Restrita:

$$E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4. \quad (2.30)$$

Este é um importante resultado de grande impacto para a Física do século XX. Em 1900, Planck postulou que radiação de frequência ν só poderia ser emitida em quantidades finitas conhecida como *quanta* de energia $E = h\nu$, na qual h é a conhecida constante de Planck. Alguns anos depois, Einstein publica seu trabalho sobre o efeito fotoelétrico onde ele sugere que a radiação não só poderia ser emitida como também se propaga e é absorvida na forma dos *quanta*, o que posteriormente viria a ser conhecido como fótons (Rindler, 2006).

Inspirado na dualidade onda-partícula apresentada pela luz e na quantização obtida por Bohr para as órbitas dos elétrons no átomo de Hidrogênio, De Broglie propôs que à todas as partículas estariam associados comprimentos de onda $\lambda = h/p$ que se propagavam na mesma direção de movimento da partícula (Nussenzveig, 2014).

Classicamente, a definição de momento linear $p = m_0 v$ depende da massa do corpo. Mas como poderia o fóton, que se propaga na velocidade da luz e cuja massa é nula, possuir momento? A resposta está na relação energia-momento em (2.30): a energia para uma partícula de massa igual a zero é $E = pc$. Igualando essa expressão com o *quanta* de energia proposto por Planck, obtemos o comprimento de onda apresentado por De Broglie.

3 FUNDAMENTOS DA MECÂNICA QUÂNTICA

Neste capítulo estudaremos inicialmente a interpretação probabilística da função de onda na equação de Schrödinger e descreveremos como são as expressões para a densidade e a corrente de probabilidade. Depois, apresentaremos as principais propriedades dos operadores de translação espacial e de evolução temporal, trabalhando os conceitos de execução ativa e passiva. Por fim, encontraremos o operador momento na representação de posição e a relação do operador hamiltoniano com a derivada temporal da função de onda.

3.1 Interpretação Probabilística da Função de Onda

Na Mecânica Clássica o objetivo ao estudar sistemas macroscópicos e de baixas energias é resolver a segunda lei de Newton $F = m_0a$, na qual F é a força resultante, m_0 é a massa do corpo e a sua aceleração (Nussenzveig, 2013). A partir disso, podemos integrar a aceleração para obter a velocidade (e por consequência seu momento linear $p = m_0v$) e, integrando novamente, obtemos sua posição x . Contudo, na Mecânica Quântica estamos falando de sistemas microscópicos e o objetivo agora é encontrar a função de onda $\phi(\mathbf{x}, t)$ a partir da solução obtida ao resolver a equação de Schrödinger (Griffiths, 2018):

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \phi + V\phi. \quad (3.1)$$

A interpretação probabilística da função de onda nos diz que a probabilidade de encontrar a partícula no instante de tempo t no volume infinitesimal $d^3x = dx dy dz$ nas imediações do ponto \mathbf{x} é igual a $|\phi(\mathbf{x}, t)|^2 d^3x$. O módulo quadrado da função de onda $|\phi(\mathbf{x}, t)|^2 = \phi\phi^*$, definido então positivo, representa a densidade de probabilidade ρ . Uma vez que a probabilidade de encontrar a partícula sobre todo o espaço deve ser 1, então (Tannoudji *et al.*, 2019):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(\mathbf{x}, t)|^2 d^3x = 1. \quad (3.2)$$

Garantindo a hermiticidade da energia potencial ($V^\dagger = V$), ou seja, autovalores reais associados a tal operador (Sakurai; Napolitano, 2020), tomamos o complexo conjugado da equação de Schrödinger em (3.1):

$$-i\hbar \frac{\partial \phi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \phi^* + V\phi^*. \quad (3.3)$$

Multiplicando (3.1) por ϕ^* e (3.3) por ϕ , ambos à esquerda, subtraímos então as duas equações:

$$i\hbar \left(\phi^* \frac{\partial \phi}{\partial t} + \phi \frac{\partial \phi^*}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} (\phi^* \nabla^2 \phi - \phi \nabla^2 \phi^*). \quad (3.4)$$

Observe que, de acordo com a regra do produto das derivadas, podemos reescrever a expressão (3.4) e obtemos uma equação da continuidade:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi^* \phi) + \frac{\hbar}{2m_0 i} \nabla \cdot (\phi^* \nabla \phi - \phi \nabla \phi^*) = 0 \Rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0, \quad (3.5)$$

na qual identificamos a densidade de probabilidade ρ conforme verificado anteriormente na equação (3.2) e a corrente de probabilidade \mathbf{J} para a equação de Schrödinger, tal que:

$$\rho_S = \phi^* \phi = |\phi(\mathbf{x}, t)|^2, \quad (3.6)$$

$$\mathbf{J}_S = \frac{\hbar}{2m_0 i} (\phi^* \nabla \phi - \phi \nabla \phi^*). \quad (3.7)$$

Uma boa analogia para entender o fluxo de probabilidade está na interpretação do Eletromagnetismo para a equação da continuidade. Em um sistema isolado, a carga pode estar distribuída de forma aleatória dentro do volume que delimita o sistema. Entretanto, a carga total (ou seja, a integral da densidade de carga sobre todo o espaço) é uma quantidade conservada no tempo. Porém, dentro do sistema, a distribuição das cargas podem variar no tempo, o que significa a existência de correntes elétricas.

A conservação global da carga está então atrelada à conservação local. Se a carga contida em um determinado volume varia com o tempo, então quer dizer que há um fluxo de corrente sobre a superfície fechada que delimita este volume. Para a interpretação probabilística da função de onda isto significa que, se a probabilidade ρ de encontrar a partícula no volume infinitesimal d^3x variar no tempo, então há um fluxo de corrente de probabilidade \mathbf{J} ao longo da superfície que envolve esse volume considerado (Tannoudji *et al.*, 2019).

3.2 Operadores de Translação Espacial e de Evolução Temporal

Seja A um operador hermitiano, isto é, autovalores reais tal que $A^\dagger = A$. Consideramos então que os autokets normalizados $|a'\rangle$ de tal operador formam um conjunto ortonormal completo e que um ket arbitrário $|\alpha\rangle$ pode ser expandido em termos dos autokets do operador A (Sakurai; Napolitano, 2020). Sejam então as relações de ortonormalidade e de completeza para

uma base discreta, respectivamente:

$$\langle a''|a'\rangle = \delta_{a'',a'}, \quad (3.8)$$

$$\sum_{a'} |a'\rangle \langle a'| = \mathbb{I}, \quad (3.9)$$

nas quais $\delta_{a'',a'}$ é a delta de Kronecker semelhante à definição em (2.11) e \mathbb{I} o operador identidade. Analogamente, podemos definir essas mesmas relações em uma base contínua. Sejam então ξ um operador no espectro contínuo e $|\xi'\rangle$ seus autokets, logo:

$$\langle \xi''|\xi'\rangle = \delta(\xi'' - \xi'), \quad (3.10)$$

$$\int d\xi' |\xi'\rangle \langle \xi'| = \mathbb{I}, \quad (3.11)$$

onde $\delta(\xi'' - \xi')$ é a função delta de Dirac, definida tal que (Butkov, 1978):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi' \delta(\xi'' - \xi') f(\xi') = f(\xi''). \quad (3.12)$$

A partir desses conceitos apresentados podemos estudar como os operadores agem sobre um estado do sistema. Sejam então os operadores de posição X, Y, Z aplicados no estado $|\mathbf{x}'\rangle = |x', y', z'\rangle$. Os autoestados desses operadores devem satisfazer:

$$X |\mathbf{x}'\rangle = x' |\mathbf{x}'\rangle, \quad (3.13)$$

$$Y |\mathbf{x}'\rangle = y' |\mathbf{x}'\rangle, \quad (3.14)$$

$$Z |\mathbf{x}'\rangle = z' |\mathbf{x}'\rangle, \quad (3.15)$$

onde x', y', z' são autovalores dos respectivos operadores de posição. Observe que $|\mathbf{x}'\rangle$ é autoket simultâneo dos observáveis em questão. Dessa forma, é possível realizar medições simultâneas das três componentes de posição. Isso significa que os operadores de posição possuem uma base ortonormal comum formada por seus autokets (*C.S.C.O.*, do inglês *Complete Set of Commuting Observables*) e, portanto, tais operadores comutam entre si (Tannoudji *et al.*, 2019). Sejam então $i, j = 1, 2, 3$ referentes os operadores X, Y, Z , respectivamente, temos:

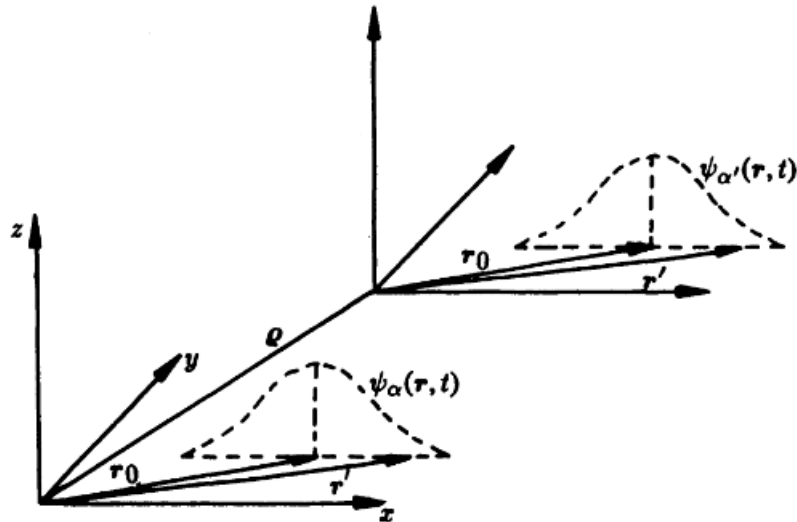
$$[X_i, X_j] = 0. \quad (3.16)$$

Inicialmente, vamos considerar um estado bem localizado em \mathbf{x}' . Definiremos então um operador de translação espacial infinitesimal $T(d\mathbf{x}')$ que agirá deslocando o estado até uma nova posição bem localizada em $\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'$, da forma:

$$T(d\mathbf{x}') |\mathbf{x}'\rangle = |\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'\rangle. \quad (3.17)$$

Observe na Figura 2 que a função de onda ψ'_α em $\mathbf{r} = \mathbf{r}' + \boldsymbol{\rho}$ possui o mesmo valor que a função de onda ψ_α em $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$. Ou seja, $\psi'_\alpha(\mathbf{r}' + \boldsymbol{\rho}) = \psi_\alpha(\mathbf{r}')$. Em termos da função de onda, o operador de translação atuará mudando esta de posição e mantendo fixo o sistema de coordenadas x, y, z . Esse é um exemplo de execução ativa.

Figura 2 – Exemplo visual da execução ativa para a função de onda.



Fonte: Greiner; Müller (2001).

Assim, para nosso operador de translação infinitesimal, temos que:

$$\psi'(\mathbf{x}') = T(d\mathbf{x}')\psi(\mathbf{x}') = \psi(\mathbf{x}' - d\mathbf{x}'). \quad (3.18)$$

Estabeleceremos então algumas propriedades de tal operador $T(d\mathbf{x}')$. Primeiramente, desejamos que este seja unitário, isto é, queremos que a probabilidade seja conservada:

$$T^\dagger(d\mathbf{x}')T(d\mathbf{x}') = \mathbb{I} \Rightarrow \langle \alpha | \alpha \rangle = \langle \alpha | T^\dagger(d\mathbf{x}')T(d\mathbf{x}') | \alpha \rangle. \quad (3.19)$$

Em seguida, gostaríamos que esse operador satisfizesse a propriedade da composição. Em outras palavras, que ao aplicar sucessivas translações infinitesimais estas sejam equivalentes a aplicar uma única translação da resultante entre elas:

$$T(d\mathbf{x}')T(d\mathbf{x}'') = T(d\mathbf{x}' + d\mathbf{x}''). \quad (3.20)$$

Como consequência, uma translação em $d\mathbf{x}'$ seguida por uma translação em $-d\mathbf{x}'$ o ket deve voltar ao seu estado inicial. Dessa forma, uma translação na direção oposta é equivalente ao inverso da translação original na direção escolhida:

$$T(-d\mathbf{x}') = T^{-1}(d\mathbf{x}'). \quad (3.21)$$

Por fim, quando tomarmos o limite $dx' \rightarrow 0$, o operador de translação deve se reduzir ao operador identidade, uma vez que quando não há translações o estado deve permanecer inalterado:

$$\lim_{dx' \rightarrow 0} T(dx') = \mathbb{I}. \quad (3.22)$$

Portanto, uma vez que o momento linear é o gerador de translações espaciais (Goldstein *et al.*, 2001), definiremos o operador \mathbf{P} cujas componentes são hermitianas ($P_i = P_i^\dagger$ de forma que seus autovalores sejam reais, pois estamos tratando de um observável), tal que o operador de translação espacial tenha a forma:

$$T(dx') = \mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} \mathbf{P} \cdot dx'. \quad (3.23)$$

Observe então que este operador obedece as propriedades listadas acima, como a unitariedade:

$$\begin{aligned} T^\dagger(dx')T(dx') &= \left(\mathbb{I} + \frac{i}{\hbar} \mathbf{P}^\dagger \cdot dx' \right) \left(\mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} \mathbf{P} \cdot dx' \right) \\ &= \mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} (\mathbf{P} - \mathbf{P}^\dagger) \cdot dx' + \mathcal{O}(dx'^2) \\ &\approx \mathbb{I}, \end{aligned} \quad (3.24)$$

e a composição:

$$\begin{aligned} T(dx')T(dx'') &= \left(\mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} \mathbf{P} \cdot dx' \right) \left(\mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} \mathbf{P} \cdot dx'' \right) \\ &= \mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} \mathbf{P} \cdot (dx' + dx'') + \mathcal{O}(dx'^2) \\ &\approx \mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} \mathbf{P} \cdot (dx' + dx'') \\ &= T(dx' + dx''). \end{aligned} \quad (3.25)$$

Consequentemente, se tomarmos $dx'' = -dx'$ em (3.25) obtemos a propriedade do inverso da translação. Por fim, se fizermos $dx' \rightarrow 0$ em (3.23) o operador se reduz à unidade e o estado do sistema não é alterado. Observe que podemos calcular também o comutador do operador posição \mathbf{X} com o operador de translação infinitesimal $T(dx')$:

$$\begin{aligned} [\mathbf{X}, T(dx')] |x'\rangle &= \mathbf{X}T(dx') |x'\rangle - T(dx')\mathbf{X} |x'\rangle \\ &= \mathbf{X} |x' + dx'\rangle - x' T(dx') |x'\rangle \\ &= (x' + dx') |x' + dx'\rangle - x' |x' + dx'\rangle \\ &= dx' |x' + dx'\rangle \\ &\approx dx' |x'\rangle, \end{aligned} \quad (3.26)$$

no qual consideramos apenas os termos até a primeira ordem de $d\mathbf{x}'$. Escolhendo $d\mathbf{x}'$ na direção de $\hat{\mathbf{x}}_j$ e aplicando o produto escalar com $\hat{\mathbf{x}}_i$, segue de (3.26) que:

$$\begin{aligned} -\frac{i}{\hbar}\mathbf{X}(\mathbf{P} \cdot d\mathbf{x}') + \frac{i}{\hbar}(\mathbf{P} \cdot d\mathbf{x}')\mathbf{X} &= d\mathbf{x}' \\ -\frac{i}{\hbar}(\mathbf{X} \cdot \hat{\mathbf{x}}_i)P_j + \frac{i}{\hbar}P_j(\mathbf{X} \cdot \hat{\mathbf{x}}_i) &= \hat{\mathbf{x}}_j \cdot \hat{\mathbf{x}}_i \\ -\frac{i}{\hbar}(X_i P_j - P_j X_i) &= \delta_{ij} \\ [X_i, P_j] &= i\hbar\delta_{ij}, \end{aligned} \quad (3.27)$$

onde δ_{ij} é a delta de Kronecker. Vemos então que, para uma mesma coordenada (isto é, $i = j$), os operadores de posição e de momento não comutam, logo não é possível encontrar uma base comum de autokets simultâneos para esses dois operadores. Na prática isso significa que não podemos realizar medições desses dois observáveis ao mesmo tempo. Portanto, nossa função de onda deverá ser escrita ou na representação de posição ou na representação de momento.

Usualmente, e ao longo desse trabalho, utilizaremos a representação de posição. Dessa forma, vamos aplicar o operador de translação $T(\Delta\mathbf{x}')$ em um ket $|\alpha\rangle$ qualquer. Utilizando a relação de completeza (3.11) e a expansão em série de Taylor (Butkov, 1978) até primeira ordem, temos:

$$\begin{aligned} \left(\mathbb{I} - \frac{i}{\hbar}\mathbf{P} \cdot \Delta\mathbf{x}'\right)|\alpha\rangle &= \int d\mathbf{x}' T(\Delta\mathbf{x}')|\mathbf{x}'\rangle \langle\mathbf{x}'|\alpha\rangle \\ &= \int d\mathbf{x}' |\mathbf{x}' + \Delta\mathbf{x}'\rangle \langle\mathbf{x}'|\alpha\rangle \\ &= \int d\mathbf{x}' |\mathbf{x}'\rangle \langle\mathbf{x}' - \Delta\mathbf{x}'|\alpha\rangle \\ &= \int d\mathbf{x}' |\mathbf{x}'\rangle (\langle\mathbf{x}'|\alpha\rangle - \Delta\mathbf{x}' \cdot \nabla' \langle\mathbf{x}'|\alpha\rangle), \end{aligned} \quad (3.28)$$

e com a relação de ortonormalidade (3.10), comparando ambos os lados ficamos com:

$$\begin{aligned} \langle\mathbf{x}|\mathbf{P}|\alpha\rangle &= (-i\hbar) \int d\mathbf{x}' \langle\mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle (\nabla' \langle\mathbf{x}'|\alpha\rangle) \\ &= (-i\hbar) \int d\mathbf{x}' \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') (\nabla' \langle\mathbf{x}'|\alpha\rangle) \\ &= (-i\hbar) \nabla \langle\mathbf{x}|\alpha\rangle, \end{aligned} \quad (3.29)$$

onde então o operador de momento linear \mathbf{P} na representação de posição é:

$$\mathbf{P} = -i\hbar\nabla, \quad (3.30)$$

e as relações de comutação das componentes do operador momento são da forma:

$$[P_i, P_j] = 0. \quad (3.31)$$

Por fim, podemos estudar como o estado do sistema evolui no tempo. Devemos salientar inicialmente que o tempo na Mecânica Quântica não-relativística é um parâmetro. Diferente dos operadores de posição estudados acima, não podemos tomar o tempo como um operador, ou seja, não é um observável propriamente dito (Sakurai; Napolitano, 2020). Sejam $|\psi(t)\rangle$ o estado no instante inicial t e $|\psi(t + dt)\rangle$ o estado no instante final $t + dt$. Definimos então o operador de evolução temporal infinitesimal $U(dt)$, tal que:

$$|\psi(t + dt)\rangle = U(dt) |\psi(t)\rangle. \quad (3.32)$$

Analogamente ao que fizemos para o operador de translação espacial, vamos estabelecer as propriedades do operador de evolução temporal. Para garantir a conservação da probabilidade o operador deve ser unitário:

$$U^\dagger(dt)U(dt) = \mathbb{I} \Rightarrow \langle \psi(t + dt) | \psi(t + dt) \rangle = \langle \psi(t) | U^\dagger(dt)U(dt) | \psi(t) \rangle, \quad (3.33)$$

ao aplicar sucessivas evoluções é o mesmo que aplicar uma evolução resultante da soma dos intervalos considerados:

$$U(dt' + dt'') = U(dt')U(dt''), \quad (3.34)$$

e, por fim, que ao tomarmos $dt \rightarrow 0$ o operador não deve alterar o estado, ou seja, é identicamente à unidade:

$$\lim_{dt \rightarrow 0} U(dt) = \mathbb{I}. \quad (3.35)$$

Observe que só faz sentido considerarmos $dt > 0$ pois senão estaríamos validando evoluções temporais de estados contrárias à direção do tempo. Dessa forma, ao aplicar o operador $U(dt)$ em uma função de onda é o mesmo que mantermos a função de onda fixa e deslocar a "origem do eixo" para a esquerda em $-dt$. Esse é um exemplo de execução passiva (Greiner; Muller, 2001):

$$\psi(\mathbf{x}, t + dt) = U(dt)\psi(\mathbf{x}, t). \quad (3.36)$$

Visto que o hamiltoniano é o gerador de deslocamento temporal do sistema (Goldstein *et al.*, 2001), vamos definir o operador H hermitiano ($H = H^\dagger$, pois queremos realizar medidas reais de tal observável), de forma que o operador de evolução temporal seja:

$$U(dt) = \mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} H dt, \quad (3.37)$$

satisfazendo a unitariedade:

$$\begin{aligned}
 U^\dagger(dt)U(dt) &= \left(\mathbb{I} + \frac{i}{\hbar} H^\dagger dt \right) \left(\mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} H dt \right) \\
 &= \mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} (H - H^\dagger) dt + \mathcal{O}(dt^2) \\
 &\approx \mathbb{I},
 \end{aligned} \tag{3.38}$$

e a composição, tal que:

$$\begin{aligned}
 U(dt')U(dt'') &= \left(\mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} H dt' \right) \left(\mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} H dt'' \right) \\
 &= \mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} H (dt' + dt'') + \mathcal{O}(dt^2) \\
 &\approx \mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} H (dt' + dt'') \\
 &= U(dt' + dt''),
 \end{aligned} \tag{3.39}$$

e finalmente, se fizermos $dt \rightarrow 0$ em (3.37), o operador se reduz à unidade, satisfazendo então à todas as propriedades estabelecidas. Para a propriedade da composição em (3.34) vamos considerar o estado do sistema evoluindo na seguinte ordem $t_0 \rightarrow t \rightarrow t + dt$:

$$U(t + dt, t_0) = U(t + dt, t)U(t, t_0) = \left(\mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} H dt \right) U(t, t_0), \tag{3.40}$$

tal que:

$$U(t + dt, t_0) - U(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar} H dt U(t, t_0), \tag{3.41}$$

e tomando o limite $dt \rightarrow 0$ ficamos com:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H U(t, t_0). \tag{3.42}$$

Obtemos por fim a equação de Schrödinger para o operador de evolução temporal, de maneira que o operador hamiltoniano H é aplicado da forma:

$$H = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}. \tag{3.43}$$

Dispondo então dos operadores que relacionam o momento (3.30) e a energia da partícula (3.43), podemos finalmente estudar os principais conceitos aplicados para tentar unificar a Mecânica Quântica e a Relatividade Restrita no início do século XX. Para altas energias a equação de Schrödinger não é uma boa escolha para analisar o estado do sistema, uma vez que esta não é invariante sob transformações de Lorentz (Fai, 2022). Portanto, era necessário um novo formalismo que garantisse essa invariância e que pudesse descrever de forma satisfatória a equação de onda para um sistema de uma partícula livre relativística.

4 MECÂNICA QUÂNTICA RELATIVÍSTICA

Neste capítulo desenvolveremos os conceitos que nos guiam às equações de Klein-Gordon e de Dirac por meio dos operadores momento e hamiltoniano a partir da relação energia-momento. Encontraremos as soluções de energia positiva e de energia negativa que levaram à especulação e posteriormente à verificação experimental da existência de antipartículas. Por fim, examinaremos as interpretações probabilísticas da função de onda em cada caso e o conceito de spin da partícula a qual cada equação está relacionada.

4.1 Equação de Klein-Gordon

Em meados de 1926, de forma independente, os físicos Oskar Klein (Klein, 1926) e Walter Gordon (Gordon, 1926) tentaram unir a teoria quântica com a teoria relativística. A ideia era obter, a partir da aplicação dos operadores de energia e de momento, uma equação e uma função de onda invariantes sob transformações de Lorentz. Para isso, eles consideraram uma partícula livre cuja energia poderia ser obtida tomando a relação energia-momento conforme equação (2.30). Observe que, devido ao quadrado da energia, é possível considerar duas soluções:

$$E = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4}. \quad (4.1)$$

Como a ideia original era trabalhar com partículas livres, não fazia muito sentido admitir que estas possuem energia negativa. Na realidade, essa solução negativa de energia para a equação de Klein-Gordon está relacionada com a existência de antipartículas, verificadas experimentalmente por Carl Anderson com a descoberta do pósitron, antipartícula do elétron (Anderson, 1933). Ao aplicar o operador hamiltoniano na função de onda, devemos ter:

$$H\psi(\mathbf{x}, t) = \pm \left(\sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4} \right) \psi(\mathbf{x}, t). \quad (4.2)$$

De forma a incorporar ambas as soluções positiva e negativa aplicaremos novamente o operador hamiltoniano na equação (4.2), tal que (Guendelman; Owen, 2022):

$$H^2\psi(\mathbf{x}, t) = (\mathbf{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4) \psi(\mathbf{x}, t). \quad (4.3)$$

Utilizando os operadores de momento (3.30) e de energia (3.43) obtidos na Mecânica Quântica não-relativística, ficamos com:

$$\begin{aligned} (-H^2 + \mathbf{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4) \psi(\mathbf{x}, t) &= 0 \\ \left[-(i\hbar)^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} + (-i\hbar)^2 c^2 \nabla^2 + m_0^2 c^4 \right] \psi(\mathbf{x}, t) &= 0 \\ \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi(\mathbf{x}, t) &= 0. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Essa é a famosa equação de Klein-Gordon para partículas livres. Observe que, ao utilizar a notação dos quadri-operadores diferenciais em (2.18) e (2.19) e reescrevendo a função de onda como uma função das coordenadas x^μ no espaço-tempo de Minkowski, podemos verificar a invariância da equação de Klein-Gordon sob transformações de Lorentz:

$$\left(\partial_\mu \partial^\mu + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi(x^\mu) = 0, \quad (4.5)$$

uma vez que a função de onda é um escalar invariante de Lorentz tal que $\psi(x^\mu) = \psi(x^{\mu'})$. A contração dos índices dos quadri-operadores diferenciais covariante e contravariante também é invariante e o operador resultante desse produto é chamado de D'Alambertiano, de forma que:

$$\partial_{\mu'} \partial^{\mu'} = \partial_\mu \partial^\mu \equiv \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2. \quad (4.6)$$

Reconhecemos então (4.5) como uma equação de onda, cujas soluções livres são (Greiner, 2000):

$$\psi(x^\mu) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} P_\mu x^\mu \right] = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}) \right], \quad (4.7)$$

na qual utilizamos a contração dos quadri-vetores posição (2.12) e momento (2.28). Uma vez que a equação de Klein-Gordon foi obtida a partir da equação de Schrödinger considerando um hamiltoniano relativístico é natural pensarmos que ao fazer o limite não-relativístico (isto é, tomando $c \rightarrow \infty$) recuperemos as expressões já conhecidas da Mecânica Quântica não-relativística. Para isso, separemos a função de onda (4.7) em uma parte correspondente à função de onda de Schrödinger $\phi(\mathbf{x}, t)$ juntamente com um termo vindo da energia de repouso da partícula:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \phi(\mathbf{x}, t) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t \right). \quad (4.8)$$

A energia total E poder ser vista como a soma da energia não-relativística E' da partícula mais a energia de repouso, ou seja, $E = E' + m_0 c^2$. Como essa energia de repouso é

proporcional à velocidade da luz ao quadrado podemos assumir que:

$$\left| i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} \right| \approx E' \phi \ll m_0 c^2 \phi, \quad (4.9)$$

então derivamos parcialmente no tempo a função de onda em (4.8) para obter:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} - i \frac{m_0 c^2}{\hbar} \phi \right) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t \right), \quad (4.10)$$

e, como a equação de Klein-Gordon é uma equação de segunda ordem no tempo, derivamos novamente a função de onda $\psi(\mathbf{x}, t)$ e também a relação (4.9), ambas no tempo, tal que:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} &= \frac{\partial}{\partial t} \left[\left(\frac{\partial \phi}{\partial t} - i \frac{m_0 c^2}{\hbar} \phi \right) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t \right) \right] \\ &= \left[\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - i \frac{m_0 c^2}{\hbar} \frac{\partial \phi}{\partial t} - i \frac{m_0 c^2}{\hbar} \frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{m_0^2 c^4}{\hbar^2} \phi \right] \exp \left(-\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t \right) \\ &\approx - \left[2i \frac{m_0 c^2}{\hbar} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{m_0^2 c^4}{\hbar^2} \phi \right] \exp \left(-\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t \right). \end{aligned} \quad (4.11)$$

Por fim, inserimos o resultado acima em (4.5) e retornamos à equação de Schrödinger para a função de onda $\phi(\mathbf{x}, t)$ que está relacionada com a energia não-relativística da partícula:

$$-\frac{1}{c^2} \left[2i \frac{m_0 c^2}{\hbar} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{m_0^2 c^4}{\hbar^2} \phi \right] = \left(\nabla^2 - \frac{m_0 c^2}{\hbar^2} \right) \phi \Rightarrow i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \phi. \quad (4.12)$$

O último ponto que devemos comentar sobre a equação de Klein-Gordon é o que diz respeito à interpretação probabilística da função de onda. Analogamente ao que fizemos para a equação de Schrödinger, vamos tomar o complexo conjugado tal que:

$$\left(\partial_\mu \partial^\mu + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi^* = 0. \quad (4.13)$$

Multiplicaremos (4.5) por ψ^* e (4.13) por ψ , ambas à esquerda. Subtrairemos as equações resultantes e, utilizando a regra do produto das derivadas, ficamos com:

$$\begin{aligned} \psi^* \left(\partial_\mu \partial^\mu + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi - \psi \left(\partial_\mu \partial^\mu + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi^* &= 0 \\ \psi^* \partial_\mu (\partial^\mu \psi) - \psi \partial_\mu (\partial^\mu \psi^*) &= 0 \\ \partial_\mu (\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*) &= 0, \end{aligned} \quad (4.14)$$

onde introduzimos a quadri-corrente de probabilidade J^μ , tal que:

$$J^\mu = N(\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*) = (c\rho, \mathbf{J}), \quad (4.15)$$

na qual N é uma constante de proporcionalidade que será determinada mais à frente. Observe então que a expressão final em (4.14) se reduz à uma equação da continuidade:

$$\partial_\mu J^\mu = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0. \quad (4.16)$$

Finalmente, basta então determinarmos ρ e \mathbf{J} para o formalismo de Klein-Gordon. Da mesma forma que consideramos anteriormente ao tomarmos o limite não-relativístico, essas grandezas devem retornar às expressões da densidade de probabilidade (3.6) e da corrente de probabilidade (3.7) para a equação de Schrödinger. Observando a expressão (4.8), já calculamos sua derivada temporal em (4.10). Calculamos então seu gradiente:

$$\nabla\psi = \nabla\phi \exp\left(-\frac{i}{\hbar}m_0c^2t\right). \quad (4.17)$$

Note que ao utilizar a expressão (4.17) na equação da continuidade (4.16), as exponenciais não inteferem, pois estamos igualando a equação inteira a zero. Logo, não há dependência da velocidade da luz tal que as componentes de \mathbf{J} para o caso de Schrödinger e de Klein-Gordon são proporcionais e, sendo assim, ao comparar as expressões (3.7) e (4.15) percebemos que a constante de proporcionalidade N deve ser:

$$N = \frac{i\hbar}{2m_0}. \quad (4.18)$$

Agora, para calcular ρ , basta tomarmos $\mu = 0$ na expressão (4.15). Portanto, as grandezas ρ e \mathbf{J} para a equação de Klein-Gordon são:

$$\rho_{KG} = \frac{i\hbar}{2m_0c^2} \left(\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial\psi^*}{\partial t} \right), \quad (4.19)$$

$$\mathbf{J}_{KG} = -\frac{i\hbar}{2m_0} (\psi^* \nabla\psi - \psi \nabla\psi^*). \quad (4.20)$$

Utilizando a derivada temporal da função de onda em (4.10) e substituindo em ρ indicado em (4.19), temos que:

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{i\hbar}{2m_0c^2} \left[\phi^* \left(\frac{\partial\phi}{\partial t} - \frac{im_0c^2}{\hbar}\phi \right) - \phi \left(\frac{\partial\phi^*}{\partial t} + \frac{im_0c^2}{\hbar}\phi^* \right) \right] \\ &= \phi\phi^* + \frac{i\hbar}{2m_0c^2} \left(\phi^* \frac{\partial\phi}{\partial t} - \phi \frac{\partial\phi^*}{\partial t} \right), \end{aligned} \quad (4.21)$$

e observamos que, ao tomar o limite não-relativístico ($c \rightarrow \infty$) na expressão acima, retornamos à densidade de probabilidade para a equação de Schrödinger como em (3.6).

Entretanto, devido aos possíveis valores que a função de onda ψ e sua derivada $\partial\psi/\partial t$ podem assumir em um determinado instante de tempo t , a grandeza indicada em (4.19) não é definida positiva e, portanto, não pode ser uma densidade de probabilidade. Isso se deve ao fato da equação de Klein-Gordon ser de segunda ordem no tempo e, devido à isso, esta foi por muito tempo considerada fisicamente sem sentido (Greiner, 2000) pois não havia uma interpretação probabilística da função de onda, contrário ao que havia para Schrödinger.

Em consequência da forma como escrevemos o hamiltoniano em (4.3) acabamos incorporando ambas as soluções de autovalores positivo e negativo da energia. Dessa forma, a solução da função de onda para a equação de Klein-Gordon em (4.7) possui imbutidos os comportamentos das funções de onda para uma partícula com energia positiva e para outra partícula de comportamento idêntico mas com energia negativa (Sakurai; Napolitano, 2020).

Ao tomar o limite não-relativístico a equação de Klein-Gordon se reduz à equação de Schrödinger para uma partícula sem spin cuja função de onda obtida é um campo escalar. Conforme discutido por Pauli e Weisskopf, uma teoria relativística escalar possibilita a existência de partículas de cargas opostas e sem spin, obedecendo à estatística de Bose-Einstein (Pauli; Weisskopf, 1934). Dessa forma, a falta de um grau de liberdade de spin para as partículas bem descritas pela equação de Klein-Gordon levou à resultados imprecisos na descrição de outras partículas com spin como por exemplo o estudo do elétron na estrutura fina do Hidrogênio (Sakurai; Napolitano, 2020). Contudo, a equação de Klein-Gordon se adequa perfeitamente aos cálculos relacionados a fenômenos físicos envolvendo mésons π (Greiner, 2000).

4.2 Equação de Dirac

Para que fosse possível estabelecer uma densidade de probabilidade definida positiva e dependente apenas da função de onda (e não mais de sua derivada primeira), Paul Dirac propôs em 1928 uma unificação da Mecânica Quântica com a Relatividade Restrita visando uma equação de primeira ordem no tempo e no espaço e que fosse possível interpretar as soluções de energia negativa obtidas anteriormente por Klein-Gordon. Para isso, Dirac sugeriu a seguinte forma para este operador agora sem a raiz quadrada que tanto causou problema para Klein-Gordon:

$$H = c \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{P} + \beta m_0 c^2 = -i\hbar c (\alpha^1 \partial_1 + \alpha^2 \partial_2 + \alpha^3 \partial_3) + \beta m_0 c^2, \quad (4.22)$$

na qual \mathbf{P} é o operador momento e as grandezas α^i (com $i = 1, 2, 3$) e β devem ser determinadas ao relacionar o quadrado do operador hamiltoniano de Dirac (4.22):

$$\begin{aligned} H^2 &= -\hbar^2 c^2 [(\alpha^1)^2 \partial_1^2 + (\alpha^2)^2 \partial_2^2 + (\alpha^3)^2 \partial_3^2 + \alpha^1 \alpha^2 \partial_1 \partial_2 + \alpha^1 \alpha^3 \partial_1 \partial_3 + \alpha^2 \alpha^3 \partial_2 \partial_3 + \\ &+ \alpha^2 \alpha^1 \partial_2 \partial_1 + \alpha^3 \alpha^1 \partial_3 \partial_1 + \alpha^3 \alpha^2 \partial_3 \partial_2] - i\hbar m_0 c^3 [\alpha^1 \partial_1 + \alpha^2 \partial_2 + \alpha^3 \partial_3] \beta + \\ &- i\hbar m_0 c^3 \beta [\alpha^1 \partial_1 + \alpha^2 \partial_2 + \alpha^3 \partial_3] + \beta^2 m_0^2 c^4 \\ &= -\hbar^2 c^2 \sum_{j,k} \frac{\alpha^j \alpha^k + \alpha^k \alpha^j}{2} \partial_j \partial_k - i\hbar m_0 c^3 \sum_j (\alpha^j \beta + \beta \alpha^j) \partial_j + \beta^2 m_0^2 c^4, \quad (4.23) \end{aligned}$$

com a relação energia-momento (2.30), tal que, de acordo com a expressão obtida acima, devemos ter:

$$\alpha^j \alpha^k + \alpha^k \alpha^j = 2\delta_{jk}\mathbb{I}, \quad (4.24)$$

$$\alpha^j \beta + \beta \alpha^j = 0, \quad (4.25)$$

$$\beta^2 = \mathbb{I}, \quad (4.26)$$

$$(\alpha^j)^2 = \mathbb{I}. \quad (4.27)$$

Visto que as componentes de α e β anticomutam então não podem ser valores numéricos. De fato, são matrizes. Utilizando a propriedade do traço do produto, isto é, $Tr(AB) = Tr(BA)$, vemos também que essas matrizes possuem traço nulo:

$$\begin{aligned} \alpha^j \beta = -\beta \alpha^j \Rightarrow \alpha^j \beta^2 = -\beta \alpha^j \beta \Rightarrow \alpha^j &= -\beta \alpha^j \beta \\ Tr(\alpha^j) = -Tr(\beta \alpha^j \beta) = -Tr(\beta^2 \alpha^j) = -Tr(\alpha^j) \Rightarrow Tr(\alpha^j) &= 0, \end{aligned} \quad (4.28)$$

$$\begin{aligned} \alpha^j \beta = -\beta \alpha^j \Rightarrow (\alpha^j)^2 \beta = -\alpha^j \beta \alpha^j \Rightarrow \beta &= -\alpha^j \beta \alpha^j \\ Tr(\beta) = -Tr(\alpha^j \beta \alpha^j) = -Tr((\alpha^j)^2 \beta) = -Tr(\beta) \Rightarrow Tr(\beta) &= 0. \end{aligned} \quad (4.29)$$

Uma vez que $\beta^2 = \mathbb{I} = (\alpha^j)^2$, seus autovalores são ± 1 . Como o traço de ambas é nulo, sua dimensão D deve ser par (Barcelos Neto, 2010). O caso $D = 2$ é descartado pois nele apenas as três matrizes de Pauli anticomutam e são necessárias quatro. Logo, a dimensão das matrizes deve ser $D = 4$. Uma escolha usual é:

$$\alpha^j = \begin{bmatrix} 0 & \sigma^j \\ \sigma^j & 0 \end{bmatrix}, \quad (4.30)$$

$$\beta = \begin{bmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & -\mathbb{I} \end{bmatrix}, \quad (4.31)$$

nas quais \mathbb{I} é a matriz identidade 2x2 e σ^j são as matrizes de Pauli:

$$\sigma^1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (4.32)$$

$$\sigma^2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad (4.33)$$

$$\sigma^3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad (4.34)$$

e que, dado ϵ^{lmn} o tensor de Levi-Civita (Barcelos Neto, 2010), satisfazem a seguinte regra de comutação:

$$[\sigma^l, \sigma^m] = 2i\epsilon^{lmn}\sigma^n. \quad (4.35)$$

Aplicando então o operador hamiltoniano de Dirac (4.22) à uma função de onda $\Psi(x^\mu)$ e utilizando a forma conhecida para este operador na Mecânica Quântica não-relativística (3.43), vemos que:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = [-i\hbar c(\alpha^1\partial_1 + \alpha^2\partial_2 + \alpha^3\partial_3) + \beta m_0 c^2]\Psi, \quad (4.36)$$

onde, rearranjando os termos, multiplicando por β à esquerda e reescrevendo o produto das matrizes α com os operadores diferenciais na forma de contração de índices:

$$\begin{aligned} \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + i\hbar c\alpha^i\partial_i - \beta m_0 c^2\right)\Psi &= 0 \\ \left(i\hbar\beta\frac{\partial}{\partial t} + i\hbar c\beta\alpha^i\partial_i - \beta^2 m_0 c^2\right)\Psi &= 0 \\ \left(i\hbar\beta\frac{\partial}{\partial(ct)} + i\hbar\beta\alpha^i\partial_i - m_0 c\right)\Psi &= 0 \\ (i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - m_0 c)\Psi &= 0. \end{aligned} \quad (4.37)$$

Obtemos então a famosa equação de Dirac. Observe que esta é invariante de Lorentz (como demandado inicialmente) devido à contração dos índices do quadri-operador diferencial ∂_μ com as chamadas matrizes gamma γ^μ :

$$\gamma^0 = \beta, \quad (4.38)$$

$$\gamma^i = \beta\alpha^i, \text{ com } i = 1, 2, 3. \quad (4.39)$$

Ao elevar a equação (4.37) ao quadrado (tomando seu complexo conjugado), temos:

$$\begin{aligned} (i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - m_0 c)(-i\hbar\gamma^\nu\partial_\nu - m_0 c)\Psi &= 0 \\ (\hbar^2\gamma^\mu\gamma^\nu\partial_\mu\partial_\nu - i\hbar m_0 c\gamma^\mu\partial_\mu + i\hbar m_0 c\gamma^\nu\partial_\nu + m_0^2 c^2)\Psi &= 0 \\ (\hbar^2\gamma^\mu\gamma^\nu\partial_\mu\partial_\nu + m_0^2 c^2)\Psi &= 0, \end{aligned} \quad (4.40)$$

onde a relação de anticomutação das matrizes γ^μ é dada por (Greiner, 2000):

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = \gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}, \quad (4.41)$$

na qual $g^{\mu\nu}$ é a métrica indicada em (2.10). Podemos então trabalhar os índices do primeiro termo à esquerda na equação (4.40) da forma:

$$\gamma^\mu \gamma^\nu \partial_\mu \partial_\nu = (2g^{\mu\nu} - \gamma^\nu \gamma^\mu) \partial_\mu \partial_\nu = 2g^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu - \gamma^\nu \gamma^\mu \partial_\mu \partial_\nu. \quad (4.42)$$

Como os índices estão contraídos indicando soma, fazemos $\mu \longleftrightarrow \nu$ no último termo acima. Além disso, como as derivadas comutam, então:

$$\gamma^\mu \gamma^\nu \partial_\mu \partial_\nu = 2g^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu - \gamma^\mu \gamma^\nu \partial_\nu \partial_\mu = 2g^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu - \gamma^\mu \gamma^\nu \partial_\mu \partial_\nu, \quad (4.43)$$

e, rearranjando os termos:

$$2\gamma^\mu \gamma^\nu \partial_\mu \partial_\nu = 2g^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu \Rightarrow \gamma^\mu \gamma^\nu \partial_\mu \partial_\nu = \partial_\mu \partial^\mu. \quad (4.44)$$

Portanto, substituindo os resultados acima na equação (4.40) retornamos à equação de tipo Klein-Gordon:

$$(\hbar^2 \gamma^\mu \gamma^\nu \partial_\mu \partial_\nu + m_0^2 c^2) \Psi = (\hbar^2 \partial_\mu \partial^\mu + m_0^2 c^2) \Psi = 0 \Rightarrow \left[\partial_\mu \partial^\mu + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right] \Psi = 0. \quad (4.45)$$

Entretanto, a interpretação da função de onda agora é outra. Uma vez que as matrizes gamma de Dirac são $D = 4$, então a função de onda $\Psi(x^\mu)$ agora deve ser uma matriz coluna de quatro componentes chamada de bi-spinor. A explicação correta para a expressão (4.45) é que ao elevarmos ao quadrado a equação de Dirac retornamos à uma equação do tipo Klein-Gordon para cada uma das componentes de Ψ (Stepanow, 2010).

Visto que as matrizes de Pauli são utilizadas para construir as matrizes de momento angular $j = 1/2$ (Tannoudji *et al.*, 2019) e que empregamos estas para construir as matrizes gamma então é natural pensarmos que a equação de Dirac pode ser perfeitamente aplicada para analisar um sistema de uma partícula de spin $1/2$. Como o bi-spinor possui quatro componentes, duas são para a solução de energia positiva e as outras duas para a solução de energia negativa (como estamos trabalhando com spin devemos considerar suas projeções *up* e *down* para cada autovalor de energia positivo e negativo).

Sejam então $P^0 = +\sqrt{\mathbf{p}^2 + m_0^2 c^2}$ e $\chi^{(\pm)}$ dois spinores linearmente independentes de duas componentes cada, as soluções da equação de Dirac livre (sem termo de energia potencial) respectivamente para as componentes de energia positiva e de energia negativa são da forma

(Wolschin, 2015):

$$\Psi^{(+)}(x^\mu) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(P^0 ct - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})\right] \begin{bmatrix} \chi^{(+)} \\ \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{m_0 c + P^0} \chi^{(+)} \end{bmatrix}, \quad (4.46)$$

$$\Psi^{(-)}(x^\mu) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(P^0 ct - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})\right] \begin{bmatrix} \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{m_0 c + P^0} \chi^{(-)} \\ \chi^{(-)} \end{bmatrix}. \quad (4.47)$$

Podemos visualizar também a validade da equação de Dirac para partículas de spin 1/2 ao calcular o comutador do hamiltoniano (4.22) com o momento angular total \mathbf{J} do sistema que deverá ser a soma do momento angular orbital \mathbf{L} com um termo adicional que também deve ter a dimensão de momento angular.

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \kappa \boldsymbol{\Sigma}, \quad (4.48)$$

onde κ é uma constante de proporcionalidade que será calculada posteriormente. Para isso, introduzimos o seguinte operador:

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{bmatrix}, \quad (4.49)$$

e, ao aplicar o comutador com o hamiltoniano de Dirac, ficamos com:

$$\begin{aligned} [H, \mathbf{J}] &= c[\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{P}, \mathbf{L}] + c\kappa[\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{P}, \boldsymbol{\Sigma}] + m_0 c^2 \underbrace{[\beta, \mathbf{L}]}_{=0} + m_0 c^2 \kappa \underbrace{[\beta, \boldsymbol{\Sigma}]}_{=0} \\ &= c[\alpha^i P^i, L^j] + c\kappa[\alpha^i P^i, \Sigma^j]. \end{aligned} \quad (4.50)$$

Vamos calcular cada um dos comutadores acima separadamente aplicando as propriedades de comutação dos operadores posição e momento indicadas em (3.16), (3.27) e (3.31). Começando com o primeiro:

$$\begin{aligned} [\alpha^i P^i, L^j] &= [\alpha^i P^i, \epsilon^{jmn} X^m P^n] \\ &= \epsilon^{jmn} \alpha^i [P^i, X^m P^n] \\ &= \epsilon^{jmn} \alpha^i \left([P^i, X^m] P^n + X^m \underbrace{[P^i, P^n]}_{=0} \right) \\ &= \epsilon^{jmn} \alpha^i (-i\hbar \delta^{im} P^n) \\ &= -i\hbar \epsilon^{jmn} \alpha^m P^n \\ &= -i\hbar \boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{P}, \end{aligned} \quad (4.51)$$

e em seguida o segundo termo, utilizando as definições (4.30) e (4.49), além da relação em (4.35):

$$\begin{aligned}
[\alpha^i P^i, \Sigma^j] &= [\alpha^i, \Sigma^j] P^i + \alpha^i \underbrace{[P^i, \Sigma^j]}_{=0} \\
&= 2i \epsilon^{ijk} \alpha^k P^i \\
&= 2i \boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{P}.
\end{aligned} \tag{4.52}$$

Juntando então os resultados obtidos em (4.51) e (4.52) na expressão (4.50) e tomando que o comutador do hamiltoniano com o momento angular total deve ser nulo para que possamos escrever uma base comum de tais operadores, então:

$$-i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{P} + 2i c \kappa \boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{P} = 0 \Rightarrow \kappa = \frac{\hbar}{2}. \tag{4.53}$$

Logo, o momento angular total \mathbf{J} deve ser a soma do momento angular orbital \mathbf{L} com um momento angular intrínseco $\hbar/2 \boldsymbol{\Sigma}$. Foi possível verificar então que, de acordo com o hamiltoniano proposto por Dirac, a partícula em estudo deve possuir spin $1/2$.

Por fim, nos resta entender a interpretação probabilística da função de onda de Dirac. Para isso, consideramos a equação de Dirac (4.37) e seu complexo transposto e conjugado, na forma:

$$i\hbar\beta \frac{\partial}{\partial ct} \Psi = -i\hbar\gamma^i \frac{\partial}{\partial x^i} \Psi + m_0 c \Psi \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -i\hbar c \alpha^i \frac{\partial}{\partial x^i} \Psi + m_0 c^2 \beta \Psi, \tag{4.54}$$

$$-i\hbar\beta \frac{\partial}{\partial ct} \Psi^\dagger = i\hbar\gamma^i \frac{\partial}{\partial x^i} \Psi^\dagger + m_0 c \Psi^\dagger \Rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^\dagger = i\hbar c \alpha^i \frac{\partial}{\partial x^i} \Psi^\dagger + m_0 c^2 \beta \Psi^\dagger. \tag{4.55}$$

Multiplicamos (4.54) por Ψ^\dagger e (4.55) por Ψ , ambos à esquerda. Em seguida, subtraímos as equações resultantes:

$$\begin{aligned}
i\hbar \left(\Psi^\dagger \frac{\partial}{\partial t} \Psi + \Psi \frac{\partial}{\partial t} \Psi^\dagger \right) &= -i\hbar c \left(\Psi^\dagger \alpha^i \frac{\partial}{\partial x^i} \Psi + \Psi \alpha^i \frac{\partial}{\partial x^i} \Psi^\dagger \right) \\
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^\dagger \Psi) &= -i\hbar c \frac{\partial}{\partial x^i} (\Psi^\dagger \alpha^i \Psi),
\end{aligned} \tag{4.56}$$

e obtemos por fim uma equação da continuidade, tal que:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\Psi^\dagger \Psi) + \frac{\partial}{\partial x^i} (\Psi^\dagger c \alpha^i \Psi) = 0, \tag{4.57}$$

na qual identificamos a densidade de probabilidade ρ e as componentes da corrente de probabilidade \mathbf{J} para a equação de Dirac como:

$$\rho_D = \Psi^\dagger \Psi, \tag{4.58}$$

$$\mathbf{J}_D = \Psi^\dagger c \boldsymbol{\alpha} \Psi. \tag{4.59}$$

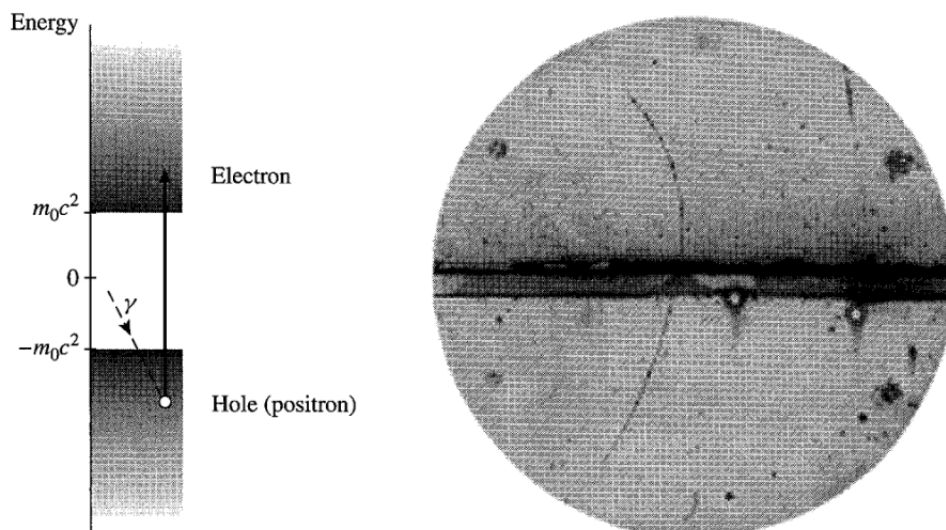
Ao contrário da equação de Klein-Gordon, observe que ρ agora é definida positiva para a equação de Dirac e, portanto, podemos assumir a interpretação dessa grandeza como uma densidade de probabilidade:

$$\rho = \Psi^\dagger \Psi = \sum \Psi_i^* \Psi_i > 0. \quad (4.60)$$

Os resultados obtidos por Dirac levou a comunidade científica a crer que esse formalismo era a direção correta a ser tomadada pela Mecânica Quântica Relativística (Sakurai; Napolitano, 2020). De fato, as soluções para partículas livres de spin $1/2$ no formalismo proposto por Dirac levaram à melhores interpretações dos autovalores de energia negativa e, posteriormente, à descoberta do pósitron (a antipartícula do elétron). A invariância de (4.37) sob transformações de Lorentz também validaram a equação de Dirac como uma equação de onda relativisticamente aceita (Greiner, 2000).

Para explicar as soluções de energia negativa, Dirac considerou todo o espectro de energias acessíveis. Ele supôs que um elétron que estivesse no "*mar de energias negativas*" não poderia ocupar um espaço no "*mar de energias positivas*" devido ao princípio da exclusão de Pauli. Contudo, seria possível um fóton altamente enérgico excitar o elétron do mar negativo até as regiões do mar positivo onde a partícula poderia ser observada. O elétron excitado deixaria então um buraco no mar negativo. Esse buraco também poderia ser observado com propriedades similares às do elétron mas com carga positiva: essa antipartícula foi denominada pósitron. No experimento realizado (Anderson, 1933), foi possível detectá-la devido a diferença na curvatura realizada por tal antipartícula ao perder energia.

Figura 3 – Esquema proposto por Dirac para explicar as energias negativas e a validação experimental de Anderson para o pósitron.



Fonte: Sakurai; Napolitano (2020).

5 OPERADOR DE TRANSLAÇÃO NO ESPAÇO-TEMPO DE MINKOWSKI

Neste capítulo introduziremos uma forma para o operador de translação no espaço-tempo utilizando a métrica de Minkowski usual. Deduziremos a equação de Klein-Gordon para tal operador e, a partir da solução da equação diferencial encontrada, calcularemos a energia da partícula livre que deverá estar associada à relação energia-momento da Relatividade Especial. Em seguida, desenvolveremos a equação de Dirac para tal operador na qual também utilizaremos a solução obtida para calcular a energia de um elétron na presença de um campo eletromagnético externo e verificaremos no termo de energia referente ao acoplamento spin-órbita o valor correto da razão giromagnética do elétron. Posteriormente, trabalharemos com a métrica proposta para o operador de translação dependente da posição, definiremos a atuação de tal operador no ket de estado do sistema, calcularemos o quadri-operador de momento nesse novo espaço-tempo o qual será utilizado para encontrar uma equação do tipo Klein-Gordon modificada. Utilizaremos uma mudança de variável para resolver tal equação e a partir de sua solução verificaremos a relação energia-momento. Em seguida, tomaremos o limite não-relativístico na equação de Klein-Gordon modificada e considerando novamente o tempo como parâmetro retornaremos à equação de Schrödinger modificada. Por fim, calcularemos a equação da continuidade e verificaremos as expressões obtidas para a suposta densidade de probabilidade e para a corrente de probabilidade nesse espaço-tempo modificado.

5.1 STTO na Métrica de Minkowski Usual

Inspirados nos operadores de translação espacial (3.17) e de evolução temporal (3.32), desejamos estudar um operador de translação no espaço-tempo de Minkowski que leve um estado da posição inicial $x_{(0)}^\mu$ até uma posição final x^μ . Para isso, devemos considerar tanto translações espaciais quanto temporais (ou melhor dizendo, uma translação do sistema de coordenadas ct).

Na Mecânica Quântica não-relativística vimos que existem dois tipos de execuções: ativas (3.18) e passivas (3.36). Para as transformações de Lorentz a execução passiva é mais adequada pois nela o mesmo sistema físico é observado de diferentes referenciais inerciais (Greiner; Muller, 2001). Dessa forma, definimos o operador $\tau(dx^\mu)$ de translação infinitesimal no espaço-tempo de Minkowski (*Spacetime Translation Operator* ou STTO) e sua ação na função de onda $\psi(x^\mu)$ tal que:

$$\tau(dx^\mu) \psi(x^\mu) = \psi(x^\mu + dx^\mu), \quad (5.1)$$

e, ao aplicar o operador no ket na representação de posição, temos:

$$\tau(dx^\mu) |x^\mu\rangle = |x^\mu + dx^\mu\rangle. \quad (5.2)$$

Análogo ao procedimento adotado anteriormente, vamos utilizar os operadores hamiltoniano e momento para serem os geradores de deslocamento temporal e espacial, respectivamente. Como estamos utilizando um tratamento relativístico, o ideal seria associar ambos esses operadores em um único ente matemático. Para isso, empregaremos um análogo à (2.28) mas agora com os operadores hamiltoniano e momento respectivos aos autovalores encontrados no quadri-momento. Dessa forma, observe que o quadri-operador momento P^μ é hermitiano, pois suas componentes são os operadores também hermitianos H e \mathbf{P} , ou seja, $P^\mu = (P^\mu)^\dagger$. Introduzimos então o operador de translação infinitesimal no espaço-tempo de Minkowski:

$$\tau(x^\mu + dx^\mu, x^\mu) \equiv \tau(dx^\mu) = \mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} P_\mu dx^\mu. \quad (5.3)$$

Também desejamos que esse operador satisfaça algumas propriedades básicas assim como os operadores de translação espacial e de evolução temporal na Mecânica Quântica não-relativística. Por exemplo, podemos verificar a unitariedade:

$$\begin{aligned} \tau^\dagger(dx^\mu)\tau(dx^\mu) &= \left[\mathbb{I} + \frac{i}{\hbar} (P_\mu)^\dagger dx^\mu \right] \left[\mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} P_\mu dx^\mu \right] \\ &= \mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} [P_\mu - (P_\mu)^\dagger] dx^\mu + \mathcal{O}[(dx^\mu)^2] \\ &\approx \mathbb{I}, \end{aligned} \quad (5.4)$$

e a composição utilizando (5.2):

$$\begin{aligned} \tau(dx^\mu)\tau(dx^\nu) |x^\alpha\rangle &= \tau(dx^\mu) |x^\alpha + dx^\nu\rangle \\ &= |x^\alpha + dx^\nu + dx^\mu\rangle \\ &= \tau(dx^\mu + dx^\nu) |x^\alpha\rangle. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Por fim, note que ao tomarmos $dx^\mu \rightarrow 0$ em (5.3) o operador se reduz à unidade e não altera o estado do sistema. Devido à propriedade da composição, no caminho dos pontos $0 \rightarrow 1 \rightarrow 2$ podemos escrever:

$$\tau(x_{(2)}^\mu, x_{(0)}^\mu) = \tau(x_{(2)}^\mu, x_{(1)}^\mu)\tau(x_{(1)}^\mu, x_{(0)}^\mu), \quad (5.6)$$

no qual, tomando $x_{(2)}^\mu = x^\mu + dx^\mu$ e $x_{(1)}^\mu = x^\mu$, temos:

$$\begin{aligned}\tau(x^\mu + dx^\mu, x_{(0)}^\mu) &= \tau(x^\mu + dx^\mu, x^\mu)\tau(x^\mu, x_{(0)}^\mu) \\ &= \left[1 - \frac{i}{\hbar}P_\mu dx^\mu\right]\tau(x^\mu, x_{(0)}^\mu) \\ &= \tau(x^\mu, x_{(0)}^\mu) - \frac{i}{\hbar}P_\mu dx^\mu\tau(x^\mu, x_{(0)}^\mu),\end{aligned}\quad (5.7)$$

e, enfim, vemos que:

$$\tau(x^\mu + dx^\mu, x_{(0)}^\mu) - \tau(x^\mu, x_{(0)}^\mu) = -\frac{i}{\hbar}P_\mu dx^\mu\tau(x^\mu, x_{(0)}^\mu),\quad (5.8)$$

onde, ao tomar o limite quando $dx^\mu \rightarrow 0$, ficamos com:

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu}\tau(x^\mu, x_{(0)}^\mu) = -\frac{i}{\hbar}P_\mu\tau(x^\mu, x_{(0)}^\mu) \Rightarrow i\hbar\partial_\mu\tau(x^\mu, x_{(0)}^\mu) = P_\mu\tau(x^\mu, x_{(0)}^\mu).\quad (5.9)$$

Propomos então uma solução para a equação diferencial acima, do tipo:

$$\tau(x^\mu, x_{(0)}^\mu) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}P_\mu(x^\mu - x_{(0)}^\mu)\right] = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}[E(t - t_0) - \mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)]\right].\quad (5.10)$$

Comparando ambos os lados da expressão final na equação (5.9) vemos que o quadri-operador momento P^μ se reduz às expressões já conhecidas dos operadores momento (3.30) e hamiltoniano (3.43):

$$P^\mu \equiv i\hbar\partial^\mu = i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial(ct)}, -\nabla\right) = \left(\frac{H}{c}, \mathbf{P}\right).\quad (5.11)$$

Também podemos verificar essa expressão do quadri-operador momento de forma análoga ao que fizemos para calcular o operador momento tridimensional da Mecânica Quântica não-relativística. Para isso, vamos definir a relação de ortonormalidade e de completeza, respectivamente, para uma base na representação de posição do espectro contínuo no espaço-tempo de Minkowski. Seja então g o determinante do tensor de métrica conforme indicado no quadri-volume infinitesimal (2.15):

$$\langle x^\mu | x^\nu \rangle = \frac{1}{\sqrt{-g}}\delta(x^\mu - x^\nu),\quad (5.12)$$

$$\int d^4x\sqrt{-g}|x^\mu\rangle\langle x^\mu| = \mathbb{I}.\quad (5.13)$$

Aplicamos então o operador de translação em um ket $|\psi\rangle$ qualquer e, lembrando que estamos trabalhando com execuções passivas como em (5.1), inserimos uma relação de completeza (5.13) e expandimos a função de onda até primeira ordem em série de Taylor, tal que:

$$\begin{aligned} \left(\mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} P_\mu \Delta x^\mu\right) |\psi\rangle &= \int d^4x \sqrt{-g} \tau(\Delta x^\nu) |x^\nu\rangle \langle x^\nu | \psi\rangle \\ &= \int d^4x \sqrt{-g} |x^\nu + \Delta x^\nu\rangle \langle x^\nu | \psi\rangle \\ &= \int d^4x \sqrt{-g} |x^\nu\rangle \langle x^\nu + \Delta x^\nu | \psi\rangle \\ &= \int d^4x \sqrt{-g} |x^\nu\rangle \left(\langle x^\nu | \psi\rangle + \Delta x^\nu \frac{\partial}{\partial x^\nu} \langle x^\nu | \psi\rangle \right), \end{aligned}$$

onde, ao aplicar $\langle x^\mu |$ pela esquerda na expressão acima e utilizando a relação de ortonormalidade (5.12), ficamos com:

$$\begin{aligned} \left(\mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} P_\mu \Delta x^\mu\right) \langle x^\mu | \psi\rangle &= \int d^4x \sqrt{-g} \langle x^\mu | x^\nu\rangle \left(\langle x^\nu | \psi\rangle + \Delta x^\nu \frac{\partial}{\partial x^\nu} \langle x^\nu | \psi\rangle \right) \\ &= \int d^4x \delta(x^\mu - x^\nu) \left(\langle x^\nu | \psi\rangle + \Delta x^\nu \frac{\partial}{\partial x^\nu} \langle x^\nu | \psi\rangle \right), \end{aligned}$$

na qual, utilizando a propriedade da função delta (3.12), obtemos:

$$\left(\mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} P_\mu \Delta x^\mu\right) \langle x^\mu | \psi\rangle = \langle x^\mu | \psi\rangle + \Delta x^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} \langle x^\mu | \psi\rangle, \quad (5.14)$$

e, ao comparar ambos os lados da expressão acima, obtemos a mesma expressão para o quadri-operador momento em termos do quadri-operador diferencial, tal que $P_\mu = i\hbar\partial_\mu$ como em (5.11), mas dessa vez com as componentes covariantes de tal operador.

5.1.1 Equação de Klein-Gordon para o STTO

Agora faremos um procedimento análogo ao desenvolvimento da equação de Klein-Gordon para a função de onda mas para o operador de translação no espaço-tempo de Minkowski. Anteriormente, em (4.3), aplicávamos o operador hamiltoniano duas vezes consecutivas na função de onda e obtínhamos a equação de Klein-Gordon. Nesse caso, como estamos trabalhando com o quadri-operador momento P^μ que contém ambos os operadores hamiltoniano e momento, vamos aplicá-lo em ambos os lados da equação (5.9):

$$P^\mu \partial_\mu \tau(x^\mu, x_{(0)}^\mu) = -\frac{i}{\hbar} P^\mu P_\mu \tau(x^\mu, x_{(0)}^\mu). \quad (5.15)$$

Aqui iremos empregar as definições do quadri-momento encontradas ao longo deste trabalho. Para o lado direito, uma vez que o quadri-momento é definido a partir da

quadri-velocidade realizaremos a contração de índices como em (2.29). Para o lado esquerdo, utilizaremos a definição do quadri-operador momento (5.11). Daí temos que, substituindo ambas as definições do lado direito e esquerdo, respectivamente, na equação (5.15):

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_\mu\partial^\mu\tau(x^\mu, x^\mu_{(0)}) &= -\frac{i}{\hbar}m_0^2c^2\tau(x^\mu, x^\mu_{(0)}) \\ \hbar^2\partial_\mu\partial^\mu\tau(x^\mu, x^\mu_{(0)}) &= -m_0^2c^2\tau(x^\mu, x^\mu_{(0)}) \\ \left[\partial_\mu\partial^\mu + \frac{m_0^2c^2}{\hbar^2}\right]\tau(x^\mu, x^\mu_{(0)}) &= 0, \end{aligned} \quad (5.16)$$

e obtemos uma equação do tipo Klein-Gordon para o operador de translação no espaço-tempo de Minkowski. Seja então $\partial_\mu\partial^\mu$ o operador D'Alembertiano (4.6), aplicamos as derivadas na solução proposta para o operador em (5.10):

$$\left[\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + \frac{m_0^2c^2}{\hbar^2}\right]\exp\left[-\frac{i}{\hbar}[E(t-t_0) - \mathbf{p}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}_0)]\right] = 0, \quad (5.17)$$

e recuperamos por fim a relação energia-momento conhecida na Relatividade Restrita como em (2.30):

$$-\frac{1}{c^2\hbar^2}E^2 + \frac{1}{\hbar^2}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + \frac{m_0^2c^2}{\hbar^2} = 0 \Rightarrow E^2 = \mathbf{p}^2c^2 + m_0^2c^4. \quad (5.18)$$

5.1.2 Equação de Dirac para o STTO

Agora vamos desenvolver o análogo ao formalismo de Dirac para o operador de translação no espaço-tempo de Minkowski. O hamiltoniano proposto por Dirac (4.22) relaciona a energia da partícula com seu momento linear a partir das matrizes α^j e β e podemos escrevê-lo da forma:

$$H = c\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{P} + \beta m_0c^2 \Rightarrow \frac{H}{c} - \boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{P} = \beta m_0c, \quad (5.19)$$

no qual multiplicando ambos os lados por β à esquerda e utilizando as definições das matrizes gamma em (4.38) e (4.39) e do quadri-operador momento em (5.11), temos:

$$\beta\frac{H}{c} - \boldsymbol{\gamma}\cdot\mathbf{P} = \beta^2m_0c \Rightarrow \gamma^\mu P_\mu = m_0c. \quad (5.20)$$

Uma vez que o hamiltoniano de Dirac nos leva à uma formulação covariante da Mecânica Quântica Relativística e extendendo sua validade ao formalismo do operador de translação no espaço-tempo de Minkowski, podemos multiplicar a equação (5.9) por γ^μ à

esquerda e, utilizando o resultado em (5.20), ficamos com:

$$\begin{aligned}
i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu\tau(x^\mu, x^\mu_{(0)}) &= \gamma^\mu P_\mu\tau(x^\mu, x^\mu_{(0)}) \\
(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - \gamma^\mu P_\mu)\tau(x^\mu, x^\mu_{(0)}) &= 0 \\
(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - m_0c)\tau(x^\mu, x^\mu_{(0)}) &= 0.
\end{aligned} \tag{5.21}$$

Obtemos então uma equação do tipo Dirac para o operador de translação no espaço-tempo de Minkowski e iremos resolvê-la considerando um elétron (spin 1/2 e autovalor de energia positiva) na presença de um campo eletromagnético externo. Para isso, utilizaremos o acoplamento mínimo tal que o quadri-operador momento se torne:

$$P^\mu \rightarrow P^\mu - \frac{e}{c}A^\mu, \tag{5.22}$$

onde A^μ é o quadri-potencial cujas componentes se relacionam com o potencial escalar ϕ e o potencial vetor \mathbf{A} do eletromagnetismo:

$$A^\mu = (\phi, \mathbf{A}). \tag{5.23}$$

Vamos escrever as componentes do operador de translação tal que τ_{sup} e τ_{inf} sejam as componentes superiores e inferiores, respectivamente, do bi-spinor relacionado ao operador de translação em (5.21):

$$\tau(x^\mu, x^\mu_{(0)}) = \begin{bmatrix} \tau_{\text{sup}} \\ \tau_{\text{inf}} \end{bmatrix}. \tag{5.24}$$

Reescrevendo a equação do tipo Dirac (5.21) com o acoplamento mínimo indicado em (5.22):

$$\begin{aligned}
\left[\gamma^\mu \left(P_\mu - \frac{e}{c} A_\mu \right) - m_0 c \right] \begin{bmatrix} \tau_{\text{sup}} \\ \tau_{\text{inf}} \end{bmatrix} &= 0 \\
\left[\gamma^\mu P_\mu - \frac{e}{c} \gamma^\mu A_\mu - m_0 c \right] \begin{bmatrix} \tau_{\text{sup}} \\ \tau_{\text{inf}} \end{bmatrix} &= 0 \\
\left[\beta \frac{H}{c} - \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{P} - \frac{e}{c} \beta \phi + \frac{e}{c} \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{A} - m_0 c \right] \begin{bmatrix} \tau_{\text{sup}} \\ \tau_{\text{inf}} \end{bmatrix} &= 0 \\
\left[\beta H - c \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{P} - e \phi \beta + e \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{A} - m_0 c^2 \right] \begin{bmatrix} \tau_{\text{sup}} \\ \tau_{\text{inf}} \end{bmatrix} &= 0 \\
\left[\beta H - e \phi \beta - c \boldsymbol{\gamma} \cdot \left(\mathbf{P} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) - m_0 c^2 \right] \begin{bmatrix} \tau_{\text{sup}} \\ \tau_{\text{inf}} \end{bmatrix} &= 0.
\end{aligned} \tag{5.25}$$

Sejam $\mathbf{\Pi}$ e \mathbf{P} o momento cinético e momento canônico, respectivamente, tal que (Goldstein *et al.*, 2001):

$$\mathbf{\Pi} = \mathbf{P} - \frac{e}{c}\mathbf{A}, \quad (5.26)$$

e escrevendo explicitamente a expressão (5.25) na forma matricial, temos:

$$\left(\begin{bmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & -\mathbb{I} \end{bmatrix} H - e\phi \begin{bmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & -\mathbb{I} \end{bmatrix} - c \begin{bmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ -\boldsymbol{\sigma} & 0 \end{bmatrix} \cdot \mathbf{\Pi} - m_0c^2 \begin{bmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & \mathbb{I} \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} \tau_{\text{sup}} \\ \tau_{\text{inf}} \end{bmatrix} = 0, \quad (5.27)$$

na qual operando as multiplicações matriciais e rearranjando os termos obtemos o seguinte sistema:

$$\begin{cases} H\tau_{\text{sup}} = e\phi\tau_{\text{sup}} + c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{\Pi}\tau_{\text{inf}} + m_0c^2\tau_{\text{sup}}, \\ H\tau_{\text{inf}} = e\phi\tau_{\text{inf}} + c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{\Pi}\tau_{\text{sup}} - m_0c^2\tau_{\text{inf}}. \end{cases} \quad (5.28)$$

Estamos interessados somente nos autovalores do operador H de energia positiva (a partícula em estudo é o elétron, as energias negativas estão relacionadas com sua antipartícula, o pósitron). A partir daqui, vamos considerar o limite não-relativístico, isto é, a energia referente à massa de repouso é muito maior que as outras energias envolvidas.

Voltamos nossa atenção à segunda equação do sistema (5.28). Nela temos, aproximadamente:

$$\begin{aligned} H\tau_{\text{inf}} &\approx m_0c^2\tau_{\text{inf}} = e\phi\tau_{\text{inf}} + c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{\Pi}\tau_{\text{sup}} - m_0c^2\tau_{\text{inf}} \\ &\Rightarrow (2m_0c^2 - e\phi)\tau_{\text{inf}} = c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{\Pi}\tau_{\text{sup}} \\ &\approx 2m_0c^2\tau_{\text{inf}} = c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{\Pi}\tau_{\text{sup}} \\ &\Rightarrow \tau_{\text{inf}} = \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{\Pi}}{2m_0c}\tau_{\text{sup}}. \end{aligned} \quad (5.29)$$

Portanto, uma possível solução para o operador de translação com autovalores de energia positiva é da forma:

$$\tau(x^\mu, x_{(0)}^\mu) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} [E(t - t_0) - \mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)] \right] \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{\Pi}}{2m_0c} \end{bmatrix} = f(x^\mu) \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{\Pi}}{2m_0c} \end{bmatrix}, \quad (5.30)$$

na qual reescrevemos a exponencial como $f(x^\mu)$ para melhor visualização. Substituímos então a solução encontrada acima na primeira equação do sistema (5.28), aplicando o operador hamiltoniano e as relações entre as componentes como em (5.29):

$$H\tau_{\text{sup}} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} [E(t - t_0) - \mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)] \right] = E f(x^\mu), \quad (5.31)$$

$$e\phi\tau_{\text{sup}} + c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{\Pi}\tau_{\text{inf}} + m_0c^2\tau_{\text{sup}} = \left[e\phi + \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{\Pi})^2}{2m_0} + m_0c^2 \right] f(x^\mu), \quad (5.32)$$

e obtemos que:

$$E f(x^\mu) = \left[e\phi + \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi})^2}{2m_0} + m_0c^2 \right] f(x^\mu), \quad (5.33)$$

onde podemos trabalhar o termo ao quadrado dentro dos parênteses utilizando a seguinte relação (Barcelos Neto, 2010):

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi})^2 &= (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi}) \\ &= \boldsymbol{\Pi} \cdot \boldsymbol{\Pi} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{\Pi} \times \boldsymbol{\Pi}) \\ &= \left(\mathbf{P} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \left[\left(\mathbf{P} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) \times \left(\mathbf{P} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) \right] \\ &= \left(\mathbf{P} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \left[\mathbf{P} \times \mathbf{P} - \frac{e}{c}(\mathbf{P} \times \mathbf{A} + \mathbf{A} \times \mathbf{P}) + \frac{e^2}{c^2}\mathbf{A}^2 \right]. \end{aligned} \quad (5.34)$$

O último termo do parênteses acima, por ser da ordem $1/c^2$, é muito pequeno e portanto será negligenciado. O primeiro termo dos parênteses, ao aplicá-lo na expressão indicada em (5.33), é nulo devido às propriedades vetoriais do rotacional do gradiente (Butkov, 1978):

$$\mathbf{P} \times [\mathbf{P} f(x^\mu)] = -\hbar^2 \boldsymbol{\nabla} \times [\boldsymbol{\nabla} f(x^\mu)] = 0. \quad (5.35)$$

Agora vamos calcular o restante dos termos de (5.34) dentro dos parênteses. Considerando um campo magnético \mathbf{B} homogêneo e fraco temos (Jackson, 1999):

$$\mathbf{B} = \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A}, \quad (5.36)$$

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{X}, \quad (5.37)$$

além de levar em conta o gauge de Coulomb tal que (Jackson, 1999):

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{A} = 0, \quad (5.38)$$

e, portanto, utilizando o operador momento (3.30), aplicando a regra da cadeia e utilizando a definição do campo magnético a partir do potencial vetor como indicado em (5.36) temos:

$$\begin{aligned} (\mathbf{P} \times \mathbf{A} + \mathbf{A} \times \mathbf{P}) f(x^\mu) &= -i\hbar \boldsymbol{\nabla} \times [f(x^\mu)\mathbf{A}] - i\hbar \mathbf{A} \times [\boldsymbol{\nabla} f(x^\mu)] \\ &= -i\hbar \left\{ f(x^\mu)(\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A}) + [\boldsymbol{\nabla} f(x^\mu)] \times \mathbf{A} + \mathbf{A} \times [\boldsymbol{\nabla} f(x^\mu)] \right\} \\ &= -i\hbar f(x^\mu)(\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A}) \\ &= -i\hbar f(x^\mu)\mathbf{B}, \end{aligned} \quad (5.39)$$

onde vemos que os dois últimos termos entre as chaves acima se anularam devido às propriedades do produto vetorial. Por fim, calculamos o termo restante em (5.34), novamente negligenciando

os termos de ordem $1/c^2$:

$$\begin{aligned} \left(\mathbf{P} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 f(x^\mu) &= \left[\mathbf{P}^2 - \frac{e}{c}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{P} + \mathbf{P} \cdot \mathbf{A}) + \frac{e^2}{c^2}\mathbf{A}^2\right] f(x^\mu) \\ &\approx \left[\mathbf{P}^2 - \frac{e}{c}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{P} + \mathbf{P} \cdot \mathbf{A})\right] f(x^\mu). \end{aligned} \quad (5.40)$$

Tomando apenas o segundo termo da chave acima, temos então, sabendo que o operador momento angular $\mathbf{L} = \mathbf{X} \times \mathbf{P}$ (Tannoudji *et al.*, 2019):

$$\begin{aligned} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{P} + \mathbf{P} \cdot \mathbf{A})f(x^\mu) &= -i\hbar \left\{ \mathbf{A} \cdot [\nabla f(x^\mu)] + \nabla \cdot [\mathbf{A}f(x^\mu)] \right\} \\ &= -i\hbar \left\{ \mathbf{A} \cdot [\nabla f(x^\mu)] + (\nabla \cdot \mathbf{A})f(x^\mu) + \mathbf{A} \cdot [\nabla f(x^\mu)] \right\}, \end{aligned} \quad (5.41)$$

na qual, utilizando a definição do potencial vetor em termos do campo magnético e do operador posição como indicado em (5.37) e o gauge estabelecido em (5.38), vemos que:

$$\begin{aligned} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{P} + \mathbf{P} \cdot \mathbf{A})f(x^\mu) &= -2i\hbar\mathbf{A} \cdot [\nabla f(x^\mu)] \\ &= 2(\mathbf{A} \cdot \mathbf{P})f(x^\mu) \\ &= 2 \left[\frac{1}{2}(\mathbf{B} \times \mathbf{X}) \cdot \mathbf{P} \right] f(x^\mu) \\ &= [\mathbf{B} \cdot (\mathbf{X} \times \mathbf{P})] f(x^\mu) \\ &= (\mathbf{B} \cdot \mathbf{L})f(x^\mu). \end{aligned} \quad (5.42)$$

As matrizes de spin $1/2$ podem ser escritas em termos das matrizes de Pauli (4.32), (4.33) e (4.34), tal que (Griffiths, 2018):

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}, \quad (5.43)$$

e, finalmente, unindo os resultados encontrados em (5.35), (5.39) e (5.42) na equação (5.33) e sabendo que o autovalor de energia E é igual à energia da massa de repouso mais um termo ϵ , temos, após aplicar os operadores corretamente:

$$\begin{aligned} E f(x^\mu) &= \left\{ e\phi + \frac{1}{2m_0} \left[\mathbf{P}^2 - \frac{e}{c}(\mathbf{B} \cdot \mathbf{L}) - \frac{ie}{c}(-i\hbar)\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \right] + m_0c^2 \right\} f(x^\mu) \\ (m_0c^2 + \epsilon) f(x^\mu) &= \left\{ e\phi + \frac{\mathbf{P}^2}{2m_0} - \frac{e}{2m_0c}(\mathbf{B} \cdot \mathbf{L}) - \frac{e}{m_0c} \left(\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma} \right) \cdot \mathbf{B} + m_0c^2 \right\} f(x^\mu) \\ &= \left\{ e\phi + \frac{\mathbf{P}^2}{2m_0} - \frac{e}{2m_0c}(\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \cdot \mathbf{B} + m_0c^2 \right\} f(x^\mu). \end{aligned} \quad (5.44)$$

Ao comparar ambos os lados da expressão acima obtemos uma equação do tipo Pauli (Berestetskii *et al.*, 1971) tal que:

$$\epsilon = \frac{\mathbf{P}^2}{2m_0} + e\phi - \frac{e}{2m_0c}(\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \cdot \mathbf{B}, \quad (5.45)$$

na qual identificamos os termos devido à energia cinética, à energia potencial e à energia de acoplamento spin-órbita onde é possível verificar o valor correto da razão giromagnética do elétron e o fator de Landè $g = 2$ devido à interação do seu momento magnético com o campo eletromagnético externo (Gross, 1993).

5.2 Operador de Translação Dependente da Posição para o Espaço-Tempo

Introduziremos nesta secção o Operador de Translação Dependente da Posição para o Espaço-Tempo (do inglês *Space-Time Position Dependent Translation Operator* ou, abreviadamente, PDTO-ST). Desejamos que o tensor de métrica seja dependente da posição x^μ , isto é, $g_{\alpha\beta} = g_{\alpha\beta}(x^\mu)$. Como no espaço-tempo de Minkowski usual a métrica é diagonal, conservaremos esta propriedade do tensor de métrica, logo $g_{\alpha\beta} \neq 0$ se $\alpha = \beta$ e $g_{\alpha\beta} = 0$ se $\alpha \neq \beta$. O operador de translação infinitesimal $\tau_\Upsilon(dx^\mu)$ atuará em um ket de posição tal que:

$$\tau_\Upsilon(dx^\mu) |x^\mu\rangle = |x^\mu + |g_{\mu\mu}(x^\mu)|^{-1/2} dx^\mu\rangle, \quad (5.46)$$

no qual, neste caso, os índices repetidos não indicam soma implícita e sim apenas que a métrica é diagonal e como serão afetadas as coordenadas ct, x, y, z ao realizar a translação. Desta forma, as componentes do tensor de métrica dependerão apenas da coordenada relativa à elas ($g_{00} = g_{00}(ct), g_{11} = g_{11}(x)$ e assim em diante). Analogamente ao que foi calculado em (1.2), iremos expandir a função $|g_{\mu\mu}(x^\mu)|^{-1/2}$ em série até termos de primeira ordem:

$$|g_{\mu\mu}(x^\mu)|^{-1/2} \approx 1 + \Upsilon^\mu x^\mu, \quad (5.47)$$

onde os índices repetidos não indicam soma e sim a qual variável estamos nos referindo. Devido ao termo da raiz quadrada ser definido positivo (pois estamos interessados em translações entre coordenadas reais), vemos que:

$$1 + \Upsilon^\mu x^\mu > 0 \Rightarrow x^\mu > -\frac{1}{\Upsilon^\mu}. \quad (5.48)$$

Ou seja, nesse espaço-tempo, a coordenada x^μ está restrita ao intervalo $(-1/\Upsilon^\mu, +\infty)$. Veja que, ao tomarmos o limite $\Upsilon^\mu \rightarrow 0$ pela direita (isto é, valores não-negativos de Υ^μ) retornamos ao domínio da métrica de Minkowski usual $(-\infty, +\infty)$. Deste modo, a atuação do operador de translação em questão (5.46) em um ket de posição do sistema agora seja:

$$\tau_\Upsilon(dx^\mu) |x^\mu\rangle = |x^\mu + (1 + \Upsilon^\mu x^\mu) dx^\mu\rangle, \quad (5.49)$$

e, analogamente ao argumento utilizado para operador de translação na métrica de Minkowski usual, iremos considerar execuções passivas, tal que:

$$\tau_{\Upsilon}(dx^{\mu})\psi(x^{\mu}) = \psi(x^{\mu} + (1 + \Upsilon^{\mu}x^{\mu}) dx^{\mu}). \quad (5.50)$$

Seja então $(P_{\Upsilon})_{\mu}$ o quadri-operador momento modificado. Tal qual (5.3), introduzimos o operador de translação infinitesimal no espaço-tempo de Minkowski modificado:

$$\tau_{\Upsilon}(dx^{\mu}) = \mathbb{I} - \frac{i}{\hbar}(P_{\Upsilon})_{\mu}dx^{\mu}, \quad (5.51)$$

onde observe que, ao tomar o limite $dx^{\mu} \rightarrow 0$, o operador de reduz à unidade inalterando o sistema. Todavia, contrário aos outros operadores de translação ou evolução apresentados neste trabalho, o operador de translação agora apresentado não é mais aditivo. A partir de (5.47) é possível estabelecer o módulo das componentes do tensor de métrica, tal que:

$$|g_{\mu\mu}(x^{\mu})| = \frac{1}{(1 + \Upsilon^{\mu}x^{\mu})^2}, \quad (5.52)$$

e, uma vez que ao tomar o limite $\Upsilon^{\mu} \rightarrow 0$ devemos retornar à métrica usual de Minkowski e para que o tensor de métrica continue a obedecer a propriedade indicada em (2.11), devemos ter:

$$g_{00}(ct) = \frac{1}{(1 + \Upsilon^0 ct)^2} \Rightarrow g^{00}(ct) = (1 + \Upsilon^0 ct)^2, \quad (5.53)$$

$$g_{11}(x) = -\frac{1}{(1 + \Upsilon^1 x)^2} \Rightarrow g^{11}(x) = -(1 + \Upsilon^1 x)^2, \quad (5.54)$$

$$g_{22}(y) = -\frac{1}{(1 + \Upsilon^2 y)^2} \Rightarrow g^{22}(y) = -(1 + \Upsilon^2 y)^2, \quad (5.55)$$

$$g_{33}(z) = -\frac{1}{(1 + \Upsilon^3 z)^2} \Rightarrow g^{33}(z) = -(1 + \Upsilon^3 z)^2, \quad (5.56)$$

tal que o deslocamento quadrado conforme (2.9) nesse espaço-tempo é da forma:

$$ds^2 = \frac{1}{(1 + \Upsilon^0 ct)^2} c^2 dt^2 - \frac{1}{(1 + \Upsilon^1 x)^2} dx^2 - \frac{1}{(1 + \Upsilon^2 y)^2} dy^2 - \frac{1}{(1 + \Upsilon^3 z)^2} dz^2. \quad (5.57)$$

Além disso, o termo $\sqrt{-g}$, onde g é o determinante do tensor de métrica, que será muito importante para calcular as derivadas e integrais presentes neste formalismo e pode ser escrito como:

$$\sqrt{-g} = \sqrt{-g_{00} g_{11} g_{22} g_{33}}. \quad (5.58)$$

Agora vamos calcular a forma do quadri-operador momento modificado $(P_{\Upsilon})_{\mu}$ na representação de posição. De modo análogo ao que fizemos para obter (5.14) considerando

execuções passivas, começamos aplicando o operador na forma (5.51) em um estado arbitrário e utilizamos as relações de completeza (5.12) e de ortogonalidade (5.13):

$$\begin{aligned}
\left[\mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} (P_{\Upsilon})_{\mu} \Delta x^{\mu} \right] |\psi\rangle &= \int d^4x \sqrt{-g} \tau_{\Upsilon}(\Delta x^{\nu}) |x^{\nu}\rangle \langle x^{\nu}|\psi\rangle \\
&= \int d^4x \sqrt{-g} |x^{\nu} + (1 + \Upsilon^{\nu} x^{\nu}) \Delta x^{\nu}\rangle \langle x^{\nu}|\psi\rangle \\
&= \int d^4x \sqrt{-g} |x^{\nu}\rangle \langle x^{\nu} + (1 + \Upsilon^{\nu} x^{\nu}) \Delta x^{\nu}|\psi\rangle \\
&= \int d^4x \sqrt{-g} |x^{\nu}\rangle \left[\langle x^{\nu}|\psi\rangle + (1 + \Upsilon^{\nu} x^{\nu}) \Delta x^{\nu} \frac{\partial}{\partial x^{\nu}} \langle x^{\nu}|\psi\rangle \right], \quad (5.59)
\end{aligned}$$

onde, ao aplicarmos $\langle x^{\mu}|$ pela esquerda na expressão acima, ficamos com:

$$\begin{aligned}
\left(\mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} (P_{\Upsilon})_{\mu} \Delta x^{\mu} \right) \langle x^{\mu}|\psi\rangle &= \int d^4x \sqrt{-g} \langle x^{\mu}|x^{\nu}\rangle \left[\langle x^{\nu}|\psi\rangle + (1 + \Upsilon^{\nu} x^{\nu}) \Delta x^{\nu} \frac{\partial}{\partial x^{\nu}} \langle x^{\nu}|\psi\rangle \right] \\
&= \int d^4x \delta(x^{\mu} - x^{\nu}) \left[\langle x^{\nu}|\psi\rangle + (1 + \Upsilon^{\nu} x^{\nu}) \Delta x^{\nu} \frac{\partial}{\partial x^{\nu}} \langle x^{\nu}|\psi\rangle \right] \quad (5.60)
\end{aligned}$$

e, finalmente, de acordo com a função delta de Dirac em (3.12), temos que:

$$\left(\mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} (P_{\Upsilon})_{\mu} \Delta x^{\mu} \right) \langle x^{\mu}|\psi\rangle = \langle x^{\mu}|\psi\rangle + (1 + \Upsilon^{\mu} x^{\mu}) \Delta x^{\mu} \frac{\partial}{\partial x^{\mu}} \langle x^{\mu}|\psi\rangle. \quad (5.61)$$

Logo, comparando os lados da expressão obtida em (5.61) obtemos que o quadri-operador momento modificado na representação de posição na métrica do PDTTO para o espaço-tempo de Minkowski deve ser:

$$(P_{\Upsilon})_{\mu} \equiv i\hbar(1 + \Upsilon^{\mu} x^{\mu}) \frac{\partial}{\partial x^{\mu}} = i\hbar(1 + \Upsilon^{\mu} x^{\mu}) \partial_{\mu}, \quad (5.62)$$

onde, novamente, os índices repetidos não indicam soma mas apenas a que coordenada estamos trabalhando. Observe que, ao tomar $\Upsilon^{\mu} \rightarrow 0$ retornamos à forma já conhecida do quadri-operador momento obtida anteriormente em (5.11). Para melhor visualização, vamos definir o seguinte operador diferencial D_{μ} , tal que o quadri-operador momento modificado possa ser escrito como:

$$D_{\mu} \equiv (1 + \Upsilon^{\mu} x^{\mu}) \partial_{\mu} \Rightarrow (P_{\Upsilon})_{\mu} = i\hbar D_{\mu}. \quad (5.63)$$

De modo a simplificar os cálculos, utilizaremos a partir daqui apenas a coordenada temporal ct e uma coordenada espacial (por exemplo, escolhemos apenas x). Dessa forma, utilizando a expressão covariante obtida em (5.62), os operadores hamiltoniano e momento modificados serão:

$$\frac{H_{\Upsilon}}{c} = i\hbar(1 + \Upsilon^0 ct) \frac{\partial}{\partial ct}, \quad (5.64)$$

$$P_{\Upsilon} = -i\hbar(1 + \Upsilon^1 x) \frac{\partial}{\partial x}. \quad (5.65)$$

5.3 Equação de Klein-Gordon Modificada

O principal interesse deste estudo é obter a solução da equação de Klein-Gordon para a métrica modificada escolhida e, portanto, vamos determinar a forma dessa equação com os operadores modificados indicados em (5.63). Aplicamos então o quadri-operador momento contraído com ele mesmo em ambos os lados de uma função de onda arbitrária $\psi(x^\mu)$. Uma vez que, com a definição do quadri-momento a partir da quadri-velocidade, a contração dessas grandezas já foi indicada em (2.29), então:

$$\begin{aligned} (P_\Upsilon)_\mu (P_\Upsilon)^\mu \psi(x^\mu) &= m_0^2 c^2 \psi(x^\mu) \\ (i\hbar)^2 D_\mu D^\mu \psi(x^\mu) &= m_0^2 c^2 \psi(x^\mu) \\ \left(D_\mu D^\mu + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi(x^\mu) &= 0, \end{aligned} \quad (5.66)$$

e obtemos a equação de Klein-Gordon modificada desejada. Agora precisamos calcular como será o operador resultante da contração de D^μ com ele mesmo. Logo, temos:

$$\begin{aligned} D_\mu D^\mu &= D_0 D^0 + D_1 D^1 \\ &= |g_{00}|^{-1/2} \partial_0 (|g^{00}|^{-1/2} \partial^0) + |g_{11}|^{-1/2} \partial_1 (|g^{11}|^{-1/2} \partial^1) \\ &= |g_{00}|^{-1/2} |g_{11}|^{-1/2} \partial_0 (|g^{00}|^{-1/2} |g_{11}|^{1/2} \partial^0) + |g_{11}|^{-1/2} |g_{00}|^{-1/2} \partial_1 (|g^{11}|^{-1/2} |g_{00}|^{1/2} \partial^1) \\ &= \frac{1}{\sqrt{-g}} [\partial_0 (|g^{00}|^{-1/2} |g_{11}|^{1/2} g^{00} \partial_0) + \partial_1 (|g^{11}|^{-1/2} |g_{00}|^{1/2} g^{11} \partial_1)] \\ &= \frac{1}{\sqrt{-g}} [\partial_0 (|g_{00}|^{1/2} |g_{11}|^{1/2} g^{00} \partial_0) + \partial_1 (|g_{11}|^{1/2} |g_{00}|^{1/2} g^{11} \partial_1)] \\ &= \frac{1}{\sqrt{-g}} [\partial_0 (\sqrt{-g} g^{00} \partial_0) + \partial_1 (\sqrt{-g} g^{11} \partial_1)], \end{aligned} \quad (5.67)$$

no qual este é o conhecido operador de Laplace-Beltrami (Gneiting *et al.*, 2013). Substituindo as expressões em (5.53), (5.54) e (5.58) apenas com as coordenadas ct e x ficamos com:

$$\begin{aligned} D_\mu D^\mu &= (1 + \Upsilon^0 ct)(1 + \Upsilon^1 x) \left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1 + \Upsilon^0 ct}{1 + \Upsilon^1 x} \frac{\partial}{\partial t} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1 + \Upsilon^1 x}{1 + \Upsilon^0 ct} \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] \\ &= \frac{1}{c^2} (1 + \Upsilon^0 ct) \frac{\partial}{\partial t} \left[(1 + \Upsilon^0 ct) \frac{\partial}{\partial t} \right] - (1 + \Upsilon^1 x) \frac{\partial}{\partial x} \left[(1 + \Upsilon^1 x) \frac{\partial}{\partial x} \right], \end{aligned} \quad (5.68)$$

e note que, ao tomarmos $\Upsilon^\mu \rightarrow 0$ (e se tivéssemos considerado também as coordenadas y e z), recuperamos o operador D'Alambertiano como indicado em (4.6). Substituindo então o operador encontrado em (5.68) na equação de Klein-Gordon modificada obtida em (5.66) obtemos que:

$$\left\{ \frac{1}{c^2} (1 + \Upsilon^0 ct) \frac{\partial}{\partial t} \left[(1 + \Upsilon^0 ct) \frac{\partial}{\partial t} \right] - (1 + \Upsilon^1 x) \frac{\partial}{\partial x} \left[(1 + \Upsilon^1 x) \frac{\partial}{\partial x} \right] + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right\} \psi(x^\mu) = 0. \quad (5.69)$$

Note que, ao tomarmos $\Upsilon^\mu \rightarrow 0$ na expressão acima, retornamos à equação de Klein-Gordon (4.5) na métrica de Minkowski usual. Contudo, a equação diferencial (5.69) é arduamente difícil de ser resolvida da forma como está apresentada. Para facilitar, propomos então uma mudança de variável tal que (Costa Filho *et al.*, 2013):

$$\eta^\mu(x^\mu) \equiv \int |g_{\mu\mu}(x^\mu)|^{1/2} dx^\mu = \int \frac{1}{1 + \Upsilon^\mu x^\mu} dx^\mu \Rightarrow \eta^\mu(x^\mu) = \frac{\ln(1 + \Upsilon^\mu x^\mu)}{\Upsilon^\mu}, \quad (5.70)$$

na qual os índices repetidos não indicam soma mas sim a qual variável (ct , x , y ou z) estamos nos referindo. Dessa forma obtemos:

$$\eta^0(ct) = \frac{\ln(1 + \Upsilon^0 ct)}{\Upsilon^0} \Rightarrow d\eta^0 = \frac{1}{(1 + \Upsilon^0 ct)} c dt, \quad (5.71)$$

$$\eta^1(x) = \frac{\ln(1 + \Upsilon^1 x)}{\Upsilon^1} \Rightarrow d\eta^1 = \frac{1}{(1 + \Upsilon^1 x)} dx, \quad (5.72)$$

onde, utilizando a regra da cadeia e as expressões obtidas em (5.71) e em (5.72), vemos que:

$$\frac{\partial}{\partial ct} = \frac{\partial \eta^0}{\partial ct} \frac{\partial}{\partial \eta^0} = \frac{1}{(1 + \Upsilon^0 ct)} \frac{\partial}{\partial \eta^0}, \quad (5.73)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial \eta^1}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \eta^1} = \frac{1}{(1 + \Upsilon^1 x)} \frac{\partial}{\partial \eta^1}, \quad (5.74)$$

e, finalmente, substituindo os resultados acima em (5.69) obtemos uma equação de Klein-Gordon usual conforme (4.5) mas agora em termos da variável η^μ :

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial(\eta^0)^2} - \frac{\partial^2}{\partial(\eta^1)^2} + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right] \psi(\eta^\mu) = 0, \quad (5.75)$$

tal que o operador diferencial D^μ (apenas para $\mu = 0$ e $\mu = 1$) possa ser escrito da forma:

$$D^\mu = \left(\frac{\partial}{\partial \eta^0}, -\frac{\partial}{\partial \eta^1} \right). \quad (5.76)$$

Observe também que, ao inserir os resultados de (5.71) e (5.72) no deslocamento quadrado modificado obtido em (5.57), retornamos à uma métrica usual do espaço-tempo de Minkowski na variável η^μ (considerando apenas as coordenadas previamente escolhidas ct e x):

$$ds^2 = (d\eta^0)^2 - (d\eta^1)^2. \quad (5.77)$$

Os operadores modificados hamiltoniano (5.64) e momento (5.65) também podem ser reescritos empregando as expressões em (5.73), (5.74) e (5.70), respectivamente, da forma:

$$\frac{H_\Upsilon}{c} = i\hbar(1 + \Upsilon^0 ct) \frac{\partial \eta^0}{\partial ct} \frac{\partial}{\partial \eta^0} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \eta^0}, \quad (5.78)$$

$$P_\Upsilon = -i\hbar(1 + \Upsilon^1 x) \frac{\partial \eta^1}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \eta^1} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \eta^1}. \quad (5.79)$$

Agora buscamos uma solução para a equação de Klein-Gordon encontrada em (5.75). Baseada na solução (4.7) previamente obtida para o espaço-tempo de Minkowski com métrica usual, propomos uma solução em função das variáveis η^μ tal que:

$$\psi(\eta^\mu) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} P_\mu \eta^\mu \right] = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{E}{c} \eta^0 - p \eta^1 \right) \right], \quad (5.80)$$

na qual note que, ao aplicarmos os operadores hamiltoniano (5.78) e momento (5.79) modificados na função de onda (5.80) obtemos os autovalores de energia e momento:

$$\frac{H_\Upsilon}{c} \psi(\eta^\mu) = i\hbar \frac{\partial}{\partial \eta^0} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{E}{c} \eta^0 - p \eta^1 \right) \right] = \frac{E}{c} \psi(\eta^\mu), \quad (5.81)$$

$$P_\Upsilon \psi(\eta^\mu) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \eta^1} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{E}{c} \eta^0 - p \eta^1 \right) \right] = p \psi(\eta^\mu). \quad (5.82)$$

Podemos também reescrever a função de onda (5.80) agora em termos das variáveis x^μ utilizando a transformação indicada em (5.70). Ficamos então com:

$$\psi(x^\mu) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{E \ln(1 + \Upsilon^0 ct)}{c \Upsilon^0} - p \frac{\ln(1 + \Upsilon^1 x)}{\Upsilon^1} \right) \right], \quad (5.83)$$

e, aplicando os operadores hamiltoniano (5.64) e momento (5.65) modificados (agora explicitamente com a dependência do fator Υ^μ e as derivadas em relação às variáveis ct e x), obtemos a mesma relação dos autovalores:

$$i\hbar(1 + \Upsilon^0 ct) \frac{\partial}{\partial ct} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{E \ln(1 + \Upsilon^0 ct)}{c \Upsilon^0} - p \frac{\ln(1 + \Upsilon^1 x)}{\Upsilon^1} \right) \right] = \frac{E}{c} \psi(x^\mu), \quad (5.84)$$

$$-i\hbar(1 + \Upsilon^1 x) \frac{\partial}{\partial x} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{E \ln(1 + \Upsilon^0 ct)}{c \Upsilon^0} - p \frac{\ln(1 + \Upsilon^1 x)}{\Upsilon^1} \right) \right] = p \psi(x^\mu). \quad (5.85)$$

De posse então da função de onda (5.83) e da equação diferencial parcial obtida em (5.69) para o espaço-tempo em estudo, vamos desenvolver as derivadas separadamente tal que:

$$\frac{1}{c^2} (1 + \Upsilon^0 ct) \frac{\partial}{\partial t} \left[(1 + \Upsilon^0 ct) \frac{\partial}{\partial t} \right] \psi(x^\mu) = \left(-\frac{E^2}{c^2 \hbar^2} \right) \psi(x^\mu), \quad (5.86)$$

$$(1 + \Upsilon^1 x) \frac{\partial}{\partial x} \left[(1 + \Upsilon^1 x) \frac{\partial}{\partial x} \right] \psi(x^\mu) = \left(-\frac{p^2}{\hbar^2} \right) \psi(x^\mu). \quad (5.87)$$

Juntando os resultados obtidos em (5.86) e em (5.87) na equação de Klein-Gordon modificada (5.69) temos enfim que:

$$\left\{ \left(-\frac{E^2}{c^2 \hbar^2} \right) + \left(\frac{p^2}{\hbar^2} \right) + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right\} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{E \ln(1 + \Upsilon^0 ct)}{c \Upsilon^0} - p \frac{\ln(1 + \Upsilon^1 x)}{\Upsilon^1} \right) \right] = 0, \quad (5.88)$$

e, uma vez que a exponencial não se anula, devemos ter então que os termos entre as chaves acima sejam iguais a zero e obtemos por fim que a relação energia-momento (agora somente

com o autovalor de momento p referente à única coordenada espacial inicialmente escolhida) é inalterada tal que $E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4$. Esta relação apenas é válida no domínio $(-1/\Upsilon^\mu, +\infty)$ inicialmente especificado para as coordenadas x^μ . Em termos da variável η^μ , todavia, sua validade é estendida a todo o espaço-tempo $(-\infty, +\infty)$.

5.3.1 Limite Não-Relativístico

Vamos analisar o limite não-relativístico da equação de Klein-Gordon modificada (5.75). Para isso, trabalharemos na variável η^μ por facilidade. A função de onda (5.80) pode ser quebrada em duas partes. Vamos impor que a energia E possa ser separada em termos de uma energia E' e da energia de repouso $m_0 c^2$, tal que:

$$\begin{aligned}
 \psi(\eta^\mu) &= \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{E}{c} \eta^0 - p \eta^1 \right) \right] \\
 &= \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{E' + m_0 c^2}{c} \eta^0 - p \eta^1 \right) \right] \\
 &= \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{E'}{c} \eta^0 - p \eta^1 \right) \right] \exp \left(-\frac{i}{\hbar} m_0 c \eta^0 \right) \\
 &= \phi(\eta^\mu) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} m_0 c \eta^0 \right).
 \end{aligned} \tag{5.89}$$

No limite não-relativístico a energia de repouso é muito maior que qualquer outro termo de energia considerado, de forma que:

$$\left| i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial \eta^0} \right| \approx \frac{E'}{c} \phi \ll m_0 c^2 \phi. \tag{5.90}$$

Para inserir a aproximação não-relativística na equação de Klein-Gordon modificada devemos derivar (5.89) em relação à variável η^0 e ficamos com:

$$\frac{\partial \psi}{\partial \eta^0} = \left(\frac{\partial \phi}{\partial \eta^0} - \frac{i}{\hbar} m_0 c \phi \right) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} m_0 c \eta^0 \right), \tag{5.91}$$

na qual derivando novamente a expressão acima em relação a η^0 e utilizando a aproximação indicada em (5.90) temos que:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2 \psi}{\partial (\eta^0)^2} &= \left[\frac{\partial^2 \phi}{\partial (\eta^0)^2} - \frac{2i}{\hbar} m_0 c \frac{\partial \phi}{\partial \eta^0} - \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \phi \right] \exp \left(-\frac{i}{\hbar} m_0 c \eta^0 \right) \\
 &\approx \left[-\frac{2i}{\hbar} m_0 c \frac{\partial \phi}{\partial \eta^0} - \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \phi \right] \exp \left(-\frac{i}{\hbar} m_0 c \eta^0 \right).
 \end{aligned} \tag{5.92}$$

Inserindo o resultado (5.92) na equação de Klein-Gordon modificada (5.75) temos:

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial^2}{\partial(\eta^0)^2} - \frac{\partial^2}{\partial(\eta^1)^2} + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right] \psi &= 0 \\ \left[-\frac{2i}{\hbar} m_0 c \frac{\partial \phi}{\partial \eta^0} - \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \phi - \frac{\partial^2 \phi}{\partial(\eta^1)^2} + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \phi \right] \exp \left(-\frac{i}{\hbar} m_0 c \eta^0 \right) &= 0 \\ \left[-\frac{2i}{\hbar} m_0 c \frac{\partial \phi}{\partial \eta^0} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial(\eta^1)^2} \right] \exp \left(-\frac{i}{\hbar} m_0 c \eta^0 \right) &= 0, \end{aligned} \quad (5.93)$$

e, uma vez que a exponencial não se anula, temos que o termo entre parênteses deve ser igual a zero e obtemos uma equação do tipo Schrödinger:

$$-\frac{2i}{\hbar} m_0 c \frac{\partial \phi}{\partial \eta^0} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial(\eta^1)^2} = 0 \Rightarrow i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial \eta^0} = -\frac{\hbar^2}{2m_0 c} \frac{\partial^2 \phi}{\partial(\eta^1)^2}. \quad (5.94)$$

na qual, transformando os operadores diferenciais em (5.94) da variável η^μ para a variável x^μ utilizando (5.73) e (5.74):

$$i\hbar(1 + \Upsilon^0 ct) \frac{\partial \phi}{\partial ct} = -\frac{\hbar^2}{2m_0 c} (1 + \Upsilon^1 x) \frac{\partial}{\partial x} \left[(1 + \Upsilon^1 x) \frac{\partial}{\partial x} \right] \phi. \quad (5.95)$$

Contudo, lembrando que para o formalismo de Schrödinger o tempo não é uma coordenada e sim um parâmetro, tal que a mudança de variável indicada em (5.70) não faz mais sentido para $\mu = 0$. Dessa forma, tomando $\Upsilon^0 \rightarrow 0$ recuperamos a equação de Schrödinger modificada (Costa Filho *et al.*, 2013):

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} (1 + \Upsilon^1 x) \frac{\partial}{\partial x} \left[(1 + \Upsilon^1 x) \frac{\partial}{\partial x} \right] \phi. \quad (5.96)$$

5.3.2 Densidade e Corrente de Probabilidade para a Equação de Klein-Gordon Modificada

Por fim, iremos calcular a forma da equação da continuidade para a equação de Klein-Gordon modificada. Para tal, tomaremos seu complexo conjugado:

$$\left(D_\mu D^\mu + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi^* = 0, \quad (5.97)$$

e multiplicaremos (5.66) por ψ^* e (5.97) por ψ , ambas à esquerda, e subtraímos as equações resultantes, tal que:

$$\psi^* D_\mu D^\mu \psi - \psi D_\mu D^\mu \psi^* = D_\mu (\psi^* D^\mu \psi - \psi D^\mu \psi^*) = 0, \quad (5.98)$$

e, visto que estamos trabalhando com a variável η^μ apenas com as coordenadas temporal e uma espacial e de acordo com (5.76), ficamos com:

$$\frac{\partial}{\partial \eta^0} \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial \eta^0} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial \eta^0} \psi^* \right) + \frac{\partial}{\partial \eta^1} \left(\psi \frac{\partial}{\partial \eta^1} \psi^* - \psi^* \frac{\partial}{\partial \eta^1} \psi \right) = 0, \quad (5.99)$$

onde, transformando tudo em termos da variável x^μ utilizando (5.73) e (5.74), obtemos:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{c^2}(1 + \Upsilon^0 ct) \frac{\partial}{\partial t} \left[\psi^*(1 + \Upsilon^0 ct) \frac{\partial}{\partial t} \psi - \psi(1 + \Upsilon^0 ct) \frac{\partial}{\partial t} \psi^* \right] + \\ & + (1 + \Upsilon^1 x) \frac{\partial}{\partial x} \left[\psi(1 + \Upsilon^1 x) \frac{\partial}{\partial x} \psi^* - \psi^*(1 + \Upsilon^1 x) \frac{\partial}{\partial x} \psi \right] = 0. \end{aligned} \quad (5.100)$$

Uma vez que a equação da continuidade deverá retornar à forma já obtida em (4.16) para a equação de Klein-Gordon com métrica de Minkowski usual quando $\Upsilon^\mu \rightarrow 0$, então multiplicaremos (5.100) por $i\hbar/2m_0$ e dividiremos esta mesma equação por $(1 + \Upsilon^0 ct)(1 + \Upsilon^1 x)$, tal que:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \frac{i\hbar}{2m_0 c^2 (1 + \Upsilon^1 x)} \left[\psi^*(1 + \Upsilon^0 ct) \frac{\partial}{\partial t} \psi - \psi(1 + \Upsilon^0 ct) \frac{\partial}{\partial t} \psi^* \right] \right\} + \\ & + \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{i\hbar}{2m_0 (1 + \Upsilon^0 ct)} \left[\psi(1 + \Upsilon^1 x) \frac{\partial}{\partial x} \psi^* - \psi^*(1 + \Upsilon^1 x) \frac{\partial}{\partial x} \psi \right] \right\} = 0, \end{aligned} \quad (5.101)$$

na qual finalmente obtemos as grandezas ρ e J (esta última é apenas a componente relativa à variável x) para a equação de Klein-Gordon modificada:

$$\rho_{KGM} = \frac{i\hbar}{2m_0 c^2} \frac{1 + \Upsilon^0 ct}{1 + \Upsilon^1 x} \left[\psi^* \frac{\partial}{\partial t} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial t} \psi^* \right], \quad (5.102)$$

$$J_{KGM} = -\frac{i\hbar}{2m_0} \frac{1 + \Upsilon^1 x}{1 + \Upsilon^0 ct} \left[\psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial x} \psi^* \right], \quad (5.103)$$

e percebemos que, ao tomar $\Upsilon^\mu \rightarrow 0$, retornamos às mesmas grandezas calculadas anteriormente para a métrica de Minkowski usual em (4.19) e em (4.20). Contudo, da mesma forma que antes, a equação de Klein-Gordon modificada (5.66) continua sendo uma equação de segunda ordem no tempo e, devido aos possíveis valores da função de onda e de sua derivada temporal em um instante t qualquer, não podemos interpretar (5.102) como uma densidade de probabilidade, pois esta também não é definida positiva.

5.4 Equação de Dirac Modificada

Dando continuidade ao estudo das equações presentes na Mecânica Quântica Relativística, é natural que busquemos obter a equação de Dirac para a métrica modificada escolhida. Conforme vimos anteriormente, a forma da relação energia-momento é mantida para o espaço-tempo de Minkowski em estudo, válida no intervalo $(-1/\Upsilon^\mu, +\infty)$ se estivermos trabalhando com as coordenadas x^μ . Dessa forma, o hamiltoniano (4.22) proposto por Dirac, bem como as matrizes α^i (4.30) e β (4.31), continuam adequados para este formalismo em desenvolvimento.

Inserimos então os operadores hamiltoniano (5.64) e momento (5.65) modificados na expressão indicada por Dirac aplicada à função de onda, tal que:

$$\begin{aligned} \left\{ \frac{H_{\Upsilon}}{c} - \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{P}_{\Upsilon} - \beta m_0 c \right\} \Psi(x^\mu) &= 0 \\ \left\{ i\hbar \left[(1 + \Upsilon^0 ct) \frac{\partial}{\partial ct} + (1 + \Upsilon^i x^i) \alpha^i \frac{\partial}{\partial x^i} \right] - \beta m_0 c \right\} \Psi(x^\mu) &= 0, \end{aligned} \quad (5.104)$$

na qual, multiplicando por β pela esquerda, temos que:

$$\begin{aligned} \left\{ i\hbar \left[(1 + \Upsilon^0 ct) \beta \frac{\partial}{\partial ct} + (1 + \Upsilon^i x^i) \gamma^i \frac{\partial}{\partial x^i} \right] - m_0 c \right\} \Psi(x^\mu) &= 0 \\ \left\{ i\hbar (1 + \Upsilon^\mu x^\mu) \gamma^\mu \partial_\mu - m_0 c \right\} \Psi(x^\mu) &= 0, \end{aligned} \quad (5.105)$$

e obtemos a equação de Dirac modificada desejada. Observe que, ao tomarmos $\Upsilon^\mu \rightarrow 0$, retornamos à equação de Dirac na métrica de Minkowski usual (4.37). Aqui, contudo, requeremos uma atenção na notação. A contração dos índices para indicar somatório implícito está acontecendo no termo $\gamma^\mu \partial_\mu$ onde temos presentes as matrizes gamma de Dirac e a derivada parcial em relação a coordenada x^μ . O termo $(1 + \Upsilon^\mu x^\mu)$ acompanha essa contração, mas apenas para indicar a qual coordenada estaremos nos referindo após realizar o somatório. Em outras palavras, a equação de Dirac modificada aberta explicitamente (apenas para as coordenadas ct e x) pode ser vista como:

$$\left\{ i\hbar \left[(1 + \Upsilon^0 ct) \beta \frac{\partial}{\partial ct} + (1 + \Upsilon^1 x) \gamma^1 \frac{\partial}{\partial x} \right] - m_0 c \right\} \Psi(x^\mu) = 0. \quad (5.106)$$

Note ainda que, se fizermos uso do operador diferencial modificado (5.63) na expressão obtida em (5.105), retornamos à forma original da equação de Dirac mas agora em termos das coordenadas η^μ :

$$(i\hbar \gamma^\mu D_\mu - m_0 c) \Psi(\eta^\mu) = 0. \quad (5.107)$$

Da mesma forma que calculamos para a métrica de Minkowski usual, elevaremos ao quadrado a equação de Dirac modificada (5.106), tomando o complexo conjugado, tal que:

$$\begin{aligned} \left\{ i\hbar (1 + \Upsilon^\mu x^\mu) \gamma^\mu \partial_\mu - m_0 c \right\} \left\{ -i\hbar (1 + \Upsilon^\nu x^\nu) \gamma^\nu \partial_\nu - m_0 c \right\} \Psi &= 0 \\ \left\{ \hbar^2 \gamma^\mu \gamma^\nu (1 + \Upsilon^\mu x^\mu) \partial_\mu [(1 + \Upsilon^\nu x^\nu) \partial_\nu] + m_0^2 c^2 \right\} \Psi &= 0, \end{aligned} \quad (5.108)$$

onde cancelamos os termos do tipo $\pm i\hbar m_0 c (1 + \Upsilon^\mu x^\mu) \gamma^\mu \partial_\mu$ devido ao somatório implícito. Além disso, foi possível agrupar o termo $\gamma^\mu \gamma^\nu$ entre as chaves acima pois se tratam de matrizes

com componentes numéricas. Dividiremos a equação (5.108) por \hbar^2 e, em seguida, podemos utilizar o operador diferencial modificado (5.63), obtendo então:

$$\left\{ \gamma^\mu \gamma^\nu (1 + \Upsilon^\mu x^\mu) \partial_\mu [(1 + \Upsilon^\nu x^\nu) \partial_\nu] + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right\} \Psi = \left(\gamma^\mu \gamma^\nu D_\mu D_\nu + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right) \Psi = 0. \quad (5.109)$$

Por fim, basta tomar o procedimento análogo à (4.44), onde relacionamos a anticomutação das matrizes gamma de Dirac com os componentes do tensor de métrica, de forma que:

$$\left(\gamma^\mu \gamma^\nu D_\mu D_\nu + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right) \Psi = \left(g^{\mu\nu} D_\mu D_\nu + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right) \Psi = \left(D_\mu D^\mu + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right) \Psi = 0, \quad (5.110)$$

e obtemos uma equação do tipo Klein-Gordon similar à expressão encontrada anteriormente em (5.66). Aqui, entretanto, a função de onda Ψ é novamente um bi-spinor, ou seja, uma matriz de uma única coluna e quatro linhas, onde a equação de Klein-Gordon (5.110) está sendo aplicada a cada uma dessas componentes.

Analogamente ao que fizemos para a equação de Klein-Gordon modificada, apontaremos a solução da equação de Dirac modificada nas coordenadas η^μ pois esta possui a mesma forma da equação de Dirac na métrica usual de Minkowski e, utilizando as relações (5.71) e (5.72), encontraremos a solução em termos das coordenadas x^μ . Uma vez que a relação energia-momento continua válida nos basearemos nas soluções (4.46) e (4.47) previamente encontradas. Sejam então $P^0 = +\sqrt{\mathbf{p}^2 + m_0^2 c^2}$ e $\chi^{(\pm)}$ dois spinores linearmente independentes de duas componentes cada, as soluções da equação de Dirac modificada (5.107) nas coordenadas x^μ é da forma:

$$\Psi^{(+)}(x^\mu) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \left[P^0 \frac{\ln(1 + \Upsilon^0 ct)}{\Upsilon^0} - p \frac{\ln(1 + \Upsilon^1 x)}{\Upsilon^1} \right] \right\} \begin{bmatrix} \chi^{(+)} \\ \frac{p}{m_0 c + P^0} \sigma^1 \chi^{(+)} \end{bmatrix}, \quad (5.111)$$

$$\Psi^{(-)}(x^\mu) = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[P^0 \frac{\ln(1 + \Upsilon^0 ct)}{\Upsilon^0} - p \frac{\ln(1 + \Upsilon^1 x)}{\Upsilon^1} \right] \right\} \begin{bmatrix} \frac{p}{m_0 c + P^0} \sigma^1 \chi^{(-)} \\ \chi^{(-)} \end{bmatrix}, \quad (5.112)$$

nas quais, de forma similar ao que acontecia para a métrica de Minkowski usual, essas soluções se referem, respectivamente, às componentes de energia positiva (5.111) e de energia negativa (5.112), considerando tanto as projeções *up* e *down* para partículas de spin 1/2.

5.4.1 Densidade e Corrente de Probabilidade para a Equação de Dirac Modificada

Por fim, nos resta entender a interpretação probabilística da função de onda para a equação de Dirac modificada. Para isso, tomemos a expressão (5.107) e o seu complexo

transposto e conjugado, considerando apenas as coordenadas η^0 e η^1 , tal que:

$$\left(i\hbar \beta \frac{\partial}{\partial \eta^0} + i\hbar \gamma^1 \frac{\partial}{\partial \eta^1} - m_0 c \right) \Psi = 0, \quad (5.113)$$

$$\left(-i\hbar \beta \frac{\partial}{\partial \eta^0} - i\hbar \gamma^1 \frac{\partial}{\partial \eta^1} - m_0 c \right) \Psi^\dagger = 0. \quad (5.114)$$

Multiplicamos então ambas as expressões acima por β e, em seguida, multiplicamos (5.113) por Ψ^\dagger e (5.114) por Ψ , ambas à esquerda. Obtemos então:

$$i\hbar \Psi^\dagger \frac{\partial \Psi}{\partial \eta^0} + i\hbar \Psi^\dagger \alpha^1 \frac{\partial \Psi}{\partial \eta^1} = m_0 c \Psi^\dagger \Psi, \quad (5.115)$$

$$-i\hbar \Psi \frac{\partial \Psi^\dagger}{\partial \eta^0} - i\hbar \Psi \alpha^1 \frac{\partial \Psi^\dagger}{\partial \eta^1} = m_0 c \Psi \Psi^\dagger, \quad (5.116)$$

onde, subtraindo as expressões encontradas, ficamos com:

$$\left(\Psi^\dagger \frac{\partial \Psi}{\partial \eta^0} + \Psi \frac{\partial \Psi^\dagger}{\partial \eta^0} \right) + \left(\Psi^\dagger \alpha^1 \frac{\partial \Psi}{\partial \eta^1} + \Psi \alpha^1 \frac{\partial \Psi^\dagger}{\partial \eta^1} \right) = \frac{\partial}{\partial \eta^0} (\Psi^\dagger \Psi) + \frac{\partial}{\partial \eta^1} (\Psi^\dagger \alpha^1 \Psi) = 0. \quad (5.117)$$

Transformando em termos da variável x^μ utilizando (5.73) e (5.74), temos que:

$$(1 + \Upsilon^0 ct) \frac{\partial}{\partial ct} (\Psi^\dagger \Psi) + (1 + \Upsilon^1 x) \frac{\partial}{\partial x} (\Psi^\dagger \alpha^1 \Psi) = 0, \quad (5.118)$$

no qual dividimos a expressão acima por $(1 + \Upsilon^0 ct)(1 + \Upsilon^1 x)$ e obtemos uma equação da continuidade:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\Psi^\dagger \Psi}{(1 + \Upsilon^1 x)} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\Psi^\dagger c \alpha^1 \Psi}{(1 + \Upsilon^0 ct)} \right] = 0. \quad (5.119)$$

Reconhecemos então a densidade e a corrente (esta apenas para a componente relativa à coordenada x) de probabilidade para a equação de Dirac modificada:

$$\rho_{DM} = \frac{\Psi^\dagger \Psi}{(1 + \Upsilon^1 x)}, \quad (5.120)$$

$$J_{DM} = \frac{\Psi^\dagger c \alpha^1 \Psi}{(1 + \Upsilon^0 ct)}. \quad (5.121)$$

Note que, se fizermos $\Upsilon^\mu \rightarrow 0$ nas expressões acima, retornamos à densidade (4.58) e corrente (4.59) de probabilidade calculadas anteriormente para a métrica de Minkowski usual. Observe também que a grandeza obtida em (5.120) é definida positiva pois tanto o produto $\Psi^\dagger \Psi$ como o termo $1 + \Upsilon^\mu x^\mu$ são positivos, conforme nossas considerações iniciais do formalismo (5.48). Portanto, essa grandeza pode ser interpretada corretamente como uma densidade de probabilidade. Além disso, vemos a dependência da coordenada de posição na densidade e da coordenada temporal na corrente.

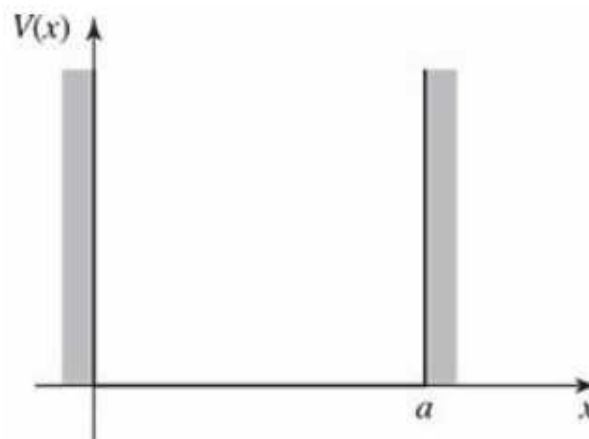
6 PARTÍCULA DE *SPIN* 1/2 EM UMA CAIXA UNIDIMENSIONAL

Neste capítulo resolveremos o problema de um elétron confinado em um poço de potencial infinito sob a ótica da equação de Dirac modificada. Seremos capazes de relacionar as componentes superiores e inferiores do bi-spinor solução. Posteriormente, iremos supor que o fluxo de probabilidade nas paredes do poço é nulo, o que nos garantirá uma condição de contorno apropriada. A partir disso, encontraremos uma equação transcendental que estará relacionada com o comprimento de onda Compton e que nos retornará a já conhecida relação energia-momento para a partícula relativística. Em seguida, tomando o limite não-relativístico, calcularemos os níveis de energia discretos da partícula dentro do poço, os quais dependerão do parâmetro Υ^1 , uma vez que estamos considerando apenas o eixo de coordenadas x .

6.1 Solução do Problema Proposto

Inicialmente, temos um elétron confinado dentro de uma caixa unidimensional de comprimento a , limitada por uma barreira de potencial infinito em $x = 0$ e $x = a$, de forma que o potencial em função da coordenada x é tal que:

Figura 4 – Poço de potencial infinito com um elétron confinado em seu interior.



Fonte: Griffiths (2018).

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{se } x < 0, \\ 0, & \text{se } 0 < x < a, \\ \infty, & \text{se } x > a. \end{cases} \quad (6.1)$$

Por se tratar de uma partícula de *spin* 1/2 e o espaço-tempo em estudo possuir métrica dependente da posição como em (5.47), utilizaremos a equação de Dirac modificada (5.106) apenas para a coordenada temporal ct e a coordenada espacial x :

$$\left\{ \gamma^0 \frac{E}{c} + \gamma^1 \left[i\hbar(1 + \Upsilon^1 x) \frac{d}{dx} \right] - m_0 c \mathbb{I} \right\} \Psi = 0. \quad (6.2)$$

Tomando então a forma das matrizes gamma de Dirac como indicado em (4.38) e (4.39), o sistema de equações que devemos resolver para as componentes superior e inferior do bi-spinor Ψ é dado por:

$$\begin{cases} (E - m_0 c^2) \Psi_{sup} + i\hbar c(1 + \Upsilon^1 x) \frac{d}{dx} \Psi_{inf} = 0, & (6.3a) \\ -i\hbar c(1 + \Upsilon^1 x) \frac{d}{dx} \Psi_{sup} - (E + m_0 c^2) \Psi_{inf} = 0, & (6.3b) \end{cases}$$

no qual, a partir de (6.3b), é possível escrever a componente inferior como:

$$\Psi_{inf} = -\frac{i\hbar c(1 + \Upsilon^1 x)}{E + m_0 c^2} \frac{d}{dx} \Psi_{sup}, \quad (6.4)$$

e, substituindo a expressão acima em (6.3a), obtemos a seguinte equação diferencial para a componente superior:

$$\begin{aligned} (E - m_0 c^2) \Psi_{sup} + i\hbar c(1 + \Upsilon^1 x) \frac{d}{dx} \left[-\frac{i\hbar c(1 + \Upsilon^1 x)}{E + m_0 c^2} \frac{d}{dx} \Psi_{sup} \right] &= 0, \\ \frac{d^2}{dx^2} \Psi_{sup} + \frac{\Upsilon^1}{(1 + \Upsilon^1 x)} \frac{d}{dx} \Psi_{sup} + \frac{k^2}{(1 + \Upsilon^1 x)^2} \Psi_{sup} &= 0, \end{aligned} \quad (6.5)$$

na qual identificamos $k^2 = (E - mc^2)(E + mc^2)/(\hbar^2 c^2)$ e cuja solução é do tipo:

$$\Psi_{sup}(x) = \left\{ A \exp \left[ik \frac{\ln(1 + \Upsilon^1 x)}{\Upsilon^1} \right] + B \exp \left[-ik \frac{\ln(1 + \Upsilon^1 x)}{\Upsilon^1} \right] \right\} \chi, \quad (6.6)$$

onde A e B são, respectivamente, as amplitudes da função de onda viajando no sentido positivo e negativo do eixo x e χ é um spinor tal que $\chi\chi^\dagger = 1$. Seja então $P^2 = (E - mc^2)/(E + mc^2)$, substituimos (6.6) em (6.4) para obter a expressão da componente inferior:

$$\Psi_{inf}(x) = P \left\{ A \exp \left[ik \frac{\ln(1 + \Upsilon^1 x)}{\Upsilon^1} \right] - B \exp \left[-ik \frac{\ln(1 + \Upsilon^1 x)}{\Upsilon^1} \right] \right\} \chi. \quad (6.7)$$

Agora, devemos aplicar uma condição de contorno adequada em processo análogo ao caso da Mecânica Quântica não-relativística onde tomamos a função de onda identicamente nula nas bordas do poço. Entretanto, devido a própria natureza da equação de Dirac com suas quatro componentes do bi-spinor, esta não é uma condição de contorno apropriada pois, ao assumir que a função de onda se anule nos extremos no poço, a única solução ao montar o sistema de

equações que relacione essas componentes é a solução trivial. Ou seja, se tomarmos $\Psi = 0$ em $x = 0$ e $x = a$ isso implicaria que toda a função de onda também seria nula em qualquer ponto dentro do poço (Alonso *et al.*, 1997).

Dessa forma, faz-se necessária outra condição de contorno que relacione de forma consistente o confinamento do elétron dentro do poço de potencial infinito. A partir da variação da ação para campos fermiônicos, é possível estabelecer uma condição análoga a tomar o fluxo de probabilidade nas bordas como nulo, isto é, garantindo que a partícula esteja limitada apenas ao espaço dentro do poço (Chodos *et al.*, 1974). Escreveremos esta nova condição em termos das coordenadas η^μ , pois nelas recuperamos a forma usual de um espaço-tempo de Minkowski, tal que:

$$\pm i\beta\alpha^1\Psi = \Psi, \quad (6.8)$$

na qual os sinais positivo e negativo correspondem, respectivamente, à normal nas paredes do poço em $x = 0$ e $x = a$. Utilizando então a definição (4.39) para as matrizes gamma de Dirac, obtemos, para a componente superior (autoestados de energia positiva), em $x = 0$:

$$i\gamma^1\Psi(\eta(0)) = \Psi(\eta(0)) \Rightarrow iP(A - B) = A + B \Rightarrow B = A \frac{iP - 1}{iP + 1}, \quad (6.9)$$

e, em $x = a$, substituindo a relação entre as amplitudes A e B encontradas acima, encontramos a chamada equação transcendental:

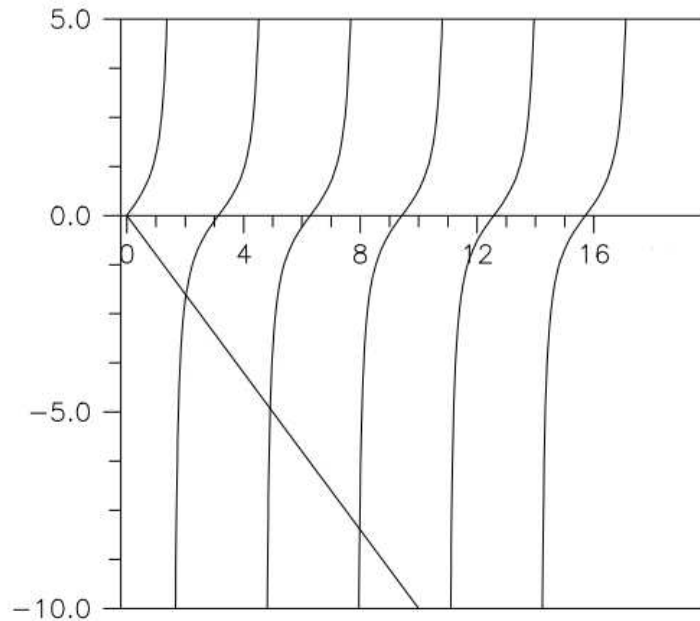
$$\begin{aligned} -i\gamma^1\Psi(\eta(a)) &= \Psi(\eta(a)), \\ -iPA \exp[ik\eta(a)] + iPB \exp[-ik\eta(a)] &= A \exp[ik\eta(a)] + B \exp[-ik\eta(a)], \\ \tan[k\eta(a)] &= \frac{2P}{P^2 - 1} = -\frac{k\hbar}{m_0c}, \end{aligned} \quad (6.10)$$

na qual identificamos $L_c = \hbar/m_0c$ como sendo o comprimento de onda Compton dividido por 2π . Para melhor visualização, renomearemos o termo entre chaves da equação acima, tal que $k_l = k\eta(a)$, obtendo então:

$$\tan(k_l) = -k_l \frac{L_c}{\eta(a)}, \quad (6.11)$$

onde observamos então que o tamanho do poço tem papel fundamental para determinar o comportamento relativístico das soluções da equação transcendental (Alberto *et al.*, 2011). Quanto maior for o comprimento do poço em relação ao comprimento de onda Compton, mais próxima a solução de (6.11) estará do caso não-relativístico. O gráfico indicado na Figura 5 ilustra esse comportamento: a inclinação da reta tende à zero a medida que o poço aumenta e as soluções serão do tipo $\tan(k_l) \approx 0$.

Figura 5 – Plots de $\tan(k_l)$ e $-k_l L_c / \eta(a)$. As soluções da equação transcendental são os pontos de interseção dessas curvas.



Fonte: Adaptado de Alberto *et al.* (1996).

Comparando o lado direito da equação (6.10), recuperamos a solução positiva da relação energia-momento:

$$E = \sqrt{(k\hbar)^2 c^2 + m_0^2 c^4}. \quad (6.12)$$

Este resultado já era esperado, pois trata-se de uma partícula em regime relativístico sem a ação de qualquer potencial. Para o caso não-relativístico, isto é, $k\hbar \ll m_0 c$, vimos que as soluções podem ser aproximadas tal que:

$$\tan[k \eta(a)] \approx 0 \Rightarrow k \eta(a) = n\pi, \quad (6.13)$$

e, ao substituir o valor de k , obtemos:

$$E_n^2 = m_0^2 c^4 + \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2 c^2}{[\eta(a)]^2}. \quad (6.14)$$

Como estamos interessados somente no autovalor de energia positiva, reescreveremos a expressão acima de forma que:

$$E_n = m_0 c^2 \left[1 + \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{m_0^2 c^2 [\eta(a)]^2} \right]^{1/2}. \quad (6.15)$$

Observamos que o segundo termo do parênteses acima é da ordem de $1/c^2$ e, portanto, foi possível realizar uma expansão binomial do tipo:

$$(1 + x)^a \approx 1 + ax, \text{ com } x \ll 1, \quad (6.16)$$

tal que obtemos a expressão final:

$$E_n \approx m_0 c^2 \left[1 + \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m_0^2 c^2 [\eta(a)]^2} \right]. \quad (6.17)$$

Ao considerarmos a energia total como sendo um termo vindo da massa de repouso mais um termo proveniente dos autoestados da partícula confinada no poço, isto é, $E_n = m_0 c^2 + \varepsilon_n$, obtemos então que as autoenergias do caso não-relativístico devem ser da forma:

$$\varepsilon_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m_0 [\eta(a)]^2} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m_0} \left[\frac{\Upsilon^1}{\ln(1 + \Upsilon^1 a)} \right]^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6.18)$$

Este resultado condiz com os resultados obtidos anteriormente para a partícula no poço de potencial infinito utilizando a equação de Schrödinger modificada (Costa Filho *et al.*, 2011). Observe também que, ao tomar o limite $\Upsilon^1 \rightarrow 0$, recuperamos os níveis de energia usuais para o poço de potencial infinito (Tannoudji *et al.*, 2019) comumente resolvido nos cursos de Mecânica Quântica.

7 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

Nesta dissertação o objetivo primordial foi entender as ideias básicas da Relatividade Restrita e da Mecânica Quântica não-relativística para que fosse possível uma maior compreensão dos conceitos da Mecânica Quântica Relativística. Para tal, estudamos o desenvolvimento da relação energia-momento e as interpretações da função de onda. Esses princípios foram utilizados para deduzir as equações de Klein-Gordon e de Dirac e para entender suas limitações, principalmente no que diz respeito ao spin da partícula em estudo e a interpretação de energias negativas.

A partir dos operadores de translação espacial e de evolução temporal propomos uma forma para o operador de translação no espaço-tempo de Minkowski (STTO). Nesse contexto, foi possível estabelecer uma expressão para o operador quadri-momento na representação de posição e, com isso, solucionamos a equação do tipo Klein-Gordon para obter a relação energia-momento. Posteriormente, deduzimos uma equação do tipo Dirac e, utilizando o acoplamento mínimo, obtemos a energia do elétron na presença de um campo eletromagnético externo, incluindo a energia de interação spin-órbita e seu fator giromagnético correto $g = 2$.

Posteriormente, com uso da nova métrica estabelecida, extendemos o operador de translação dependente da posição para a estrutura do espaço-tempo (PDTO-ST) e calculamos o operador quadri-momento modificado. A partir de uma mudança de variável fomos capazes de deduzir uma equação de Klein-Gordon modificada e verificar sua solução com a aplicação dos operadores hamiltoniano e momento nesse novo sistema de coordenadas. Dessa forma, obtemos a relação de energia-momento mas agora com uma limitação no domínio de sua validade $(-1/\Upsilon^\mu, +\infty)$ referente a cada coordenada x^μ do espaço-tempo.

Em seguida, utilizamos uma aproximação não-relativística para mostrar que a equação de Klein-Gordon modificada se reduz a uma equação do tipo Schrödinger. Se interpretarmos o tempo não mais como uma coordenada mas sim como parâmetro, retornamos à equação de Schrödinger obtida inicialmente por Costa Filho *et al.* Deduzimos também a equação de continuidade para a equação de Klein-Gordon modificada e, análogo ao resultado já consolidado para a métrica de Minkowski usual, não foi possível interpretar uma densidade positiva de probabilidade devido ao caráter de segunda ordem nas derivadas temporais de tal equação.

A seguir, deduzimos a equação de Dirac modificada à métrica dependente da posição, onde foi possível indicar suas soluções livres e calcular sua equação de continuidade. Verificamos que sua interpretação probabilística satisfaz as condições inicialmente impostas, principalmente

no que diz respeito a densidade de probabilidade ser definida positiva e, portanto, ser interpretada corretamente como tal grandeza. Checamos também que, ao tomar o limite $\Upsilon^\mu \rightarrow 0$ recuperamos as grandezas calculadas inicialmente para a equação de Dirac usual.

Por fim, resolvemos o problema proposto do poço de potencial infinito para verificar a validade da equação de Dirac modificada. Nele, conseguimos relacionar corretamente as componentes superiores e inferiores do bi-spinor, além de aplicarmos corretamente a condição de contorno onde o fluxo de probabilidade nas paredes do poço sejam nulos, garantindo que o elétron esteja realmente confinado em seu interior. Obtemos a equação transcendental e, ao resolvê-la, foi possível calcular a relação energia-momento para o caso relativístico e, no caso não-relativístico, obtemos os mesmos níveis de energia calculados por Costa Filho *et al* utilizando a equação de Schrödinger modificada. Dessa forma, consideramos que os resultados obtidos foram extremamente satisfatórios.

Como futuras perspectivas, esperamos que a equação de Dirac modificada, assim como todo o estudo do operador de translação dependente da posição para o espaço-tempo, possam ser utilizados em outros problemas quânticos de interesse como sistemas de massa efetiva dependente da posição, semicondutores com gradiente de dopagem, materiais com estruturas cristalinas mais complexas, isolantes topológicos e folhas de grafeno. O estudo aqui presente possui potencial para aplicações em áreas como Matéria Condensada e Teoria de Campos, podendo trazer novas descobertas para a pesquisa em Física e aprofundando nosso entendimento tanto da Mecânica Quântica quanto da Relatividade.

REFERÊNCIAS

- AGUIAR, V.; CUNHA, S. M.; COSTA, D. R.; COSTA FILHO, R. N. Dirac fermions in graphene using the position-dependent translation operator formalism. **Physical Review B**, [s. l.], v. 102, p. 235404, dec. 2020. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.102.235404>. Acesso em: 16 jul. 2024.
- ALBERTO, P.; DAS, S.; VAGENAS, E. Relativistic particle in a three-dimensional box. **Physics Letters A**, [s. l.], v. 375, p. 1436–1440, mar. 2011. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/1102.3192>. Acesso em: 12 jun. 2024.
- ALBERTO, P.; FIOLHAIS, C.; GIL, V. Relativistic particle in a box. **European Journal of Physics**, [s. l.], v. 17, p. 19–24, jan. 1996. Disponível em: https://www.researchgate.net/publication/231101746_Relativistic_particle_in_a_box. Acesso em: 13 jun. 2024.
- ALONSO, V.; VINCENZO, S. D.; MONDINO, L. On the boundary conditions for the dirac equation. **European Journal of Physics**, [s. l.], v. 18, n. 5, p. 315–320, set. 1997. Disponível em: <https://dx.doi.org/10.1088/0143-0807/18/5/001>. Acesso em: 15 jun. 2024.
- ANDERSON, C. D. The positive electron. **Physical Review Journal Archive**, [s. l.], v. 43, p. 491–494, mar. 1933. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.43.491>. Acesso em: 18 mai. 2023.
- BARCELOS NETO, J. **Matemática Para Físicos com Aplicações**: vetores, tensores e spinores. São Paulo: Livraria da Física, 2010. ISBN 978-8578610913.
- BERESTETSKII, V.; LIFSHITZ, E.; PITACVSKII, L. **Relativistic Quantum Theory**. Oxônia, Reino Unido: Pergamon Press, 1971. ISBN 978-0080160252.
- BUTKOV, E. **Física Matemática**. Rio de Janeiro: LTC, 1978. ISBN 978-8521611455.
- CHODOS, A.; JAFFE, R. L.; JOHNSON, K.; THORN, C. B.; WEISSKOPF, V. F. New extended model of hadrons. **Physical Review D**, [s. l.], v. 9, p. 3471–3495, jun. 1974. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.9.3471>. Acesso em: 16 jun. 2024.
- COSTA FILHO, R. N.; ALENCAR, G.; SKAGERSTAM, B.-S.; ANDRADE, J. S. Morse potential derived from first principles. **EPL: Europhysics Letters**, [s. l.], v. 101, n. 1, p. 10009, jan. 2013. Disponível em: <https://doi.org/10.1209/0295-5075/101/1/10009>. Acesso em: 9 mar. 2023.
- COSTA FILHO, R. N.; ALMEIDA, M. P.; FARIAS, G. A.; ANDRADE, J. S. Displacement operator for quantum systems with position-dependent mass. **Physical Review A**, [s. l.], v. 84, n. 5, nov. 2011. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.84.050102>. Acesso em: 7 mar. 2023.
- COSTA FILHO, R. N.; BRAGA, J.; LIRA, J.; ANDRADE, J. S. Extended uncertainty from first principles. **Physics Letters B**, [s. l.], v. 755, p. 367–370, 2016. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370269316001313>. Acesso em: 8 mar. 2023.

COSTA FILHO, R. N.; OLIVEIRA, S.; AGUIAR, V.; COSTA, D. Two-dimensional electron gas in a non-euclidean space. **Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures**, [s. l.], v. 129, p. 114639, 2021. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1386947721000217>. Acesso em: 15 jul. 2024.

DIRAC, P. **The Principles of Quantum Mechanics**. Oxford: Oxford University Press, 1982. ISBN 978-0198520115.

FAI, L. C. **Quantum Mechanics: non-relativistic and relativistic theory**. Abingdon, Oxfordshire: CRC Press, 2022. ISBN 978-1032221465.

GNEITING, C.; FISCHER, T.; HORNBERGER, K. Quantum phase-space representation for curved configuration spaces. **Physical Review A**, [s. l.], v. 88, n. 6, dez. 2013. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.88.062117>. Acesso em: 4 abr. 2023.

GOLDSTEIN, H.; POOLE, C.; SAFKO, J. **Classical Mechanics**. São Francisco: Pearson, 2001. ISBN 978-0201657029.

GORDON, W. Der Comptoneffekt nach der Schrödingerschen Theorie. **Zeitschrift für Physik**, [s. l.], v. 40, n. 1-2, p. 117–133, jan. 1926. Disponível em: <https://link.springer.com/article/10.1007/BF01390840>. Acesso em: 8 jul. 2024.

GOURGOULHON Éric. **Special Relativity in General Frames: from particles to astrophysics**. Berlim: Springer, 2013. ISBN 978-3642372759.

GREINER, W. **Relativistic Quantum Mechanics: wave equations**. Berlim: Springer, 2000. ISBN 978-3540674573.

GREINER, W.; MULLER, B. **Quantum Mechanics Symmetries**. Berlim: Springer, 2001. ISBN 978-3540580805.

GRIFFITHS, D. J. **Introduction to Electrodynamics**. Cambridge: Cambridge University Press, 2017. ISBN 978-1108420419.

GRIFFITHS, D. J. **Introduction to Quantum Mechanics**. Cambridge: Cambridge University Press, 2018. ISBN 978-1107189638.

GROSS, F. **Relativistic Quantum Mechanics and Field Theory**. Alemanha: Wiley VCH, 1993. ISBN 978-0471591139.

GUENDELMAN, E.; OWEN, D. **Relativistic Quantum Mechanics And Related Topics**. Nova Jersey: World Scientific, 2022. ISBN 978-9811248757.

JACKSON, J. D. **Classical Electrodynamics**. Nova Jersey: Wiley, 1999. ISBN 978-0471309321.

KLEIN, O. Quantentheorie und fünfdimensionale Relativitätstheorie. **Zeitschrift für Physik**, [s. l.], v. 37, n. 12, p. 895–906, dez. 1926. Disponível em: <https://link.springer.com/article/10.1007/BF01397481>. Acesso em: 9 jul. 2024.

NUSSENZVEIG, H. M. **Curso de Física Básica: mecânica**. São Paulo: Blucher, 2013. ISBN 978-8521207450.

NUSSENZVEIG, H. M. **Curso de Física Básica: ótica, relatividade, física quântica**. São Paulo: Blucher, 2014. ISBN 978-8521208037.

PAULI, W.; WEISSKOPF, V. F. On Quantization of the Scalar Relativistic Wave Equation. **Helvetica Physica Acta**, [s. l.], v. 7, p. 709–731, 1934. Disponível em: <https://www.cambridge.org/core/books/abs/early-quantum-electrodynamics/quantization-of-the-scalar-relativistic-wave-equation/A421F54509B6F93A58A1A56E1A20A490>. Acesso em: 15 jun. 2023.

RINDLER, W. **Relativity**: special, general, and cosmological. Oxford: Oxford University Press, 2006. ISBN 978-0198567325.

SAKURAI, J. J.; NAPOLITANO, J. **Modern Quantum Mechanics**. Cambridge: Cambridge University Press, 2020. ISBN 978-1108473224.

STEPANOW, S. **Relativistische Quantentheorie**. Berlim: Springer, 2010. ISBN 978-3642120497.

TANNOUDJI, C. C.; DIU, B.; LALOE, F. **Quantum Mechanics**: basic concepts, tools and applications. Alemanha: Wiley-VCH, 2019. v. 1. ISBN 978-3527345533.

TAYLOR, J. R. **Classical Mechanics**. Melville, NY: University Science Books, 2004. ISBN 978-1891389221.

WOLSCHIN, G. **Relativistische Quantenmechanik**. Berlim: Springer, 2015. ISBN 978-3662471074.