

Dissertação de mestrado

**O OSCILADOR DE DIRAC UNIDIMENSIONAL
NUM BANHO TÉRMICO**

Mário Henrique Gomes Pacheco

UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
Fortaleza, Dezembro de 2001

Dissertação de mestrado

**O OSCILADOR DE DIRAC UNIDIMENSIONAL NUM
BANHO TÉRMICO**

Mário Henrique Gomes Pacheco

Dissertação submetida ao Departamento de Física
como requesito para obtenção do grau
de mestre em Física.

Orientador
Ricardo Renan Landim de Carvalho

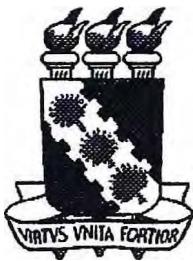
Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Sistema de Bibliotecas
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

P12o Pacheco, Mário Henrique Gomes.
O oscilador de Dirac unidimensional num banho térmico / Mário Henrique Gomes Pacheco. – 2001.
45 f. : il.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2001.
Orientação: Prof. Dr. Ricardo Renan Landim de Carvalho.

1. Teoria de campos unificados. 2. Teoria quântica. 3. Dirac, Equação de. I. Título.

CDD 530



**Universidade Federal do Ceará
Centro de Ciências
Curso de Pós-Graduação em Física**

“O Oscilador de Dirac Unidimensional num Banho Térmico”

Mário Henrique Gomes Pacheco

Dissertação submetida ao Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Física.

Banca Examinadora:

**Dr. Ricardo Renan Landim de Carvalho
UFC – Orientador**

**Dr. Carlos Alberto Santos de Almeida
UFC**

**Dr. Marcony Silva Cunha
UECE**

Aprovada em 20 de dezembro de 2001

Para Eniana

Agradecimentos

- Ao Criador.
- Aos meus pais, Maria de Lourdes e Pacheco por tudo o que eles me proporcionaram.
- A minha irmã Mara Renata, por todo seu carinho para comigo.
- Aos meus irmãos Luis Gustavo e João Alfredo por todos os momentos vividos.
- Ao meu amor, Maria Eniana, pelo o carinho e compreensão.
- Ao meu orientador, Prof. Dr. Ricardo Renan Landim de Carvalho, por sua paciência inesgotável, compreensão e amizade dispensadas ao longo deste trabalho.
- A todos os professores do curso de pós-graduação.
- Ao Prof. Dr. Josué Mendes Filho, coordenador do curso de pós-graduação em Física.
- Ao Prof. Dr. Paulo de Tarso Cavalcante Freire, chefe do departamento de Física.
- Aos amigos e amigas : Pedro di Tárique, Fabrício Potiguar, Joelma, Rivelino, Felipe Cavalcante, João José, Pedro de Freitas, Carlos Handrey, Isabel Cristina, B. Aparecida, Waldeci, Deusdedit e tantos outros que conheci no departamento de Física.
- Ao Dr. Carlos William de Araújo Paschoal.
- Ao Dr. Antônio Gomes de Souza, por suas dicas no Latex.
- A todos os funcionários do departamento em especial a Rejane, Ana Cleide e Elias.
- A Capes, pelo suporte financeiro.

- E por último, mas não de menor importância, ao Prof. Dr. Carlos Alberto Santos de Almeida, o meu respeito e minha admiração.

Resumo

O oscilador de Dirac é um modelo resolvido exatamente e que tem sido introduzido recentemente no contexto de mecânica quântica relativística de muitos corpos. O modelo tem sido também considerado como termo de interação para modelar o confinamento de quarks em cromodinâmica quântica e estudado em conexão com supersimetria, além de modelos de invariantes relativísticos.

Neste trabalho discutiremos o oscilador de Dirac unidimensional em contato com um reservatório térmico. Inicialmente partiremos do espectro de energia do oscilador e então encontraremos a função de partição e outras quantidades termodinâmicas; assim, faremos uma comparação com o oscilador harmônico não-relativístico.

Abstract

The Dirac oscillator is an exactly soluble model recently introduced in the context of many particle model in relativistic quantum mechanics. The model has been also considered as an interaction of modelling quark confinement in quantum chromodynamics and studied in connection with supersymmetric, besides of invariant relativistic models.

In this work we discuss the one-dimensional Dirac oscillator in contact with a thermal reservoir. Let us begin with energy spectrum of the oscillator, then we find the partition function and others thermodynamics quantity; thus we make one comparasion with the non-relativistic harmonic oscillator.

Conteúdo

Agradecimentos	i
Resumo	iii
Abstract	iv
Índice	iv
Lista de Figuras	vii
Introdução	1
1 A Equação de Dirac	4
1.1 A Equação	4
1.2 Solução da equação de Dirac para partícula livre	8
2 O oscilador de Dirac	13
2.1 Introdução	13
2.2 Autossoluções do oscilador de Dirac	15
2.3 O termo de interação do oscilador de Dirac	19
3 O Oscilador de Dirac unidimensional num banho térmico	22
3.1 Introdução	22
3.2 Estudo da Função de partição do Oscilador de Dirac para altas temperaturas	24
3.3 A Série $\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\sqrt{an+b}\beta}$	29

3.4 Análise numérica da quantidades termodinâmicas do oscilador hamônico e do oscilador de Dirac	31
Conclusão	38
Apêndice	38
A Teste de convergência de séries infinitas	39
A.1 O teste da razão	39
A.2 O teste da integral	40
A.3 O teste da comparação	40
B Relações e constantes físicas úteis	41
B.1 Quantidades termodinâmicas	41
B.2 Constantes físicas	42
B.3 Relações da métrica e derivadas	42
B.4 Matrizes de Dirac	42
B.5 Matrizes de Pauli	43
Bibliografia	44

Listas de Figuras

3-1 Energia média em função da temperatura para ω da ordem de $10^{13}s^{-1}$	32
3-2 Calor específico em função da temperatura para ω da ordem de $10^{13}s^{-1}$	33
3-3 Energia média em função da temperatura para ω da ordem de $10^{14}s^{-1}$	34
3-4 Calor específico em função da temperatura para ω da ordem de $10^{14}s^{-1}$	35
3-5 Energia média em função da temperatura para ω da ordem de 10^2s^{-1}	36
3-6 Calor específico em função da temperatura para ω da ordem de 10^2s^{-1}	37

Introdução

O oscilador de Dirac é uma das mais recentes aplicações da equação de Dirac. Nos últimos anos vários trabalhos foram escritos abordando o oscilador de Dirac [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13] entre outros. Inicialmente o oscilador de Dirac foi sugerido por Moshinsky e Szczepaniak em [1], onde eles propuseram um modelo para o oscilador relativístico que resulta no oscilador harmônico no limite de baixas energias. Assim, o oscilador de Dirac é dito ser o oscilador harmônico acrescentado de um termo de acoplamento spin-órbita.

O oscilador de Dirac resulta em um fato interessante que é a ausência do paradoxo de Klein, devido ao fato de que as partículas permanecem ligadas pela interação do oscilador como visto em [14]. O paradoxo de Klein é ilustrado usando como exemplo o potencial step, e alguns autores afirmam que quando o potencial excede o valor $E+m$, o coeficiente de reflexão é maior que 1 [15].

Os espectros de energia do oscilador de Dirac, e suas correspondentes autofunções, foram obtidas em [16]. Mostra-se que o oscilador de Dirac corresponde também a interação do momento magnético anômalo. Isso se deve ao fato de que o momento magnético anômalo de uma partícula quando acoplado ao campo eletromagnético de uma esfera resulta no hamiltoniano do oscilador de Dirac. Moreno e Zentella em [17] analisaram as propriedades da transformação de Foldy-Wouthuysen e mostraram que a forma fechada da transformação pode ser encontrada pelo oscilador de Dirac. O oscilador de Dirac possui ainda aplicações na Cromodinâmica Quântica (QCD). Uma aplicação importante é que ele pode ser usado para estimar a massa dos quarks [4].

Nos últimos anos, os efeitos relativísticos em cristais vem despertando interesses [18, 19, 20, 21, 22]. Esses efeitos são mais evidentes quando temos potenciais de interação fortes, como o potencial do oscilador de Dirac, ou quando temos cristais submetidos a altas temperaturas. Recentemente, Avetisyan *et al* [23] mostraram a importância de se considerar efeitos relativísticos calculando níveis de energia em semicondutores submetidos a campos magnéticos intensos (da ordem de $10^5 Oe$). Neste domínio, a teoria da massa efetiva ainda é válida e, no caso de aproximação de duas bandas, a relação de dispersão segue o espectro descrito pela equação relativística de Klein-Gordon [21]. Assim sendo, para que possamos estudar os efeitos relativísticos em cristais, devemos estender os modelos não-relativísticos existentes na literatura.

Nessa dissertação, estamos começando o processo de extensão dos modelos não-relativísticos. Inicialmente analisaremos o caso mais simples que é o oscilador de Dirac unidimensional, fazendo com que este esteja em contato com um banho térmico, para que assim possamos encontrar quantidades termodinâmicas, tais como energia média e calor específico.

No primeiro capítulo desta dissertação faremos um breve resumo da equação de Dirac, onde inicialmente mostraremos suas propriedades e em seguida discutiremos a equação da partícula livre.

No segundo capítulo discutiremos o oscilador de Dirac. Aqui faremos uma breve revisão de suas propriedades e faremos uma simples comparação com o oscilador harmônico simples. Faremos também um estudo das autofunções do oscilador de Dirac, encontrando os espectros de energia do oscilador como em [2],[3].

No terceiro capítulo analisaremos o oscilador de Dirac unidimensional. Primeiramente, iremos considerar o oscilador num banho térmico, sendo assim teremos o fator de Boltzmann $\exp(-E\beta)$ presente. Usando o espectro de energia do oscilador de Dirac em [2] e desconsiderando os termos de acoplamento spin-órbita ou ainda usando o espectro

de energia do oscilador de Dirac unidimensional como em [24], obteremos a função de partição, a energia média e o calor específico do oscilador de Dirac num banho térmico. Para o cálculo dessas quantidades usaremos métodos computacionais, mais precisamente Linguagem C, para realizações das somas infinitas e das integrais impróprias. Assim faremos uma comparação com as quantidades termodinâmicas do oscilador harmônico simples. Faremos em seguida um estudo da série $\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\sqrt{an+b}\beta}$ que é originada pela função de partição do oscilador de Dirac.

No apêndice faremos um breve estudo dos testes de convergência das séries infinitas e finalmente apresentaremos nossas conclusões e perspectivas acerca do nosso trabalho.

Capítulo 1

A Equação de Dirac

A equação de Dirac é uma equação relativística que descreve partículas de spin 1/2, como elétrons e quarks; uma característica dessas partículas é que elas possuem dois graus de liberdade. Partículas de spin 0 são descritas pela equação relativística de Klein-Gordon.

1.1 A Equação

A equação de Klein-Gordon na forma de duas componentes é escrita como

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

Enquanto esta equação é de primeira ordem na derivada temporal, o hamiltoniano de Klein-Gordon é de segunda ordem na derivada espacial e portanto não temos equivalência nas coordenadas espacial e temporal. Além disso, como na teoria de Klein-Gordon a densidade de probabilidade não é positiva definida, logo o hamiltoniano da equação de Klein-Gordon de duas componentes não é hermitiano. Finalmente a covariância dessa equação somente se manifesta na forma da equação de uma componente. Sendo assim, surge a seguinte pergunta: existe uma equação relativística que seja de primeira

ordem na derivada temporal e que as coordenadas espaciais e temporais manifestem-se simetricamente, cuja densidade de probabilidade seja positiva definida (implicando que o hamiltoniano seja hermitiano) e ainda manifeste covariância de Lorentz? Esta pergunta nos leva diretamente à equação de Dirac.

Esta equação deve ter a seguinte forma:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H\Psi = (c\alpha \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2)\Psi, \quad (1.2)$$

onde α e β são matrizes hermitianas e $\mathbf{p} = -i\hbar \nabla$. A relação energia-momento surge naturalmente, usando a energia como $E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ e aplicando em ambos os membros da equação (1.2), ou seja,

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (c\alpha \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2) \psi, \quad (1.3)$$

ou ainda

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = (c\alpha \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2)^2 \psi = (p^2 c^2 + m^2 c^4) \psi. \quad (1.4)$$

A equação (1.4) deve ser válida para qualquer ψ dado. Tomando $c = 1$ acima, temos que:

$$(\alpha_i p^i + \beta m)^2 = \beta^2 m^2 + (\alpha_i)^2 (p^i)^2 + \{\beta, \alpha_i\} m p^i + \frac{1}{2} \{\alpha_i, \alpha_j\}_{i \neq j} p^i p^j = \sum_i (p^i)^2 + m^2, \quad (1.5)$$

onde $\{A, B\} = AB + BA$ é o anticomutador dos operadores A e B. A equação acima é

válida se, e somente se,

$$\{\alpha_i, \beta\} = \{\alpha_i, \alpha_j\} = 0$$

$$\beta^2 = \alpha_i^2 = 1.$$

Uma forma de representação destas matrizes é dada por

$$\alpha_i = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{bmatrix}, \quad \beta = \begin{bmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{bmatrix}, \quad (1.6)$$

onde σ_i são as matrizes de Pauli

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

A equação de Dirac ainda pode ser escrita na forma covariante. Usando as matrizes γ^μ onde $\gamma^\mu = (\beta, \beta\alpha_i)$ como

$$\gamma^0 = \begin{bmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{bmatrix} \text{ e } \gamma^i = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{bmatrix},$$

encontraremos a forma covariante da equação de Dirac, que será dada por:

$$(\imath\hbar\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - mc)\psi = 0. \quad (1.7)$$

Para construirmos a lei diferencial de conservação da corrente, inicialmente escrevendo (1.1) na seguinte forma

$$\imath\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[\frac{\hbar c}{\imath} \left(\hat{\alpha}_1 \frac{\partial}{\partial x^1} + \hat{\alpha}_2 \frac{\partial}{\partial x^2} + \hat{\alpha}_3 \frac{\partial}{\partial x^3} \right) + \beta mc^2 \right] \psi = H\psi, \quad (1.8)$$

e definindo a função de onda conjugada hermitiana $\psi^\dagger = (\psi_1^*, \psi_2^*, \psi_3^*, \psi_4^*)$, basta multiplicar a equação (1.8) por ψ^\dagger pelo lado esquerdo, ou seja,

$$i\hbar\psi^\dagger \frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\hbar c}{i} \sum_{k=1}^3 \psi^\dagger \alpha_k \frac{\partial}{\partial x^k} \psi + mc^2 \psi^\dagger \beta \psi. \quad (1.9)$$

Além disso, com a forma hermitiana conjugada das matrizes α_i e β

$$-i\hbar \frac{\partial\psi^\dagger}{\partial t} = -\frac{\hbar c}{i} \sum_{k=1}^3 \frac{\partial\psi^\dagger}{\partial x^k} \alpha_k^\dagger + mc^2 \psi^\dagger \beta^\dagger, \quad (1.10)$$

multiplicando (1.10) pela direita por ψ e considerando a hermiticidade das matrizes de Dirac, ou seja ($\alpha_i^\dagger = \alpha_i$, $\beta^\dagger = \beta$), temos:

$$-i\hbar \frac{\partial\psi^\dagger}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar c}{i} \sum_{k=1}^3 \frac{\partial\psi^\dagger}{\partial x^k} \alpha_k \psi + mc^2 \psi^\dagger \beta \psi. \quad (1.11)$$

Agora subtraindo (1.11) de (1.9) temos:

$$i\hbar \frac{\partial(\psi^\dagger \psi)}{\partial t} = \frac{\hbar c}{i} \sum_{k=1}^3 \frac{\partial(\psi^\dagger \alpha_k \psi)}{\partial x^k}, \quad (1.12)$$

ou ainda

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0,$$

onde $\rho = \psi^\dagger \psi = \sum_{i=1}^4 \psi_i^* \psi_i$ é a densidade de carga positiva definida e $j^k = c\psi^\dagger \alpha^k \psi$ ou $\mathbf{j} = c\psi^\dagger \alpha \psi$ é a densidade de corrente.

1.2 Solução da equação de Dirac para partícula livre

A equação de Dirac pode ser escrita como:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi = (c\alpha \cdot \mathbf{p} + mc^2\hat{\beta})\psi \quad (1.13)$$

Para os estados estacionários, se utilizarmos o anzats

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x}) \exp[-(\frac{i}{\hbar}\varepsilon)t], \quad (1.14)$$

e se fizermos

$$\varepsilon\psi(\mathbf{x}) = H\psi(\mathbf{x}), \quad (1.15)$$

onde ε nos fornece a evolução temporal do estado estacionário, chegaremos em (1.8).

Escrevendo o spinor de quatro componentes em um spinor de dois componentes φ e χ temos:

$$\psi = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varphi \\ \chi \end{bmatrix}, \quad (1.16)$$

onde $\chi = \begin{bmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{bmatrix}$ e $\varphi = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix}$. Usando as matrizes de Dirac (1.6) e a equação (1.15) temos:

$$\varepsilon \begin{bmatrix} \varphi \\ \chi \end{bmatrix} = c \begin{bmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{bmatrix} \cdot \mathbf{p} \begin{bmatrix} \varphi \\ \chi \end{bmatrix} + m^2 c^2 \begin{bmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi \\ \chi \end{bmatrix},$$

ou

$$\begin{aligned}\varepsilon\varphi &= c\sigma \cdot \mathbf{p}\chi + mc^2\varphi \\ \varepsilon\chi &= c\sigma \cdot \mathbf{p}\varphi - mc^2\chi.\end{aligned}\quad (1.17)$$

Organizando as equações acima e considerando o operador \mathbf{p} sendo o autovalor p e que

$$\begin{bmatrix} \varphi \\ \chi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varphi_0 \\ \chi_0 \end{bmatrix} \exp\left[\left(\frac{i}{\hbar}\right)\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}\right], \quad (1.18)$$

temos:

$$\begin{aligned}(\varepsilon - m_0c^2)\mathbf{1}\varphi_0 - c\sigma \cdot \mathbf{p}\chi_0 &= 0 \\ -c\sigma \cdot \mathbf{p}\varphi_0 + (\varepsilon + m_0c^2)\mathbf{1}\chi_0 &= 0.\end{aligned}\quad (1.19)$$

Considerando que o determinante da matriz dos coeficientes de (1.19) seja zero, ou seja, a equação (1.17) possui solução não-nula, temos:

$$\begin{vmatrix} (\varepsilon - m_0c^2)\mathbf{1} & -c\sigma \cdot \mathbf{p} \\ -c\sigma \cdot \mathbf{p} & (\varepsilon + m_0c^2)\mathbf{1} \end{vmatrix}, \quad (1.20)$$

assim

$$(\varepsilon^2 - m_0^2c^4)\mathbf{1} - c^2(\sigma \cdot \mathbf{p})(\sigma \cdot \mathbf{p}) = 0.$$

Usando o fato que $(\sigma \cdot \mathbf{p})^2 = \mathbf{p}$, temos que a relação energia-momento (1.21) fornece:

$$\varepsilon^2 = m_0^2c^4 + c^2\mathbf{p}^2.$$

Considerando $\varepsilon = \pm E_p$ temos:

$$E_p = c\sqrt{\mathbf{p}^2 + m_0^2c^2}, \quad (1.22)$$

onde os sinais + ou - de ε descrevem as duas soluções da equação de Dirac. Da equação (1.19) podemos encontrar o valor de χ_0 , assim:

$$\chi_0 = \frac{c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{m_0 c^2 + \varepsilon} \varphi_0. \quad (1.23)$$

Se considerarmos φ_0 na forma

$$\varphi_0 = U = \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \end{bmatrix}, \quad (1.24)$$

e a normalização

$$U^\dagger U = U_1^* U_1 + U_2^* U_2 = 1$$

onde U_1 e U_2 são complexos, e usando (1.14) e (1.18) teremos o conjunto completo de soluções livres positivas e negativas da equação de Dirac como sendo:

$$\Psi(x, t) = \frac{N}{(\sqrt{2\pi\hbar})^3} \begin{bmatrix} U \\ \frac{c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{m_0 c^2 + \lambda E_p} U \end{bmatrix} \exp[i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - \lambda E_p t)/\hbar], \quad (1.25)$$

onde $\lambda = \pm 1$ e $\varepsilon = \lambda E_p$.

A constante N pode ser determinada pela condição de normalização

$$\int \Psi_{p\lambda}^\dagger(x, t) \Psi_{p'\lambda'}(x, t) d^3x = \delta_{\lambda\lambda'} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \quad (1.26)$$

portanto,

$$\begin{aligned}
N^2(U^\dagger U + U^\dagger \frac{c^2(\sigma \cdot \mathbf{p})(\sigma \cdot \mathbf{p})}{(mc^2 + \lambda E_p)^2} U) &= 1 \\
N^2(1 + \frac{c^2 \mathbf{p}^2}{(mc^2 + \lambda E_p)^2}) &= 1 \\
N &= \sqrt{\frac{(mc^2 + \lambda E_p)^2}{(mc^2 + \lambda E_p)^2 + c^2 \mathbf{p}^2}} \\
N &= \sqrt{\frac{(mc^2 + \lambda E_p)^2}{(m^2 c^4 + c^2 \mathbf{p}^2) + 2mc^2 \lambda E_p + E_p^2}} \\
N &= \sqrt{\frac{(mc^2 + \lambda E_p)^2}{2(mc^2 + \lambda E_p) \lambda E_p}} \\
N &= \sqrt{\frac{(mc^2 + \lambda E_p)}{2 \lambda E_p}}. \tag{1.27}
\end{aligned}$$

O espectro de $\varepsilon_{p\lambda} = \lambda E_p$, correspondendo aos autovalores da função $\Psi_{p\lambda}(x, t)$. Do mesmo modo que na equação de Klein-Gordon, temos autovalores de energia positiva e negativa. Considerando que todos os estados de (1.25) são autofunções do momento, ou seja:

$$\hat{p}\Psi_{p\lambda} = p\Psi_{p\lambda}(x, t), \tag{1.28}$$

para todo p temos duas diferentes soluções, uma dada por $\lambda = 1(\varepsilon - E_p)$ e outra $\lambda = -1(\varepsilon = -E_p)$.

De acordo com [26], o operador helicidade $\hat{\Lambda}_s$ é definido como:

$$\hat{\Lambda}_s = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} = \hat{S}_z, \tag{1.29}$$

e usado para classificar os estados de uma partícula livre. Os autovalores são $\pm \frac{\hbar}{2}$ e os autovetores de $\hat{\Lambda}_z$, são:

$$\begin{bmatrix} u_1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} u_{-1} \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ u_1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ u_{-1} \end{bmatrix}, \quad (1.30)$$

com

$$u_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, u_{-1} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Assim a propagação de onda livre de Dirac na direção z é denotada por Ψ_{pz,λ,s_z} e escrita como:

$$\Psi_{p,\lambda,+1/2} = \sqrt{\frac{(mc^2 + \lambda E_p)}{2\lambda E_p}} \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\ \frac{c\sigma_z p}{mc^2 + \lambda E_p} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \end{bmatrix} \exp[i(pz - \lambda E_p t)/\hbar] \quad (1.31)$$

e

$$\Psi_{p,\lambda,-1/2} = \sqrt{\frac{(mc^2 + \lambda E_p)}{2\lambda E_p}} \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \\ \frac{c\sigma_z p}{mc^2 + \lambda E_p} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \end{bmatrix} \exp[i(pz - \lambda E_p t)/\hbar]. \quad (1.32)$$

No próximo capítulo faremos uma breve revisão de uma das mais recentes aplicações da equação de Dirac que é o Oscilador de Dirac.

Capítulo 2

O oscilador de Dirac

2.1 Introdução

O oscilador harmônico possui várias aplicações na mecânica quântica não-relativística cujas equações podem ser resolvidas exatamente. Isso deve-se ao fato de que a hamiltoniana é quadrática no momento e na coordenada espacial.

Como a equação de Dirac é linear no momento, procurou-se obter um modelo análogo ao oscilador harmônico na mecânica quântica relativística. Com isso surgiu o oscilador de Dirac analizado em [1]. A equação do movimento desse oscilador é obtida fazendo uma substituição na hamiltoniana da equação (1.17), que é dita ser uma substituição não-mínima e definida como:

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \imath m\omega\beta\mathbf{r}, \quad (2.1)$$

onde m é a massa da partícula e ω é a freqüência do oscilador, assim (1.17)fica¹:

$$\imath \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi = (\boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{p} - \imath m\omega\beta\mathbf{r}) + m\beta)\psi. \quad (2.2)$$

¹Neste capítulo usaremos as unidades naturais $\hbar = c = 1$

Como podemos observar na equação (2.2) apesar de (2.1) não ser hermitiana, a matriz α permite que o hamiltoniano seja. A Matriz β faz com que a equação (2.1) seja covariante de Lorentz como analizada em [2].

Para fazer uma comparação entre o oscilador harmônico e oscilador de Dirac, inicialmente tomemos o quadrado do hamiltoniano de (2.2), ou seja:

$$H^2 = [(\alpha \cdot (\mathbf{p} - i\hbar\omega\beta\mathbf{r}) + m\beta)]^2. \quad (2.3)$$

Fazendo algumas manipulações chegaremos na equação abaixo:

$$H^2 = p^2 + m^2\omega^2r^2 + (4\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} - 3)m\omega\beta, \quad (2.4)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathbf{L} &= \mathbf{r} \times \mathbf{p} \\ \mathbf{S} &= \left(\frac{\hbar}{2}\right)\boldsymbol{\sigma}, \end{aligned} \quad (2.5)$$

são o momento angular orbital e o spin, respectivamente.

De (2.4) podemos observar que o hamiltoniano fica sendo a interação do oscilador harmônico somado com um termo de spin-órbita acoplado, ou seja, o oscilador de Dirac pode ser visto como sendo uma raiz quadrada do oscilador harmônico linear. A hamiltoniana possui somente termos comutantes com a matriz β . Esses operadores são chamados de operadores par.

Para mostrarmos que o momento angular total é conservado no caso do oscilador de Dirac, basta definir o momento angular total como sendo $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}$. Inicialmente notamos que o hamiltoniano não comuta separadamente com \mathbf{L} e $\boldsymbol{\sigma}$ respectivamente, ou

'seja:

$$[\mathbf{L}, H] = \imath(\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{p}) - m\omega(\mathbf{r} \times \boldsymbol{\alpha})\beta \quad (2.6)$$

$$\left[\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}, H\right] = -\imath(\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{p}) + m\omega(\mathbf{r} \times \boldsymbol{\alpha})\beta, \quad (2.7)$$

'onde $[A, B] = AB - BA$. Mas se tomarmos a expressão completa de \mathbf{J} , temos que o momento angular total é conservado, ou seja:

$$[\mathbf{J}, H] = 0. \quad (2.8)$$

2.2 Autossoluções do oscilador de Dirac

Nesta seção calcularemos os espectros de energia do oscilador de Dirac. Como vimos na primeira seção, o momento angular é conservado em nosso sistema, pois o momento angular total \mathbf{J} comuta com H . A regra de soma do momento angular é definida como $j = \ell \pm \frac{1}{2}$, onde j é o momento angular total e ℓ é o número quântico orbital. A paridade é utilizada em nosso sistema para classificar as autofunções da energia. Como a paridade das autofunções de energia é definida como sendo $(-1)^\ell$, temos, portanto:

$$\epsilon = \begin{cases} +1 & \text{se a paridade } (-1)^{j+\frac{1}{2}} \\ -1 & \text{se a paridade } (-1)^{j-\frac{1}{2}} \end{cases}, \quad (2.9)$$

onde, nos dois casos, temos $\ell = j + \frac{\epsilon}{2}$.

Como o oscilador de Dirac conserva o momento angular, podemos dividir as autofunções da energia em duas partes, ou seja, na parte radial e na parte angular, de acordo

com o valor de ϵ [26]. Assim a solução da equação (2.2) será:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} F(r) y_{jm\ell}^{\pm}(\theta, \phi) \\ iG(r) y_{jm\ell}^{\mp}(\theta, \phi) \end{pmatrix} \exp(-iEt), \quad (2.10)$$

onde $y_{jm\ell}^{\pm}$ e $y_{jm\ell}^{\mp}$ são os harmônicos esféricos espinoriais. Eles são definidos como:

$$y_{jm\ell}^{\pm}(\theta, \phi) = \begin{pmatrix} \frac{\ell \pm m + \frac{1}{2}}{2\ell + 1} Y_{\ell, m - \frac{1}{2}}(\theta, \phi) \\ \pm \frac{\ell \mp m + \frac{1}{2}}{2\ell + 1} Y_{\ell, m + \frac{1}{2}}(\theta, \phi) \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

onde $Y_{\ell, m - \frac{1}{2}}$ e $Y_{\ell, m + \frac{1}{2}}$ são os harmônicos esféricos. O operador paridade é definido como em [26]

$$P = e^{i\varphi} \gamma^0,$$

onde $e^{i\varphi}$ é um fator de fase não observável, escolhido como sendo ± 1 ou $\pm i$, assim P é proporcional a $\beta = \gamma^0$. As paridades dos harmônicos esféricos espinoriais devem ser opostas, isto é, para $\ell = j + \frac{\epsilon}{2}$ temos $\ell' = j - \frac{\epsilon}{2}$. Desta maneira, ficamos com:

$$(j + \frac{1}{2})(j + \frac{1}{2} + \epsilon) = \ell(\ell + 1) \quad (2.12)$$

e

$$(j + \frac{1}{2})(j + \frac{1}{2} - \epsilon) = \ell'(\ell' + 1), \quad (2.13)$$

assim temos que o quadrado do momento angular satisfaz:

$$L^2 = (j + \frac{1}{2})(j + \frac{1}{2} + \epsilon\beta). \quad (2.14)$$

Da equação (2.14) e usando as relações abaixo:

$$\begin{aligned} J^2 &= L^2 + 2\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} + \frac{3}{4} \\ J^2 &= j(j+1), \end{aligned} \quad (2.15)$$

temos:

$$\begin{aligned} j(j+1) &= (j + \frac{1}{2})(j + \frac{1}{2} + \epsilon\beta) + 2\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} + \frac{3}{4} \\ -2\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} &= j\epsilon\beta + \frac{\epsilon\beta}{2} + 1 \\ \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} &= -\frac{j\epsilon\beta}{2} - \frac{\epsilon\beta}{4} - \frac{1}{4} \\ \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} &= -\frac{1}{4}\epsilon(2j+1)\beta - \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Observemos que a expressão acima é independente de r , ou seja, no espectro de energia o acoplamento é constante. Usando a relação entre o quadrado do momento linear e o quadrado do momento angular [26] temos:

$$H^2 - m^2 = -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{(j + \frac{1}{2})(j + \frac{1}{2} + \epsilon\beta)}{r^2} + m^2\omega^2 r^2 + m\omega[\epsilon(2j+1) - \beta]. \quad (2.17)$$

Observemos que na equação (2.17) o termo $H^2 - m^2$ é uma soma entre a parte radial da equação de um oscilador não-relativístico e o termo abaixo:

$$m\omega[\epsilon(2j+1) - \beta].$$

O espectro de energia do oscilador de Dirac é dado pela soma do espectro de energia do oscilador harmônico tri-dimensional e a o termo constante acima, ou seja:

$$H^2 - m^2 = 2mE_n + m\omega[\epsilon(2j+1) - \beta], \quad (2.18)$$

onde $E_n = \hbar\omega(N + \frac{3}{2})$ para $N = 0, 1, 2, \dots$. O número quântico principal é dado por $N = 2n + \ell$. Assim o espectro de energia é dado, como em [16], por

$$E_+ = \sqrt{m\omega[2(N + 1) + \epsilon(2j + 1)] + m^2}, \quad (2.19)$$

para os estados de energia positiva e

$$E_- = -\sqrt{m\omega[2(N + 2) + \epsilon(2j + 1)] + m^2}, \quad (2.20)$$

para estados de energia negativa.

2.3 O termo de interação do oscilador de Dirac

Nesta seção mostraremos que o hamiltoniano do oscilador de Dirac é resultado da interação do momento magnético anômalo de uma partícula acoplado ao campo elatromagnético produzido por uma esfera carregada. Inicialmente consideremos uma esfera dielétrica de raio R uniformemente carregada. Dentro da esfera o campo elétrico varia com o raio na forma $E = -\lambda r$; já o campo magnético é nulo em qualquer lugar, ou seja, $B = 0$.

Calculando o potencial eletromagnético A^μ associado ao campo magnético estático, usando $A_0 = 0$ e $\mathbf{A} = \lambda t \mathbf{r}$, temos:

$$A^\mu = \lambda(0, tr). \quad (2.21)$$

Para escrever a expressão acima na forma covariante de Lorentz, usamos o fato de o campo elatromagnético ser invariante de gauge. Assim basta escolhermos a função de gauge adequada, ou seja:

$$\Lambda = -\frac{\lambda}{4} \left(tr^2 + \frac{t^3}{3} \right) \quad (2.22)$$

Usando a relação $A'^\mu = A^\mu - \partial^\mu \Lambda$ e pela definição da derivada covariante como em [?], temos que o novo potencial será dado por:

$$A'^\mu = \frac{\lambda}{4} (t^2 + r^2, 2tr). \quad (2.23)$$

Usando agora o quadrivetor $u^\mu = m\omega(1, 0)$ podemos ver que o termo de interação da equação(2.2) pode ser dado na forma:

$$im\omega \alpha \cdot \mathbf{r} = \sigma^{\mu\nu} x_\mu u_\nu, \quad (2.24)$$

assim, a equação (2.2) pode ser escrita na forma covariante:

$$\left[\gamma^\mu p_\mu - m + \left(\frac{\kappa e}{4m} \right) \sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu} \right] = 0, \quad (2.25)$$

onde $\kappa = \frac{2m}{e}$ é o momento magnético anômalo do oscilador de Dirac.

O potencial ele romagnético pode ser escrito como:

$$A^\mu = \frac{\lambda}{4} [2(u \cdot x)x^\mu - x^2 u^\mu], \quad (2.26)$$

onde o tensor ele romagnético pode ser dado como sendo:

$$F_{\mu\nu} = \lambda(u^\mu x^\nu - u^\nu x^\mu). \quad (2.27)$$

Quando substituímos a equação (2.27) para o campo eletromagnético no termo de interação da expressão (2.25) temos:

$$\frac{\kappa e}{4m} \sigma_{\mu\nu} F^{\mu\nu} = \frac{\kappa e}{2m} \lambda(i\alpha \cdot \mathbf{r}). \quad (2.28)$$

Multiplicando (2.28) pela matriz β , nós encontraremos o termo de interação do oscilador de Dirac. Então podemos ver que o hamiltoniano do oscilador de Dirac pode ser dado

pelo acoplamento não-mínimo:

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \frac{i}{2m} e\kappa \lambda \mathbf{r} \beta, \quad (2.29)$$

onde $\lambda = \frac{2m^2\omega}{e\kappa}$, ou seja:

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - i m \omega \mathbf{r} \beta. \quad (2.30)$$

No próximo capítulo estudaremos o oscilador de Dirac unidimensional e analisaremos suas quantidades termodinâmicas.

Capítulo 3

O Oscilador de Dirac unidimensional num banho térmico

3.1 Introdução

Neste capítulo estudaremos o Oscilador de Dirac unidimensional num banho térmico. Consideraremos o oscilador em equilíbrio com um reservatório de calor a uma dada temperatura T . Com o espectro de energia positiva do oscilador, poderemos encontrar o fator de Boltzmann dado por $\exp(-E\beta)$ onde E é a energia e $\beta = \frac{1}{kT}$; assim procedendo, poderemos encontrar as quantidades termodinâmicas, a saber, a função de partição, a energia média e o calor específico. Em seguida, iremos comparar com os resultados obtidos com o caso do oscilador harmônico não-relativístico.

Inicialmente para o oscilador não-relativístico em uma dimensão, de acordo com a Mecânica Quântica, os níveis de energia são não-degenerados e dados por:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega. \quad (3.1)$$

A função de partição neste caso é dada por

$$Z = \sum_{estados} \exp(-E_n \beta), \quad (3.2)$$

ou ainda,

$$Z = \sum_{estados} \exp[-\beta(n + \frac{1}{2})\hbar\omega] = \exp(-\beta \frac{\hbar\omega}{2}) \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-n\beta\hbar\omega). \quad (3.3)$$

A probabilidade do oscilador harmônico unidimensional ter autovalores de energia $(n + \frac{1}{2})\hbar\omega$, no equilíbrio térmico, é dada por:

$$P_n = \frac{\exp[-\beta(n + \frac{1}{2})\hbar\omega]}{Z}. \quad (3.4)$$

Assim, o valor da energia média do oscilador harmônico é:

$$\bar{U} = \sum P_n E_n = \frac{\sum (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \exp[-\beta(n + \frac{1}{2})\hbar\omega]}{\sum \exp[-\beta(n + \frac{1}{2})\hbar\omega]}. \quad (3.5)$$

Depois de algumas considerações podemos simplificar a equação (3.5), tornando-se:

$$\bar{U} = \frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{\hbar\omega}{[e^{\beta\hbar\omega} - 1]}. \quad (3.6)$$

Para o caso relativístico unidimensional, inicialmente iremos considerar a energia dada em (2.19), ou seja

$$E = \sqrt{m\omega\hbar[2(N + 1)] + m^2}, \quad (3.7)$$

onde o termo de spin não está presente. Assim a função de partição do oscilador de Dirac

será dada por:

$$Z = \sum \exp[-\sqrt{(2(N+1)m\hbar\omega + m^2)\beta}], \quad (3.8)$$

e a energia média será:

$$\bar{U} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{(2(n+1)m\hbar\omega + m^2)} \exp[-\sqrt{(2(n+1)m\hbar\omega + m^2)}\beta]}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp[-\sqrt{(2(n+1)m\hbar\omega + m^2)}\beta]}. \quad (3.9)$$

3.2 Estudo da Função de partição do Oscilador de Dirac para altas temperaturas

Inicialmente iremos considerar a função de partição do oscilador harmônico não-relativístico como definido em (3.3) , ou seja :

$$Z = e^{-\beta \frac{\hbar}{2}\omega} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\beta\hbar\omega}. \quad (3.10)$$

Usando dimensões naturais, $\hbar = \omega = 1$ e desprezando o termo $e^{-\frac{\beta}{2}}$ para altas temperaturas temos que a equação acima fica:

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\beta}. \quad (3.11)$$

Para altas temperaturas, ou seja, para $\beta \ll 1$, a função de partição do oscilador harmônico não-relativístico pode ser escrita como:

$$Z = \frac{1}{1 - e^{-\beta}} \simeq \frac{1}{\beta} + \frac{1}{2}$$

ou seja,

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\beta} \simeq \frac{1}{\beta} + \frac{1}{2}. \quad (3.12)$$

Considere a seguinte integral

$$I = \int_0^{\infty} e^{-\beta x} dx = -\frac{e^{-\beta}}{\beta} \Big|_0^{\infty} = \frac{1}{\beta} \quad (3.13)$$

Usando a regra dos trapézios, a integral acima pode ser aproximada por :

$$\begin{aligned} S &= \frac{(1 + e^{-\beta})}{2} + \frac{(e^{-\beta} + e^{-2\beta})}{2} + \dots \\ S &= -\frac{1}{2} + \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\beta}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Para o caso $\beta \ll 1$, usando (3.12) temos:

$$S = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{\beta} = \frac{1}{\beta}. \quad (3.15)$$

Ou seja, para altas temperaturas, o valor da integral (3.12), é equivalente a soma dos trapézios dada por (3.15).

Se agora considerarmos o caso relativístico, partindo da função de partição dada por (3.7), temos:

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\sqrt{2(n+1)m\hbar\omega+m^2}\beta}. \quad (3.16)$$

Podemos escrever a expressão acima como:

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\sqrt{an+b}\beta}, \quad (3.17)$$

onde $a = 2m\hbar\omega$ e $b = m^2 + 2m\hbar\omega$. Agora considerando a integral,

$$I(\beta) = \int_0^{\infty} e^{-\sqrt{ax+b}\beta} dx, \quad (3.18)$$

e fazendo uma mudança de variáveis, temos:

$$I(\beta) = \frac{2}{a} \int_{\sqrt{b}}^{\infty} e^{-y\beta} y dy. \quad (3.19)$$

A integral acima pode ser facilmente calculada

$$I(\beta) = \frac{2}{a} \left(-\frac{\partial}{\partial \beta} \int_{\sqrt{b}}^{\infty} e^{-y\beta} dy \right), \quad (3.20)$$

resultando então:

$$I(\beta) = \frac{2}{a\beta^2} e^{-\sqrt{b}\beta} (1 + \beta\sqrt{b}). \quad (3.21)$$

Considerando agora a regra dos trapézios, a integral dada pela equação (3.18) pode ser aproximada por:

$$S = \frac{e^{-\sqrt{b}\beta} + e^{-\sqrt{a+b}\beta}}{2} + \frac{e^{-\sqrt{a+b}\beta} + e^{-\sqrt{2a+b}\beta}}{2} + \dots$$

$$S = \frac{e^{-\sqrt{b}\beta}}{2} + e^{-\sqrt{a+b}\beta} + e^{-\sqrt{2a+b}\beta} + \dots \quad (3.22)$$

ainda podemos reescrever a equação acima como:

$$S = \frac{e^{-\sqrt{b}\beta}}{2} - e^{-\sqrt{b}\beta} + e^{-\sqrt{b}\beta} + e^{-\sqrt{a+b}\beta} + \dots \quad (3.23)$$

Ou seja:

$$S = -\frac{e^{-\sqrt{b}\beta}}{2} + Z. \quad (3.24)$$

Podemos então dizer que, para altas temperaturas, o resultado da integral dada pela equação (3.21) é equivalente a soma dos trapézios em (3.24), ou seja:

$$-\frac{e^{-\sqrt{b}\beta}}{2} + Z \simeq \frac{2}{a\beta^2} e^{-\sqrt{b}\beta} (1 + \beta\sqrt{b}) \quad (3.25)$$

Assim, a função de partição do oscilador de Dirac no limite de altas temperaturas é dada pela expressão abaixo:

$$Z \simeq \frac{e^{-\sqrt{b}\beta}}{2} + \frac{2}{a\beta^2} e^{-\sqrt{b}\beta} (1 + \beta\sqrt{b}) \quad (3.26)$$

ou ainda:

$$Z \simeq e^{-\sqrt{b}\beta} \left(\frac{2(1 + \beta\sqrt{b})}{a\beta^2} + \frac{1}{2} \right) \quad (3.27)$$

Para altas temperaturas o termo $\frac{1}{2}e^{-\sqrt{b}\beta}$ da equação acima pode ser desprezado, assim nossa função de partição pode ser escrita simplesmente como:

$$Z = \frac{2(1 + \beta\sqrt{b})}{a\beta^2}. \quad (3.28)$$

Agora calculando a energia média temos:

$$\bar{U} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta}, \quad (3.29)$$

onde Z é dado na equação (3.28).

Após alguns cálculos algébricos e fazendo $\beta = \frac{1}{T}$ onde T é a temperatura, temos que a equação acima fica:

$$\bar{U} = \frac{2T + \sqrt{b}}{1 + \frac{\sqrt{b}}{T}}. \quad (3.30)$$

Para altos valores de T , a equação acima fica simplesmente como:

$$\bar{U} \simeq 2T. \quad (3.31)$$

Assim o calor específico do oscilador de Dirac para altas temperaturas será dado por:

$$c \simeq \frac{\partial \bar{U}}{\partial T} \simeq 2. \quad (3.32)$$

Como podemos observar o calor específico do oscilador de Dirac é o dobro do valor encontrado para o oscilador harmônico.

3.3 A Série $\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\sqrt{an+b}\beta}$

A série função de partição do oscilador de Dirac unidimensional é do tipo:

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\sqrt{an+b}\beta} \quad (3.33)$$

Iremos estudar a convergência desta série, usando os testes de convergência de séries infinitas dados no apêndice. Iniciemos nosso estudo pela série $\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\sqrt{n}\beta}$. Aplicando o teste da razão temos:

$$\begin{aligned} a_{n+1} &= e^{-\sqrt{n+1}\beta} \\ a_n &= e^{-\sqrt{n}\beta} \end{aligned} \quad (3.34)$$

assim calculando:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |a_{n+1}| / |a_n| = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{e^{-\sqrt{n+1}\beta}}{e^{-\sqrt{n}\beta}} = \lim_{n \rightarrow \infty} e^{-\frac{1}{\sqrt{n} + \sqrt{n+1}\beta}} = e^0 = 1 \quad (3.35)$$

logo não podemos afirmar nada sobre a série. Então aplicaremos o teste da integral. Basta verificar a existência da integral imprópria:

$$\int_0^{\infty} e^{-\sqrt{x}} dx \quad (3.36)$$

Fazendo uma mudança de variável

$$x = y^2, dx = 2ydy$$

a equação acima fica:

$$I = 2 \int_0^\infty e^{-y} y dy \quad (3.37)$$

Agora integrando por partes temos:

$$I = 2 \left(e^{-y} y \Big|_0^\infty - \int_0^\infty e^{-y} dy \right) = 2 \quad (3.38)$$

Logo a integral existe e a série é convergente. Agora usando o método da integral para a série $\sum_{n=0}^\infty e^{-\sqrt{an+b}\beta}$, verificamos que a integral resulta em:

$$I = \int_0^\infty e^{-\sqrt{an+b}\beta} dn \quad (3.39)$$

Fazendo uma mudança de variável temos:

$$an + b = y^2, adn = 2ydy$$

logo (3.39) fica:

$$\begin{aligned} I &= \frac{2}{a} \int_0^\infty e^{-y} y dy \\ I &= \frac{2}{ae^\beta} \end{aligned} \quad (3.40)$$

Dessa forma podemos concluir que a série acima é convergente.

3.4 Análise numérica da quantidades termodinâmicas do oscilador hamônico e do oscilador de Dirac

Como podemos observar, torna-se inviável calcularmos analiticamente a soma da equação (3.9), e mais complicado ainda derivá-la para encontrar o calor específico do oscilador de Dirac. Então iremos faremos uma análise numérica das quantidades termodinâmicas para podermos comparar os dois osciladores.

Inicialmente usamos as energias do oscilador harmônico e do oscilador de Dirac, obtivemos a energia média e calor específico de ambos. Fizemos com que a temperatura variasse de 0 a 400K, e usamos freqüências da ordem de $10^{13}s^{-1}$ e $10^{14}s^{-1}$. Assim obtivemos os resultados para energia média e para o calor específico. Em seguida obtivemos os gráficos da energia média e do calor específico para casos em que a freqüência é da ordem de 10^2s^{-1} . Nos resultados obtidos para valores de freqüência da ordem de $10^{13}s^{-1}$ e $10^{14}s^{-1}$ usamos os valores das constantes físicas \hbar, c, k, m dados no apêndice. Já nos demais resultados obtivemos usando os valores das constantes físicas como sendo $\hbar = c = k = m = 1$.

Como podemos observar na figura 3.1 as curvas para a energia média possuem as mesmas características, com os valores obtidos pelo oscilador de Dirac maiores que os de Schrödinger, com uma pequena diferença da ordem de $1/2\hbar\omega$.

Nas figuras 3.2 e 3.4 obtidas para o calor específico podemos notar que existem também uma equivalência nas curvas, mostrando que o oscilador de Dirac pode ser comparado com o oscilador harmônico na faixa de temperatura usada. Na figuras 3.3 e fig 3.4, novamente percebemos uma pequena diferença na energia e no caso do calor específico temos que as curvas são coincidentes.

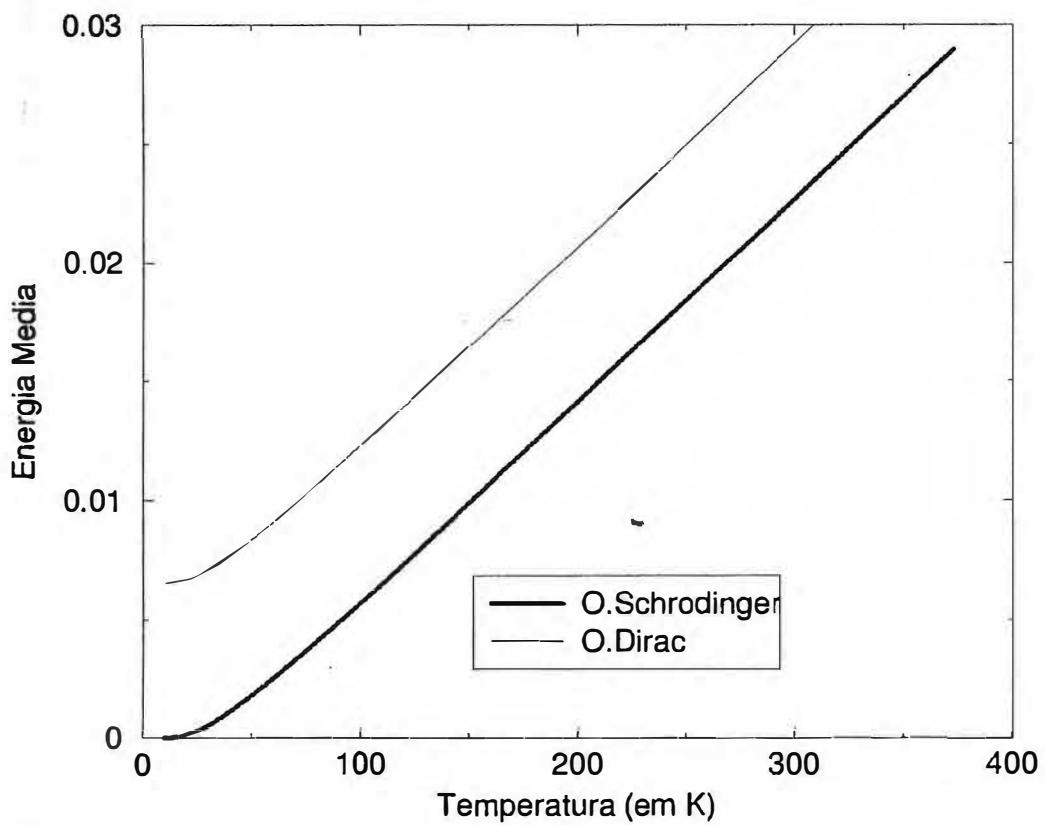


Figura 3-1: Energia média em função da temperatura para ω da ordem de 10^{13}s^{-1}

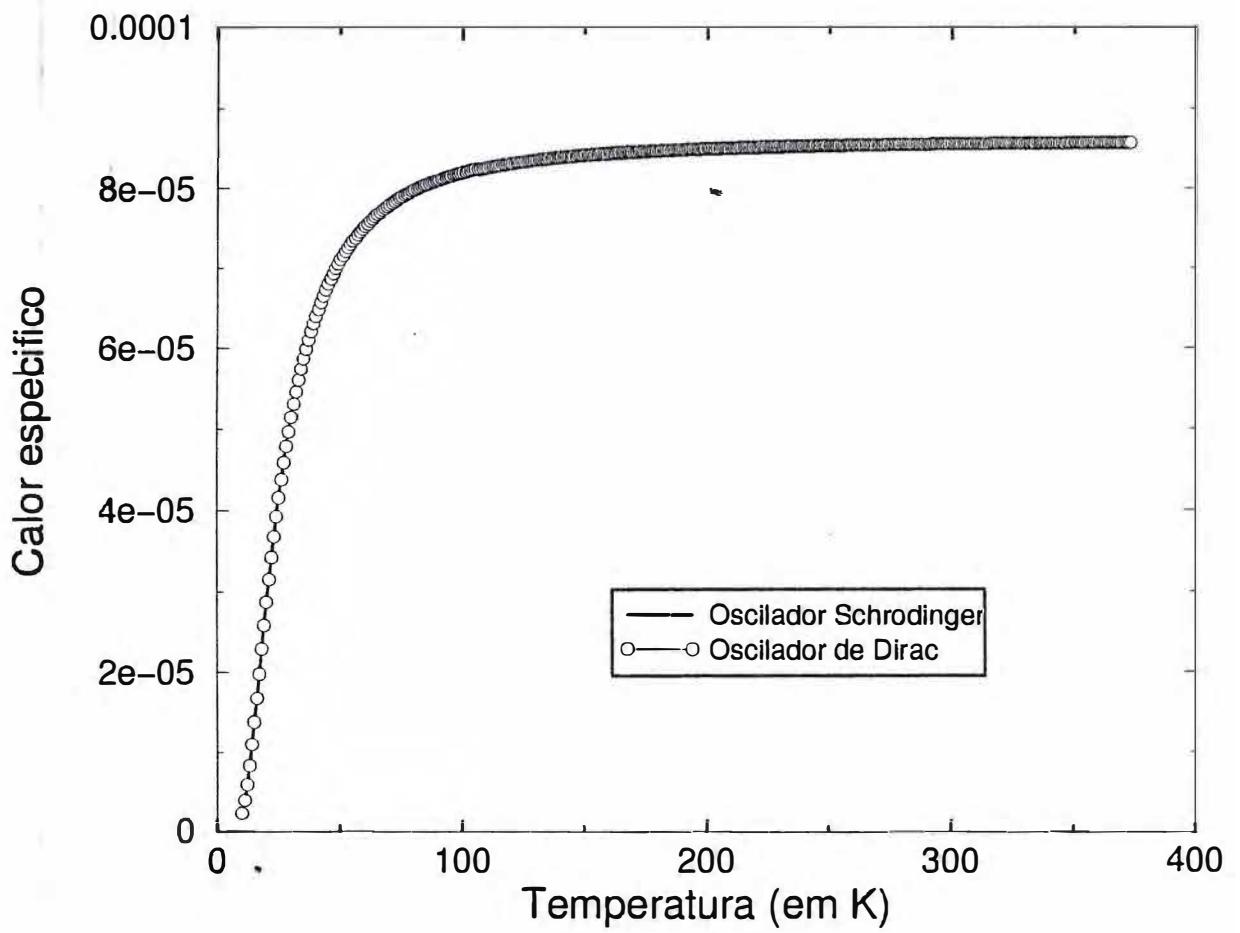


Figura 3-2: Calor específico em função da temperatura para ω da ordem de $10^{13} s^{-1}$

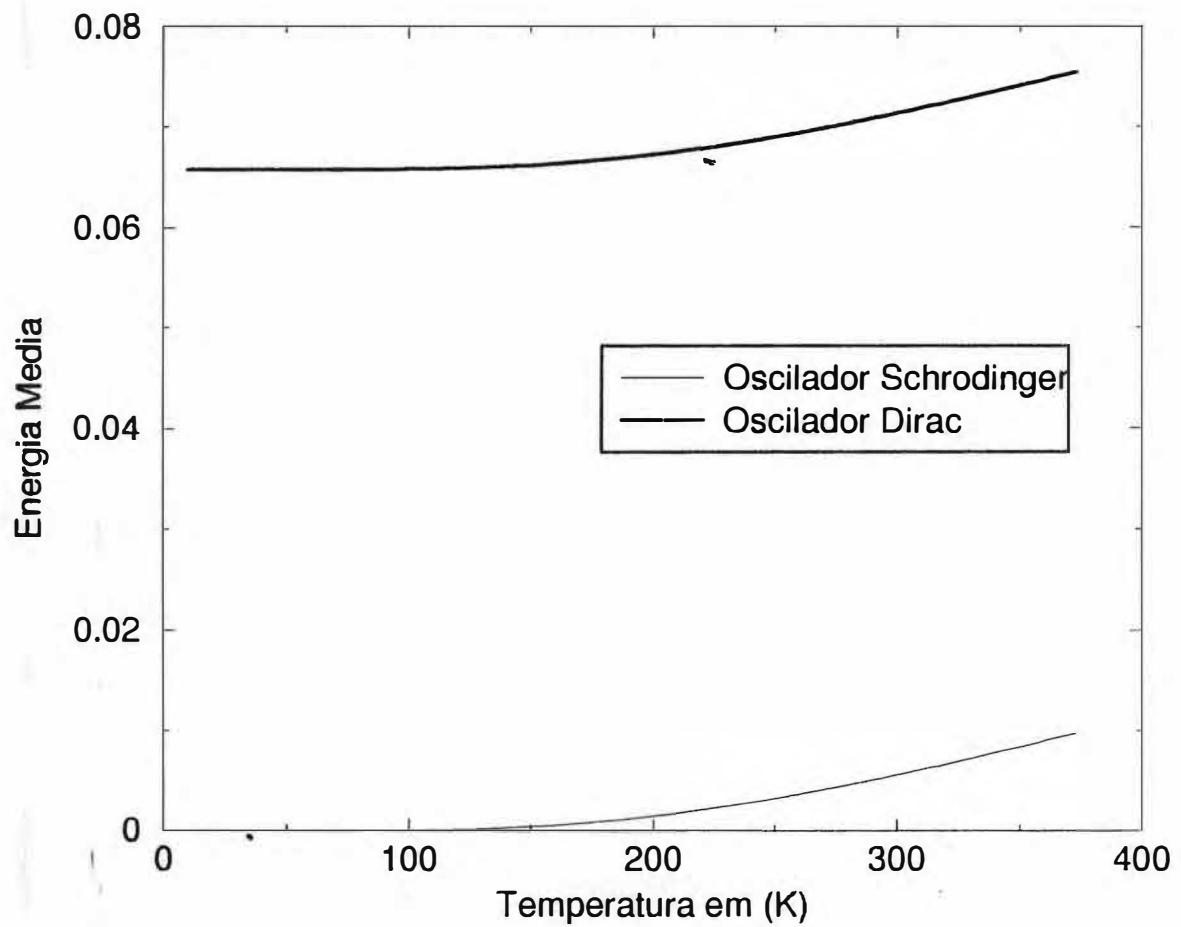


Figura 3-3: Energia média em função da temperatura para ω da ordem de $10^{14}s^{-1}$

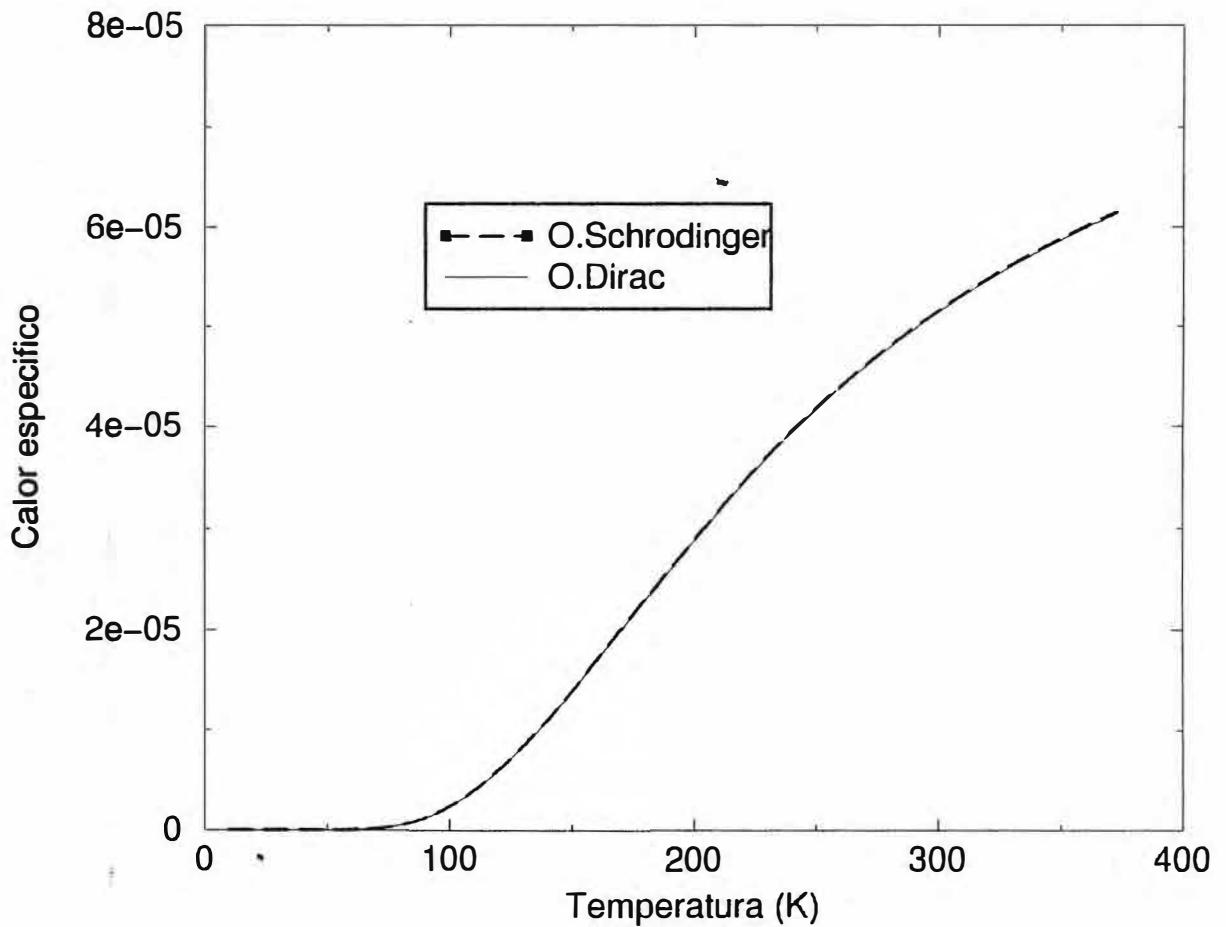


Figura 3-4: Calor específico em função da temperatura para ω da ordem de $10^{14}s^{-1}$

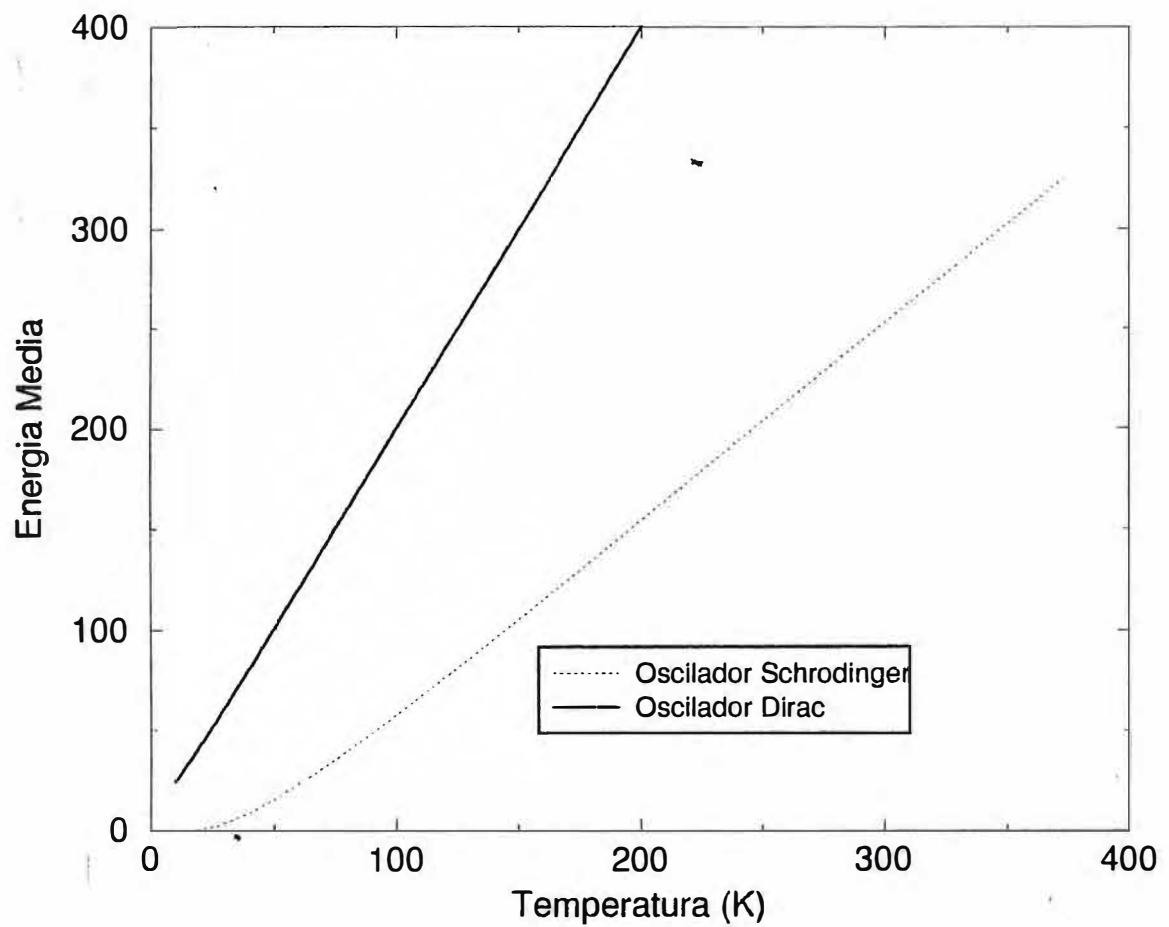


Figura 3-5: Energia média em função da temperatura para ω da ordem de $10^2 s^{-1}$

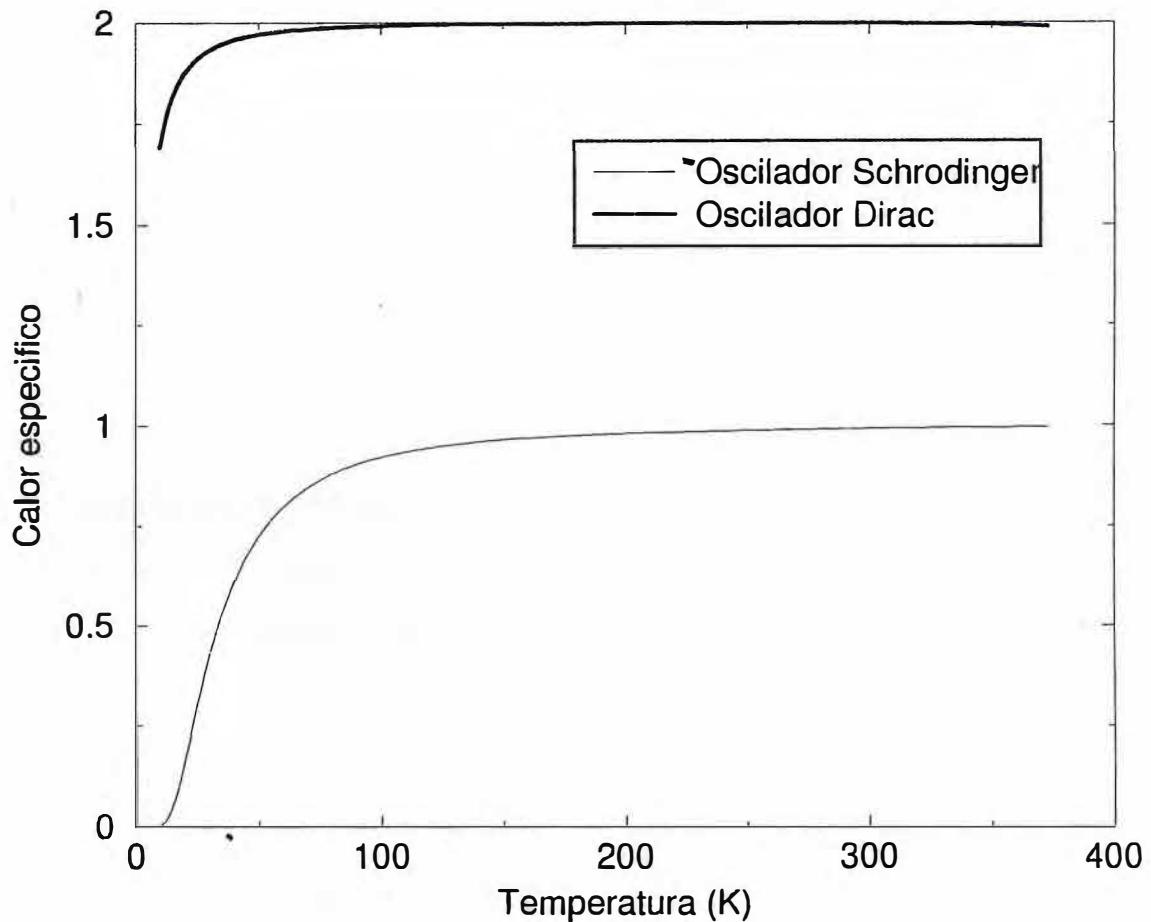


Figura 3-6: Calor específico em função da temperatura para ω da ordem de $10^2 s^{-1}$

Conclusão

Como vimos neste trabalho, o oscilador de Dirac pode ser utilizado como um exemplo moderno para ilustrar a equação de Dirac. Observamos que o oscilador de Dirac nos fornece uma solução exata com mais facilidade que o oscilador não-relativístico.

O oscilador de Dirac possui autofunções de energia idênticas as autofunções do oscilador harmônico, pelo fato de que o hamiltoniano do oscilador de Dirac é simplesmente o oscilador harmônico somado com termos constantes.

Quando obtivemos a energia média e calor específico do oscilador de Dirac unidimensional num banho térmico, concluímos que as quantidades termodinâmicas possuem o mesmo comportamento que o oscilador harmônico não-relativístico na faixa de temperatura compreendida entre 0 e 400K.

Analisando os osciladores no limite de altas temperaturas usando a chamada regra dos trapézios, facilmente vimos que a energia média do oscilador de Dirac é o dobro da energia média do oscilador harmônico, o mesmo acontecendo com o calor específico. Assim poderemos verificar efeitos relativísticos relevantes para altas temperaturas.

Como perspectivas futura poderemos estender nossos resultados para o caso tridimensional e fazer também uma extensão dos modelos não-relativísticos existentes na literatura, tais como o modelos de Einstein e Debye, para que possamos analisar os efeitos relativísticos nas estruturas cristalinas como também os efeitos do acoplamento spin-órbita.

Apêndice A

Teste de convergência de séries infinitas

Existem vários testes para estudar a convergência ou divergência de uma série. Algumas vezes ao se aplicar um teste para uma determinada série, este não é adequado, ou não nos leva à conclusão alguma e assim sendo teremos que utilizar um outro teste. Aqui vamos resumir os principais testes de convergência para séries infinitas.

A.1 O teste da razão

Seja $\sum_{n=1}^{+\infty} u_n$ uma série infinita dada para todo u_n não-nulo. Então:

- i) se $\lim_{n \rightarrow \infty} |u_{n+1}| / |u_n| = L < 1$, a série é absolutamente convergente;
- ii) se $\lim_{n \rightarrow \infty} |u_{n+1}| / |u_n| = L > 1$, ou se $\lim_{n \rightarrow \infty} |u_{n+1}| / |u_n| = +\infty$, a série dada é divergente.
- iii) se $\lim_{n \rightarrow \infty} |u_{n+1}| / |u_n| = 1$, nenhuma conclusão quanto à convergência pode ser tirada do teste, devendo assim utilizar-se outro teste.

A.2 O teste da integral

Seja f uma função contínua, decrescente e com valores positivos para todo $x \geq 1$. Então, a série infinita:

$$\sum_{n=1}^{\infty} f(n) = f(1) + f(2) + f(3) + \cdots + f(n) + \cdots$$

será convergente se a integral imprópria

$$\int_1^{+\infty} f(x) dx$$

existir, e será divergente se

$$\lim_{b \rightarrow \infty} \int_1^b f(x) dx = +\infty$$

A.3 O teste da comparação

Seja $\sum_{n=1}^{+\infty} u_n$ uma série de termos positivos.

- i) se $\sum_{n=1}^{+\infty} v_n$ for uma série convergente de termos positivos já conhecida e $u_n \leq v_n$ para todo n inteiro positivo, então $\sum_{n=1}^{+\infty} u_n$ será convergente.
- ii) se $\sum_{n=1}^{+\infty} w_n$ for uma série divergente de termos positivos já conhecida e $u_n \geq w_n$ para todo n inteiro positivo, então $\sum_{n=1}^{+\infty} u_n$ será divergente.

Existem outros testes que podem ser utilizados como citados em [25].

Apêndice B

Relações e constantes físicas úteis

B.1 Quantidades termodinâmicas

Função de Partição:

$$Q = \sum e^{-\frac{E_n}{kT}} \quad (\text{B.1})$$

onde E_n é a energia do sistema.

Energia média:

$$U = \frac{1}{Q} \sum_n E_n e^{-\frac{E_n}{kT}} \quad (\text{B.2})$$

onde Q é dado por B.1.

Calor específico:

$$c = \frac{\partial U}{\partial T} \quad (\text{B.3})$$

B.2 Constantes físicas

Constante de Plank:

$$\hbar = 1,054573 \cdot 10^{-34} J \cdot s$$

$$\hbar = 6,582122 \cdot 10^{-16} eV \cdot s$$

Constante de Boltzmann:

$$k = 8,617385 \cdot 10^{-5} eV/K$$

$$k = 1,3181 \cdot 10^{-23} J/K$$

Outros valores:

$$m_0 c^2 = 5,11 \cdot 10^5 eV$$

$$1eV = 1,6 \cdot 10^{-19} J$$

B.3 Relações da métrica e derivadas

Derivada covariante:

$$\begin{aligned}\partial^\mu &\equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu} \\ \partial^\mu &= \left(\frac{\partial}{\partial t}, -\nabla \right)\end{aligned}$$

Derivada contravariante:

$$\begin{aligned}\partial_\mu &\equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu} \\ \partial_\mu &= \left(\frac{\partial}{\partial t}, \nabla \right)\end{aligned}$$

B.4 Matrizes de Dirac

$$\gamma^0 = \begin{bmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{bmatrix} \text{ e } \gamma^i = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{bmatrix},$$

As matrizes de Dirac satisfazem a relação:

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu} \quad (\text{B.4})$$

B.5 Matrizes de Pauli

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Bibliografia

- [1] M. Moshinsky and A. Szczepaniak, *J.Phys.A* 22(1989) L817-L819;
- [2] R. P. Martínez-y-Romero, H. N. Núñez-Yépez and A. L. Salas-Brito, *Eur. J. Phys.* 16 (1995) 135-141;
- [3] V. M. Villalba and Alí A. R. Maggiolo, *Eur. Phys. J. B* 22, 31 (2001);
- [4] F. M. Toyama and Y. Nogami, *Phys. Rev. A* 59, 1056 (1999);
- [5] P. Rozmej and R. Arvieu, *J. Phys. A* 32 (1999) 5367-5382;
- [6] O. L. de Lange, *J. Phys. A* 24 (1991) 667-677;
- [7] C. Quesne, *Int.J.Mod.Phys A* 6 (1991) 1567-1589;
- [8] M. Moshinsky, C. Quesne and Yu.F.Smirnov, *J.Phys. A* 28 (1995) 6447-6458;
- [9] A. Bhargava and L. K. Sharma, *Indian J. Pure Appl. Phys.* 22 (1984) 627-635;
- [10] O. Castanos, A. Frank, R. Lopez and L. F. Urrutia, *Phys. Rev. D.* 43 (1991) 544-547;
- [11] N. V. V J. Swamy, *Phys. Rev* 180 (1969) 1225-1226;
- [12] J. Bijtebier, *Nuovo Cim. A* 88 (1985) 53-73;
- [13] Ion. I. Cotaescu, *Mod. Phys. Lett. A* 13 (1998) 2923-2936;
- [14] Francisco Domínguez-Adame, *Physics Letters A* 162 (1992) 18-20;

- [15] A. Calogeracos and N. Dombey, *Contemporary Physics* 40 (1999) 313-321;
- [16] J. Benítez, R. P. Martínez-y-Romero, H. N. Núñez-Yépez and A. L. Salas-Brito, *Phys. Rev. Lett.* 64 (1990) 1643;
- [17] Matías Moreno and Arturo Zentella, *J. Phys. A* 22 (1989) L821-L825;
- [18] H. Blas, B. M. Pimentel and J. L. Tomazelli, *Phys. Rev. E* 60 (1999) 6164;
- [19] A. G. Aronov and G. E. Pikus, *J. Exper. Theor. Phys.* 24, 339 (1967);
- [20] P. A. Wolf, *J. Phys. Chem. Solids* 25, 1057 (1964);
- [21] L. V. Keldysh, *Zh. Eksp. Teor. Fis.* 45, 364 (1963);
- [22] R. R. Landim, M. H. G. Pacheco, C. A. S. Almeida, *J. Phys. Av.* 33, n.50, p. L509(2000);
- [23] A. A. Avetisyan, A. P. Djotyan, E. M. Kazaryan, and H. A. Sarkisyan, *Phys. Stat. Sol. (b)* 214 (1999) 91;
- [24] F. Domínguez-Adame and M. A. González, *Europhys. Lett.* 13(3)(1990) 193-198;
- [25] G. B. Arfken and H. J. Weber, “Mathematical Methods for Physicists” *Academic Press, New York, 1995*;
- [26] W. Greiner, “Relativistic Quantum Mechanics” *Springer-Verlag, Germany, 1997*;
- [27] L. H. Ryder, “Quantum Field Theory” *Cambridge University Press, Second Edition 2000*;
- [28] C. Itzykson and Jean-Bernard Zuber, “Quantum Field Theory” *McGraw-hill Book co, USA, international edition 1985*;