



Instituto de Física Teórica
Universidade Estadual Paulista

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

TEMPOS DE TUNELAMENTO

Carlos Alberto Bonin

Orientador

Prof. Dr. Bruto Max Pimentel Escobar

Co-orientador

Prof. Dr. José Tadeu Teles Lunardi

Fevereiro de 2007

Agradecimentos

- A Deus, por ser quem é;
- À minha família, por estar sempre comigo;
- Ao meu orientador Prof. Dr. Bruto Max Pimentel Escobar, por ter me orientado e apoiado nesses dois anos;
- Ao meu co-orientador Prof. Dr. José Tadeu Teles Lunardi, por toda a ajuda ao longo de tantos anos;
- Ao Prof. Dr. Luiz Alberto *Gargamel* Manzoni Vieira Jr.; por ter me incentivado tantas vezes;
- À agência financiadora CAPES, pelos dois anos de bolsa;
- Ao grande Ms. Anderson Cunha *Acrael* Rael; por ser meu primeiro amigo aqui no IFT: “vá em paz!”;
- A todos os malacos, por me deixarem morar de graça na Maláquia quando eu não tinha bolsa e por tantos momentos lá vividos;
- A todos os meus professores;
- Ao Prof. Dr. Diógenes Galetti, por estar sempre disposto a discutir e a conversar;
- Ao Prof. Dr. Antonio Marcos Batista, por deixar sempre o Departamento de Matemática e Estatística da Universidade Estadual de Ponta Grossa de portas abertas e por ter me auxiliado nos meus primeiros dias aqui em São Paulo;
- Ao Departamento de Matemática e Estatística da Universidade Estadual de Ponta Grossa por estar sempre de portas abertas;
- Ao NIC e aos seus três fundadores, eu, o grande amigo Xiréque e o bom e velhor João (*in memoriam*), “e aí, carinha?”;
- Aos amigos Marcelo *de Azevedo Madias* Dias e Bruno *Brunão Obelix* Bernardes, pelas reuniões sobre “a” interpretação da Mecânica Quântica;

- A todos os amigos e companheiros do IFT;
- A todas as secretárias deste Instituto, por não deixarem a burocracia travar o IFT, “Vogons nunca mais!”;
- Ao Laércio Benedito de Sousa Júnior, por todo o seu conhecimento em LATEX compartilhado;
- Às meninas Viviane e Adriana, por terem feito parte da minha vida;
- Aos idealizadores do IFT (*in memoriam*);
- Ao gênio Douglas Adams (*in memoriam*), por sua inspiradora obra de ficção científica e comédia que é a série de “The Hitchhiker’s Guide to the Galaxy”;
- Aos criadores da série “24 Horas” e a Kiefer Sutherland, que tão bem interpreta “Jack Bauer”;
- A você, caro leitor, por estar prestando atenção às minhas palavras;
- A todos os demais que eu esqueci de agradecer, perdão.

Resumo

Nesta dissertação apresentaremos uma revisão sobre as definições de tempos de tunelamento no contexto da Mecânica Quântica não-relativística mais discutidas na literatura; proporemos uma generalização relativística para uma delas e compararemos nossos resultados com aqueles já conhecidos.

Palavras Chaves: Mecânica Quântica; Tunelamento; Tempos de Tunelamento; Tunelamento Relativístico.

Área do conhecimento: Mecânica Quântica.

Abstract

In this dissertation we show a review about the most discussed definitions of quantum tunnelling times in the context of Nonrelativistic Quantum Mechanics, we propose a relativistic generalization for one of them and compare our results with those well-known ones.

Time is an ilusion. Lunchtime, doubly so.

Ford Perfect¹

¹(Ix) - personagem de Douglas Adams na obra *The Ultimate Hitchhicker's Guide*.

Sumário

1	Introdução	1
2	O tempo na Mecânica Quântica	6
2.1	O tempo na Mecânica Clássica	6
2.2	Como “fazemos” Mecânica Quântica?	8
2.3	O argumento de Pauli	10
2.3.1	Exemplos de operadores conjugados ao Hamiltoniano	11
2.4	O que é o tempo na Mecânica Quântica?	13
3	Tempos de tunelamento: fundamentos e resultados não-relativísticos	16
3.1	Ondas e velocidades	16
3.1.1	As equações de Maxwell	19
3.1.2	Equação de ondas eletromagnéticas	20
3.1.3	Ondas planas homogêneas	22
3.1.4	Sinais	25
3.2	Definições de tempos de tunelamento	27
3.2.1	O tempo de permanência estacionário	27
3.2.2	O tempo de atraso e os tempos de fase	33
3.2.3	O tempo de Büttiker e Landauer	37
3.2.4	O tempo de Larmor	38
3.3	Resultados não-relativísticos	42
3.3.1	Relação entre os tempos de permanência e de fase	42
3.3.2	Barreira de potencial retangular	48
3.3.3	O efeito Hartman	70
4	Tempos de tunelamento em teorias relativísticas	76
4.1	O tempo de fase para o campo escalar	76
4.1.1	O tunelamento com o campo de Klein-Gordon	78
4.1.2	O efeito Hartman relativístico	81

4.1.3	Comparação entre os tempos de tunelamento relativístico e não-relativístico	83
4.1.4	O tunelamento superluminal e a causalidade	87
4.1.5	O tempo de permanência via equação de Klein-Gordon	91
4.2	Tempos de tunelamento para férmions	92
4.2.1	Probabilidade	93
4.2.2	Relação entre os tempos de tunelamento	95
4.2.3	Comparação entre o tempo de fase via equações de Klein-Gordon e de Dirac	97
5	Conclusões	106
A	Lema de Jordan	110
B	Método da fase estacionária	112
C	A barreira retangular	114
D	Barreira dependente do tempo	119
E	Relação entre tempos tunelamento para bosons	125
E.1	Introduction	126
E.2	DKP theory	128
E.3	Relation between τ_d and $\bar{\tau}_p$ for bosons	130
E.4	Conclusion	133

Capítulo 1

Introdução

Segundo as leis da física clássica, se uma partícula possui uma energia inferior à altura de uma barreira de potencial, ela não pode atravessá-la. A razão para isso é que a energia total dessa partícula é a soma de sua energia cinética com a energia potencial. Para sistemas conservativos, a energia total é uma constante do movimento. Isso significa, por exemplo, que se a partícula passar de uma região de potencial menos intenso para uma outra de potencial mais intenso, sua energia cinética diminuirá. A partícula pode continuar passando para regiões de energias potenciais cada vez mais intensas, até que a sua energia cinética se anule. No ponto em que isso ocorre, toda a energia da partícula é potencial e ela não pode ir além. Esse ponto é, por essa razão, chamado de *ponto de retorno*.¹

A teoria quântica, contudo, prevê um resultado diferente.

Segundo a Mecânica Quântica, existe uma probabilidade diferente de zero de um sistema atravessar uma barreira de potencial de altura finita, mesmo que esta altura seja superior à energia do sistema. Esse fenômeno é chamado de *tunelamento* e, por estar em desacordo com as expectativas da Mecânica Clássica, é um fenômeno não-clássico, isto é, de origem puramente quântica.

Os primeiros estudos sobre tunelamento foram feitos na década de vinte, quase simultaneamente com o surgimento da própria Mecânica Quântica. Na época, Gamow tentava entender a radioatividade α . Sua primeira tentativa, baseada na física clássica, falhou. Algum tempo depois, ele combinou as forças atrativas do interior do núcleo com o potencial coulombiano repulsivo, obtendo uma barreira de potencial efetiva para a partícula α . Resolvendo a

¹Pode ocorrer que existam vários pontos de retorno num problema, ou mesmo infinitos. A situação simplificada aqui apresentada é meramente ilustrativa. Para maiores informações, consultar [1].

equação de Schrödinger para esse potencial, Gamow encontrou soluções para energias complexas e interpretou a parte imaginária dessas energias como a constante de decaimento da desintegração $\Gamma/2$. Com isso, ele obteve uma relação entre $\Gamma/2$ e a energia da partícula α . O ano era 1928. Born, ao conhecer o trabalho de Gamow, reconheceu sua importância mas, sendo um dos fundadores da Mecânica Quântica, criticou o uso de um Hamiltoniano não-hermiteano. Depois de algum tempo de trabalho, Born reproduziu os resultados de Gamow utilizando um hamiltoniano hermiteano.²

No mesmo ano de 1928, Gurney, que fôra aluno de Rutherford em trabalhos experimentais sobre radioatividade, entrou em contato com dois artigos que tratavam da “fuga” de partículas através de barreiras de potencial.³ Gurney pensou, então, em aplicar essa idéia ao problema da emissão espontânea da partícula α por núcleos radioativos e trabalhou nisso em colaboração com Condon, simultânea e independentemente a Gamow. Vale a pena ressaltar que, naquela época, a interpretação do quadrado do módulo da função de onda como densidade de probabilidade de se encontrar a partícula era uma idéia nova e praticamente nada se sabia a respeito da estrutura nuclear. Dessa forma, os trabalhos de Gurney e Condon, bem como os de Gamow, tornaram-se uma sensacional aplicação da Mecânica Quântica ao interior do núcleo atômico. Condon, 50 anos depois, diria: “Lembre-se que o nêutron não foi descoberto até quatro anos depois, então os núcleos eram feitos de prótons e elétrons naquela época!”⁴

Desde esses primeiros trabalhos até os dias de hoje, as aplicações do tunelamento têm sido inúmeras. Podemos citar como exemplos o transporte de cargas elétricas em heteroestruturas [6], o transistor, os dispositivos semicondutores, o efeito Josephson [2] e o microscópio de tunelamento.

Em 1931, o próprio Condon, num artigo sobre a Mecânica Quântica dos processos de colisão com um apêndice de Morse, percebeu que seria interessante estudar problemas de tunelamento com estados não-estacionários [7]. Esta sugestão foi seguida por MacColl que publicou, no ano seguinte, um trabalho no qual ele analisava quanto tempo um pacote de ondas leva para atravessar uma barreira de potencial retangular [8]. MacColl estudou os casos nos quais o pacote incidente é uma superposição de estados com energias inferiores à altura do potencial e concluiu que o pacote transmitido aparece na extremidade final da barreira aproximadamente no mesmo instante que o

²Esta pequena revisão encontra-se em [2], onde as referências dos trabalhos de Gamow e Born também podem ser encontradas.

³Esses artigos são de Oppenheimer e Fowler [3] e Nordheim [4], segundo [5].

⁴Um resumo histórico escrito pelo próprio Condon encontra-se em [5], de onde essa citação foi retirada.

pacote incidente atinge o início da barreira, ou seja, não há atraso apreciável. Começava, assim, o estudo do *tempo de tunelamento*.

O que entendemos por tempo de tunelamento? Uma vez que o sistema quântico atravessa a região de potencial proibida pela física clássica, estamos interessados em saber quanto tempo esse sistema leva para fazer isso. Conforme Muga, Mayato e Egusquiza mencionaram, o problema conceitual não envolve o tunelamento, pois surge até mesmo no movimento livre. A verdadeira questão a ser respondida é *quanto tempo uma partícula demora para atravessar uma região espacial?* No entanto, como esses mesmos autores notaram, o tunelamento engloba alguns dos mais desafiadores aspectos das possíveis respostas [9].

A razão fundamental para a existência de aspectos tão intrigantes no estudo do tempo de tunelamento encontra-se no fato de que o tempo não é um observável na Mecânica Quântica, conforme apontado por Pauli [10]. Devido a isso, existem muitas definições de tempo de tunelamento que são, em sua maioria, não equivalentes entre si. Alguns dos muitos artigos de revisão sobre tempos de tunelamento são [11] - [15]. Podemos citar, como um exemplo de uma característica interessante do processo de tunelamento, a independência do tempo de tunelamento com a extensão da região classicamente proibida quando a barreira é opaca. Este efeito foi descoberto por Hartman e hoje leva seu nome [16], [17].

A importância do estudo de tempos de tunelamento reside numa possível melhor compreensão dos fundamentos da própria teoria quântica. Sendo o tempo uma quantidade física e uma vez que é possível medi-lo classicamente, por que ele não é um observável na Mecânica Quântica? Além disso, esse estudo recebe uma tarefa ainda mais desafiadora: não sendo o tempo um observável, como defini-lo consistentemente na teoria e medi-lo? Muito se tem avançado tanto teórica quanto experimentalmente, como podemos ver nos artigos de revisão já citados, especialmente [15], que discute diversos experimentos.

Contudo, esse estudo não possui apenas interesses acadêmicos. Como vimos, o tunelamento é utilizado em diversos dispositivos eletrônicos, como os transistores e semicondutores. Assim, o estudo do tempo que os elétrons levam para tunelar, por exemplo, as barreiras de um heteroestrutura metal-isolante-metal-isolante ou uma junção P-N, pode fornecer informação a respeito do tempo que a corrente elétrica leva para atravessar essas barreiras. Dessa forma, podemos saber em quanto tempo o sinal elétrico atravessará o dispositivo, ou seja, conhecemos a velocidade com a qual a informação é transmitida pelo aparelho em questão. Além disso, como podemos ver em [14] e [15], quando consideramos a propagação de ondas eletromagnéticas em guias de onda em regiões espaciais nas quais as frequências das ondas

são inferiores à frequência de corte do guia, temos um efeito análogo ao tunelamento quântico na teoria eletromagnética clássica. Um outro efeito semelhante surge, também, no problema da reflexão interna total frustrada, como podemos ver em [14]. Como sabemos, a transmissão de sinais via fibras óticas é baseada na reflexão interna total, apresenta muitas similaridades com a propagação em guias de onda [18] e vem sendo cada vez mais utilizada nas telecomunicações. Por conseguinte, o estudo do tempo de tunelamento pode, também, fornecer informações a respeito da velocidade de transmissão de informação através de fibras óticas.

O objetivo do presente trabalho é realizar uma revisão sobre as definições de tempo de tunelamento mais discutidas na literatura e propor uma generalização relativística para uma delas. Para tal fim, organizamos esta dissertação da seguinte forma:

No segundo capítulo discutiremos o papel do tempo na Mecânica Quântica. Veremos, primeiramente, como o tempo é entendido na Mecânica Clássica e faremos uma breve revisão sobre a associação de quantidades físicas a operadores auto-adjuntos que atuam no espaço de Hilbert no contexto da Mecânica Quântica. Apresentaremos, então, o argumento de Pauli sobre a inexistência do observável tempo na Mecânica Quântica. Finalizaremos o capítulo com uma discussão sobre o que entendemos por tempo no contexto da teoria quântica.

Iniciaremos o capítulo três discutindo possibilidades de se associar velocidades a ondas, tomando como exemplo a propagação de ondas eletromagnéticas. Discutiremos, também, a questão da causalidade frente a efeitos superluminais na teoria eletromagnética. Depois disso, apresentaremos as definições dos tempos de tunelamento que serão estudados nesta dissertação. Em seguida, encontraremos uma relação entre o tempo de fase e o tempo de permanência e calcularemos explicitamente todos os tempos de tunelamento definidos nesta dissertação para o caso de uma barreira retangular. Tomando o limite dos resultados para uma barreira retangular opaca, demonstraremos o efeito Hartman. Com o auxílio desse efeito, mostraremos que, para uma barreira suficientemente extensa, o tunelamento superluminal pode ocorrer. Argumentaremos, ainda, que a Mecânica Quântica não-relativística não pode resolver os problemas relacionados às velocidades superluminais e à causalidade relativística.

O capítulo quatro é dedicado às generalizações relativísticas de algumas definições de tempos de tunelamento. Proporemos o tempo de fase para o campo escalar complexo e mostraremos que não apenas o efeito Hartman ocorre em teorias relativísticas, mas que essa ocorrência não depende das relações de dispersão. Compararemos, ainda, os resultados obtidos através da equação de Klein-Gordon com os não-relativísticos para o tempo de fase.

Estudaremos, em seguida, o problema do tunelamento superluminal e a causalidade utilizando o campo escalar. A partir daí, discutiremos a questão da definição do tempo de permanência com auxílio das equações de Klein-Gordon e de Dirac, mostrando que é possível generalizar a relação entre o tempo de permanência e o tempo de fase obtida via equação de Schrödinger. Utilizando essa relação, calcularemos o tempo fase através da equação de Dirac e compararemos com o nosso resultado obtido com o campo escalar.

O capítulo cindo será destinado à apresentação de nossas conclusões e considerações finais.

Ademais, ao estudarmos as teorias relativísticas, utilizamos a assinatura $(+ - - -)$.

Capítulo 2

O tempo na Mecânica Quântica

Neste capítulo faremos uma breve revisão, muito mais conceitual do que formal, sobre o tempo na Mecânica Quântica não-relativística. Iniciamos analisando o papel do tempo na Mecânica Clássica não-relativística. Na segunda seção, veremos as diferenças nos formalismos das teorias clássica e quântica. Na seção seguinte apresentaremos uma “demonstração” feita por Pauli sobre a impossibilidade de um observável associado ao tempo na Mecânica Quântica e também dois exemplos de operadores usualmente associados ao tempo. Na última seção, discutiremos algumas questões fundamentais a respeito de papel do tempo na teoria quântica, o que significa medir o tempo na Mecânica Quântica e a razão pela qual existem diversas definições de tempo no contexto dessa teoria.

2.1 O tempo na Mecânica Clássica

No contexto da Mecânica Clássica, o estado de um sistema é completamente especificado por um ponto do espaço de fase. Isto significa que conhecendo-se as posições e os momentos lineares de todas as partículas envolvidas no problema, podemos obter toda a informação a respeito do sistema estudado.¹

Consideremos a formulação hamiltoniana da mecânica e um sistema formado por N partículas. Temos, assim, $3N$ pares de variáveis dinâmicas canonicamente conjugadas, q_{mj} e p_{mj} , com $m = 1, 2, 3, \dots, N$ e $j = 1, 2, 3$. O conjunto de todos os valores que essas variáveis dinâmicas podem assumir forma um espaço de fase $6N$ -dimensional. Além disso, q_{mj} e p_{mj} satisfazem ao seguinte conjunto de equações:

¹Assumimos, nesta seção, que o leitor esteja familiarizado com a Mecânica Clássica, em particular, com transformações canônicas e os colchetes de Poisson [1].

$$[q_{mj}, q_{nk}]_P = 0; \quad (2.1)$$

$$[p_{mj}, p_{nk}]_P = 0; \quad (2.2)$$

$$[q_{mj}, p_{nk}]_P = \delta_{mn} \delta_{jk}. \quad (2.3)$$

Nestas expressões, $[\ , \]_P$ denota os colchetes de Poisson [1].

A Hamiltoniana $H = H(q_{mj}, p_{mj})$ é o gerador da evolução temporal do sistema. Toda função dinâmica $f = f(q_{mj}, p_{mj})$ satisfaz à seguinte equação de movimento²

$$\frac{df}{dt} = [f, H]_P. \quad (2.4)$$

Em particular, para as variáveis q_{mj} e p_{mj} , temos:

$$\frac{dq_{mj}}{dt} = [q_{mj}, H]_P; \quad (2.5)$$

$$\frac{dp_{mj}}{dt} = [p_{mj}, H]_P. \quad (2.6)$$

Visto que (2.5) e (2.6) formam um conjunto de equações diferenciais ordinárias de primeira ordem acopladas, precisamos conhecer q_{mj} e p_{mj} em algum instante inicial para resolvê-las. Mas, q_{mj} e p_{mj} formam um ponto no espaço de fase. Assim, conhecendo-se o estado do sistema em, digamos, $t = 0$ e o Hamiltoniano H , podemos calcular q_{mj} e p_{mj} , isto é, o estado, em qualquer instante de tempo. Dessa forma, calculamos qualquer função dinâmica em todo o instante de tempo t .

Mas qual o papel do tempo nessa análise, afinal?

Da discussão acima, vemos que o tempo na Mecânica Clássica é considerado um parâmetro das equações de movimento.

Consideremos, por simplicidade, que nosso sistema seja composto por apenas uma partícula e seu movimento seja unidimensional. Nessa situação, a relação (2.3) se escreve simplesmente como

$$[q, p]_P = 1. \quad (2.7)$$

Uma vez que a expressão acima é covariante sob transformações canônicas, podemos escrever, para um outro par de variáveis canônicas conjugadas:

$$[q', p']_P = 1. \quad (2.8)$$

²Assumimos que a Hamiltoniana não depende explicitamente do tempo.

Escolheremos, agora, p' como sendo a energia E da partícula. Dessa forma, $q' \equiv T$ é a variável conjugada à energia. Essa variável é chamada de *tempus*. Com isso, a equação acima se torna

$$[T, E]_P = 1. \quad (2.9)$$

Apesar da variável *tempus* possuir dimensão de tempo, ela não deve ser confundida com o parâmetro t de evolução temporal, pois ela é uma função da coordenada original, da energia e do próprio parâmetro tempo, isto é, $T = T(q, E, t)$. Somente quando o sistema é conservativo T coincide com t [19], [20].

Concluimos observando que em Mecânica Clássica o tempo é um parâmetro, mas pode ser também considerado como a variável canonicamente conjugada à Hamiltoniana.

2.2 Como “fazemos” Mecânica Quântica?

Na Mecânica Quântica, o estado de um sistema físico estudado Q é especificado por um vetor do espaço de Hilbert, denotado nesta seção por $|\psi\rangle$. A uma quantidade física f qualquer referente ao sistema Q é associado um operador F no mesmo espaço Hilbert.³ Esse operador é um *observável* e possui a propriedade de ser auto-adjunto, isto é,

$$F^\dagger = F, \quad (2.10)$$

sendo o operador $F^\dagger$ o adjunto de F [21].

Sejam os autovetores de F denotados por $|f_n\rangle$, sendo f_n o autovalor associado, isto é⁴

$$F|f_n\rangle = f_n|f_n\rangle. \quad (2.11)$$

Podemos escrever a resolução da identidade nessa base como

$$1 = \sum_n |f_n\rangle\langle f_n|. \quad (2.12)$$

Nesta expressão, o *bra* $\langle f_n|$ é o correspondente dual ao *ket* $|f_n\rangle$.

³Lembramos que se f é uma quantidade física associada ao sistema estudado, ela deve ser experimentalmente acessível.

⁴Por simplicidade, assumimos que F tenha espectro discreto e seja não-degenerado, mas a presente análise pode ser generalizada para englobar os casos aqui excluídos.

O resultado de uma medição da quantidade física f sobre o sistema Q que se encontra no estado $|\psi\rangle$, que assumimos normalizado, é descrito formalmente pela atuação do observável F sobre esse vetor. Assim, medindo f , obtemos:

$$F|\psi\rangle = F \sum_n |f_n\rangle \langle f_n|\psi\rangle = \sum_n F|f_n\rangle \langle f_n|\psi\rangle = \sum_n f_n |f_n\rangle \langle f_n|\psi\rangle. \quad (2.13)$$

Nesta expressão, utilizamos as equações (2.11) e (2.12). A quantidade $\langle f_n|\psi\rangle$ é o produto escalar do estado do sistema com o autoestado de F correspondente ao autovalor f_n .

De acordo com a interpretação de Copenhagen, a expressão (2.13) nos mostra que a medição da quantidade física f no sistema Q que se encontra no estado $|\psi\rangle$ fornece um dos possíveis resultados f_n , com uma probabilidade associada dada pelo quadrado do módulo do coeficiente que multiplica esse autovalor naquela equação [22]. Assim, a probabilidade de se obter, digamos, o resultado f_k numa tal medição é dada por $|\langle f_k|\psi\rangle|^2$. Além disso, essa probabilidade deve *independe da técnica experimental utilizada*.

A interpretação de Copenhagen também afirma que imediatamente após a medição, se o resultado f_k foi obtido, o estado do sistema é dado por $|f_k\rangle$. Isso é conhecido como *colapso da função de onda*.

Contudo, podemos nos perguntar: qual operador associamos a uma dada quantidade física?

Como afirmamos no início desta seção, o operador associado à quantidade física f deve ser um observável, isto é, um operador auto-adjunto. Além disso, os colchetes de Poisson da Mecânica Clássica apresentados na seção anterior devem ser substituídos por $[\cdot, \cdot]/(i\hbar)$, sendo $[\cdot, \cdot]$ o comutador e $\hbar$ a constante de Planck h dividida por 2π , no processo de quantização.⁵ Assim, as relações clássicas (2.1-2.3) são substituídas por

$$[q_{mj}, q_{nk}] = 0; \quad (2.14)$$

$$[p_{mj}, p_{nk}] = 0; \quad (2.15)$$

$$[q_{mj}, p_{nk}] = i\hbar \delta_{mn} \delta_{jk}, \quad (2.16)$$

ao se quantizar um sistema de N partículas. Nas relações (2.1-2.3), q_{mj} e p_{mj} são as variáveis dinâmicas posição e momento na direção j da n -ésima partícula, isto é, são *funções*. Contudo, nas expressões (2.14-2.16), as quantidades q_{mj} e p_{mj} , apesar de denotadas pelos mesmos símbolos que utilizamos

⁵O comutador das quantidades A e B é definido como $[A, B] \equiv AB - BA$.

nas equações da Mecânica Clássica, são *operadores auto-adjuntos que atuam no espaço de Hilbert*. Além disso, (2.14-2.16) são *condições fundamentais da Mecânica Quântica* [23].

Finalizamos enfatizando que, de acordo com a teoria quântica, a toda quantidade física deve ser associado um operador auto-adjunto no espaço de Hilbert e os colchetes de Poisson da Mecânica Clássica são substituídos pelas relações de comutação entre os observáveis da Mecânica Quântica.

2.3 O argumento de Pauli

Em 1933, Pauli apresentou um argumento contra a existência de um observável tempo na Mecânica Quântica. Esse argumento encontra-se reproduzido numa nota de rodapé de seu livro *General Principles of Quantum Mechanics* [10] e aqui será reapresentado.

Conforme vimos na seção anterior, para passar da Mecânica Clássica para a Mecânica Quântica, substituímos os colchetes de Poisson pelo comutador dividido por $i\hbar$ e associamos operadores auto-adjuntos às quantidades físicas. Naquela seção, “quantizamos” as quantidades *posição* e *momento linear* postulando a validade das relações (2.14-2.16).

Na seção (2.1), apresentamos a covariância dos colchetes de Poisson sob transformações canônicas. Uma vez que não há preferência entre um ou outro par de variáveis canônicas conjugadas conectados por uma transformação canônica, poderíamos tentar o processo de quantização para quaisquer desses pares. Assim, escolhemos, para uma partícula se movendo em uma dimensão, a relação (2.9) como ponto de partida. A “versão quântica” dessa expressão é

$$[T, H] = i\hbar, \quad (2.17)$$

sendo H o operador Hamiltoniano e T o operador tempo. Esses operadores, como todos os observáveis, devem ser auto-adjuntos.

Consideremos a equação secular para o o Hamiltoniano:

$$H|E\rangle = E|E\rangle. \quad (2.18)$$

O autovalor E é interpretado como a energia correspondente ao autoestado $|E\rangle$.

Definamos, agora, o operador unitário

$$W \equiv \exp(-i\bar{E}T/\hbar), \quad (2.19)$$

com $\bar{E}$ sendo uma constante arbitrária com dimensão de energia.

Atuando com W sobre um autoestado do Hamiltoniano com energia E , vemos que

$$W|E\rangle = |E - \bar{E}\rangle, \quad (2.20)$$

devido às equações (2.17-2.19).

Vemos, assim, que o operador W leva um autoestado de H com energia E até um outro autoestado desse mesmo operador com autovalor $E - \bar{E}$. Uma vez que a quantidade $\bar{E}$ é arbitrária, concluímos que o espectro do Hamiltoniano deve, necessariamente, ser contínuo e compreender o intervalo $(-\infty, +\infty)$.

Esse resultado proíbe, portanto, o Hamiltoniano de possuir espectro discreto ou limitado. Mas conhecemos problemas que apresentam espectro discreto de energia, por exemplo, o oscilador harmônico quântico ou o átomo de Hidrogênio. Na verdade, uma das origens da Mecânica Quântica reside na tentativa de se explicar as linhas espectrais *discretas* de átomos hidrogenóides [24]. Além disso, o problema da partícula livre, que, em princípio, seria um dos problemas mais básicos da natureza, apresenta um espectro de energia limitado inferiormente.

Concluímos, então, que *não pode haver um operador auto-adjunto conjugado ao Hamiltoniano* para problemas nos quais o espectro deste último seja discreto ou limitado. Portanto, *o tempo não é um observável na Mecânica Quântica*, sendo considerado como um parâmetro de evolução temporal.⁶

2.3.1 Exemplos de operadores conjugados ao Hamiltoniano

Veremos, brevemente, dois operadores que satisfazem a relação de comutação esperada com o Hamiltoniano sendo, assim, dois candidatos ao título de de “operador tempo”.

O operador *tempus*

O operador *tempus* é um operador conjugado ao Hamiltoniano que, em algumas situações, está relacionado com o parâmetro t da evolução temporal.

⁶A análise de Pauli não apresenta rigor matemático pois, por exemplo, nenhuma menção é feita a respeito dos domínios dos operadores H e T [9]. Para uma prova rigorosa do “teorema” de Pauli consultar [25].

Seja um sistema conservativo. O estado desse sistema num instante t pode ser obtido a partir do estado inicial através de⁷

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle. \quad (2.21)$$

Nesta equação, $U(t)$ é o operador de evolução temporal, dado por

$$U(t) = e^{-i\frac{Ht}{\hbar}}, \quad (2.22)$$

sendo H o Hamiltoniano.

Consideremos um operador conjugado a H , isto é, que satisfaça a equação (2.17). Esse operador será chamado *tempus* e denotado por T . Utilizando as expressões (2.21) e (2.22), podemos encontrar o valor esperado para T num instante t :

$$\langle\psi(t)|T|\psi(t)\rangle = \langle\psi(0)|e^{i\frac{Ht}{\hbar}}Te^{-i\frac{Ht}{\hbar}}|\psi(0)\rangle. \quad (2.23)$$

Utilizando o lema de Baker-Hausdorff [21] e a relação (2.17), encontramos

$$\begin{aligned} e^{i\frac{Ht}{\hbar}}Te^{-i\frac{Ht}{\hbar}} &= T + \frac{it}{\hbar}[H, T] + \frac{1}{2!}\left(\frac{it}{\hbar}\right)^2[H, [H, t]] + \dots \\ &= T + t. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Das equações (2.23) e (2.24), obtemos

$$\langle\psi(t)|T|\psi(t)\rangle = t + \langle\psi(0)|T|\psi(0)\rangle. \quad (2.25)$$

Esta expressão mostra que o valor esperado do operador *tempus* num instante de tempo t é igual ao parâmetro t somado com uma constante, que é dada pelo valor esperado do operador *tempus* no estado inicial.

Uma possível realização para os operadores H e T é

$$H = E; \quad (2.26)$$

$$T = i\hbar\frac{\partial}{\partial E}. \quad (2.27)$$

Contudo, o operador *tempus* não é hermiteano, portanto seus autovalores são, em geral, números complexos, o que torna difícil sua interpretação [26].

⁷Consideramos estados normalizados.

O Operador de Aharonov-Bohm

Consideremos uma partícula num movimento unidimensional. De acordo com a condição fundamental (2.16), temos

$$[q, p] = i\hbar, \quad (2.28)$$

sendo q o observável posição da partícula e p o momento linear.

Consideremos, ainda, a situação livre. Nesse caso, o Hamiltoniano se escreve como

$$H = \frac{p^2}{2m}. \quad (2.29)$$

Definimos, agora, segundo Aharonov e Bohm, o operador [9, 27]

$$T_{AB} \equiv \frac{m}{2} (qp^{-1} + p^{-1}q). \quad (2.30)$$

A motivação dessa definição é que ela é a simetrização da expressão clássica $t = x/v = mx/p$. Essa escolha de simetria em q e p é a melhor possível para se obter um operador auto-adjunto [9].

Utilizando a relação de comutação (2.28) e $[p, p^{-1}] = 0$, podemos mostrar que

$$[T_{AB}, H] = i\hbar, \quad (2.31)$$

ou seja, o operador de Aharonov-Bohm satisfaz a relação de comutação esperada para um operador tempo.

Infelizmente a prova do porquê o argumento de Pauli não se aplica ao operador T_{AB} é comparável em complexidade à prova do próprio teorema de Pauli e escapa aos propósitos desta breve revisão, mas o leitor interessado pode consultar [25].⁸

2.4 O que é o tempo na Mecânica Quântica?

Vimos, na seção anterior, que o tempo não é um observável. Mas o que isso significa?

Porventura isso significa que o tempo não pode ser medido no contexto da Mecânica Quântica? O que, afinal, significa medir o tempo no contexto da Mecânica Quântica?

⁸Para um tratamento “heurístico” de como contornar o pólo devido a p^{-1} , ver referências [28, 29].

Essas questões serão discutidas nesta seção, porém não serão inteiramente respondidas nesta etapa.

Analiseemos o caso de um sistema livre no espaço tridimensional. Suponhamos que esse sistema encontre-se em algum estado $|\psi(t)\rangle$ conhecido. No instante $t = t_1$ medimos sua posição. Digamos que o resultado dessa medição seja um certo valor $\mathbf{x}_1$. Segundo a teoria quântica, o estado do sistema, logo após a medição, é $|\mathbf{x}_1\rangle$. Deixemos, agora, o sistema evoluir livremente até um instante $t_2 > t_1$. Uma vez que $|\mathbf{x}_1\rangle$ não é um autoestado do Hamiltoniano do sistema livre $H = p^2/(2m)$, entre os instantes t_1 e t_2 , o estado do sistema é uma superposição de autoestados da posição. No instante $t = t_2$ realizamos uma segunda medição da posição, obtendo, desta vez, o resultado $\mathbf{x}_2$, com $\mathbf{x}_2$ diferente de $\mathbf{x}_1$.

Podemos dizer que o sistema quântico percorreu a distância $|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1|$ no intervalo de tempo $t_2 - t_1$?

Podemos.⁹

Mas isso significa que estamos medindo o intervalo de tempo que o sistema leva para percorrer a distância $|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1|$? Não. Nós estamos medindo, no caso, a *posição* do sistema em dois instantes de tempo diferentes. O tempo propriamente dito está sendo medido com o auxílio de um *relógio clássico*. Olhando para esse relógio, nos programamos para efetuar as medições nos instantes t_1 e t_2 , mas não estamos medindo algum tempo associado ao sistema.

Para afirmarmos que estamos medindo o tempo no contexto da Mecânica Quântica devemos, *de alguma forma*, associar essa quantidade, seja ela o instante em que algum determinado evento de natureza quântica ocorre ou algum intervalo de tempo referente aos processos envolvidos no fenômeno quântico analisado, ao estado do sistema. A razão para isso é simples: o estado do sistema, ou seja, o vetor do espaço de Hilbert, segundo a teoria quântica, contém toda a informação a respeito do sistema. Se o ato de se medir o tempo fizer algum sentido na Mecânica Quântica, essa medição deve ser obtida a partir da função de onda do sistema em questão.

No capítulo seguinte veremos algumas maneiras de se associar o tempo à função de onda do sistema estudado no contexto do tunelamento. Apenas para ilustrar a proposta, comentaremos brevemente duas delas nesta seção.

A primeira delas é o *tempo de fase*, que é um tempo associado ao pico da função de onda. Através dele, podemos calcular em qual instante o pico do pacote de ondas atingirá um determinado ponto do espaço.

Uma outra maneira de se associar um tempo ao estado do sistema é considerar um sistema que possua spin $1/2$. Mede-se o spin do sistema antes

⁹O conceito aqui envolvido é a *retrodição* [30].

e depois deste atravessar uma região onde existe um campo magnético perpendicular à direção do movimento. Como o campo magnético causa uma precessão no spin, chamada de precessão de Larmor, é possível inferir, dessa maneira, qual o intervalo de tempo que o sistema ficou sob influência do campo externo, ou seja, quanto tempo o sistema quântico *permaneceu* na região onde esse campo não é nulo. Esse tempo é chamado de *tempo de Larmor*.

Infelizmente nem todas as definições de tempo em Mecânica Quântica possuem uma interpretação evidente e elas não são, em geral, mutuamente equivalentes. Porém, todas são, em princípio, acessíveis experimentalmente, o que significa que pode-se criar um arranjo experimental para se medir o tempo de fase e outro arranjo para se medir o tempo de Larmor para o mesmo sistema no mesmo estado inicial. Contudo, não há garantias de que os resultados dos diferentes experimentos coincidam.

De fato, para o problema de tempo de tunelamento, muitos experimentos já foram realizados, comprovando várias características previstas teoricamente como, por exemplo, o *efeito Hartman*, que será estudado nesta dissertação.

Concluimos este capítulo enfatizando que, apesar do fato do tempo não ser um observável no contexto da Mecânica Quântica, existem muitas definições de tempo associadas a sistemas quânticos. Essas definições, embora em sua maioria não sejam mutuamente equivalentes e, muitas vezes, não sejam correlacionadas, podem ser medidas. Na verdade, diversos experimentos já foram e continuam sendo realizados para se medir diversos tempos associados aos sistemas.¹⁰

¹⁰Ver [15].

Capítulo 3

Tempos de tunelamento: fundamentos e resultados não-relativísticos

Neste capítulo apresentaremos as definições de tempo de tunelamento mais aceitas na atualidade e em seguida, demonstraremos os principais resultados envolvendo tempos de tunelamento obtidos com a teoria quântica não-relativística. Contudo, antes de iniciarmos essa discussão, é conveniente apresentarmos uma pequena revisão sobre as diversas velocidades associadas a ondas.

3.1 Ondas e velocidades

Como podemos associar uma velocidade a uma onda?

Essa simples questão não possui uma simples resposta.

Imaginemos o caso mais simples de todos: uma onda unidimensional, como no caso de uma corda muito longa esticada, na qual possíveis deformações em sua forma devido ao seu próprio peso, bem como possíveis perdas de energia por atrito interno ou com o ar, possam ser desprezadas. Suponhamos que um experimentador, chamado de experimentador A , segure uma das extremidades da corda e que deseje transmitir um sinal, com o auxílio dessa corda, para um outro experimentador, chamado de B , que se situa junto a corda, a uma certa distância de A .¹

¹O contexto desta experiência é o da mecânica clássica não-relativística. Admitimos, também, que a única forma do sinal ser transmitido de A para B seja com o auxílio de

O experimentador A pode provocar oscilações transversais na corda do tipo $\sin(\omega t)$, onde ω é a frequência angular das oscilações e t é o tempo, com uma amplitude U .² Essas oscilações propagar-se-ão ao longo da corda mantendo a amplitude e frequência iniciais. Suponhamos que o experimentador B possua um instrumento de medição de amplitude das oscilações da corda e que tal instrumento seja capaz de detectar amplitudes maiores que um certo valor O , em unidades apropriadas. Admitindo que a amplitude U do sinal transmitido seja maior que O , facilmente o experimentador B poderá detectar o sinal enviado por A . Um dos possíveis métodos para se definir a velocidade do sinal seria dividir a distância d_{AB} entre os experimentadores pelo intervalo de tempo $t_f - t_i$ entre o instante t_i no qual o sinal foi enviado por A ³ e o instante t_f no qual ele foi detectado por B . Chamaremos a velocidade calculada desse modo de *velocidade média da parte principal do pacote*.

Outras possíveis definições da velocidade de propagação de sinal seriam i) dividir a frequência ω pelo número de onda k da onda, obtendo-se a *velocidade de fase*, que na ausência de dispersão seria independente da frequência; ii) calcular a derivada de ω com respeito a k , obtendo-se a *velocidade de grupo* que, na ausência de dispersão, também é independente da frequência ou ainda, iii) se em vez de termos uma onda senoidal no tempo tivermos um pulso com um único pico, poder-se-ia medir a velocidade com a qual esse pico viaja, obtendo-se, então, a *velocidade do pico*. No entanto, se a corda proporcionasse dispersão, isto é, a relação entre ω e k não fosse linear, as velocidades de fase e de grupo dependeriam da frequência e, no caso (iii), poderia ser complicado identificar seus significados físicos, visto que as velocidades seriam diferentes uma da outra.

Pode parecer razoável definir a velocidade de propagação do sinal como a velocidade do pico ou, talvez, a velocidade média da parte principal do pacote. *Apresentaremos agora o ponto central no entendimento do método de Sommerfeld e Brillouin*.⁴ suponhamos a definição de velocidade de propagação do sinal como sendo a velocidade do pico. Para que o sinal enviado seja físico, a função que descreve o deslocamento transversal da corda como função da posição ao longo da corda e do tempo deve respeitar algumas condições, entre elas, deve ser uma *função contínua* ao longo da direção de propagação da onda, isto é, a corda não deve *arrebentar-se*. Dessa forma, se

ondas transversais na corda.

²Consideramos a amplitude da onda como sendo a distância transversal à direção de propagação da onda entre sua posição média e um pico.

³Admitimos que a precisão de medida de A seja a mesma de B .

⁴Consultar [31].

fixarmos nossa atenção num ponto entre A e B e observarmos o deslocamento transversal da corda entre os instantes t_i e t_f , veremos a corda em repouso até um certo instante, a partir do qual ela se desloca *continuamente* até uma distância U , isto é, quando o pico chega nesse ponto, e então ela retorna à posição que antes era de repouso. Observamos que, como a corda se deslocou *continuamente* até U na direção transversal à direção de propagação da onda, *antes do pico chegar ao ponto observado, poder-se-ia ser medido um pequeno deslocamento na corda*. Ou seja, o sinal poderia ser transmitido *antes da chegada do pico*. Portanto, *a velocidade do pico não é uma definição de velocidade de propagação de sinal satisfatória*.

De forma análoga, se definirmos a velocidade do sinal como sendo a velocidade média da parte principal do pacote, veremos que, como o experimentador B só consegue medir amplitudes não inferiores a O , ele não é capaz de detectar a parte frontal do pulso até que os deslocamentos atinjam essa magnitude. Assim, embora tendo uma amplitude diminuta, a parte frontal do pulso chegou até B *antes* de instante t_f . Dessa forma, a parte frontal do pacote pode influenciar os eventos em B *antes* do instante da detecção do sinal pelo experimentador. Logo, *a definição da velocidade de propagação do sinal como sendo a velocidade média da parte principal do pacote também não é uma escolha adequada*.

Como um pulso com qualquer amplitude maior que zero é capaz de transmitir um sinal, bastando para isso aumentar a precisão do instrumento de medida de B e, visto que não há nenhum limite superior⁵ para a precisão do experimento (a precisão da experiência de detecção da amplitude do pulso pode ser sempre melhorada), podemos pensar no caso ideal no qual $O \rightarrow 0$. Neste caso, o experimentador B saberia exatamente quando a “parte mais frontal” do pulso chegou até ele. A esta “parte mais frontal” do pulso denominamos *frente de onda*.⁶ À velocidade com a qual a frente de onda se propaga chamamos *velocidade da frente de onda*.

Antes da chegada da frente de onda do pulso o experimentador B não pode detectar a chegada deste, simplesmente porque o pulso ainda não chegou. Assim, concluímos que definir a velocidade máxima de propagação de sinais constituídos por pacotes de onda como sendo a velocidade da frente de onda é uma maneira não-ambígua de fazê-lo.

No que segue, utilizaremos a propagação de ondas eletromagnéticas para deixar os conceitos de velocidades de fase, de grupo e de frente de onda um pouco mais claros.

⁵Ou seja, não há uma amplitude mínima que possa ser um limite para a detecção.

⁶Na verdade, a frente de onda nada mais é do que um ponto de não-analiticidade da onda.

3.1.1 As equações de Maxwell

O conjunto de equações:⁷

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho, \quad (3.1)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad (3.2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \mathbf{0}, \quad (3.3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (3.4)$$

é conhecido como equações de Maxwell. Nessas equações, $\mathbf{E}$ e $\mathbf{B}$ são, respectivamente, os campos elétrico e magnético fundamentais, $\mathbf{D}$ e $\mathbf{H}$ os campos auxiliares (determinados pela reação do meio à aplicação dos campos fundamentais),⁸ ρ é a densidade de carga e $\mathbf{J}$ a densidade de corrente elétrica. As equações de Maxwell, juntamente com a força de Lorentz

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}), \quad (3.5)$$

que uma partícula com momento linear relativístico $\mathbf{p} = m\mathbf{v}/\sqrt{1 - (\frac{v}{c})^2}$ e carga q experimenta e com a definição de força

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt}, \quad (3.6)$$

descrevem toda a eletrodinâmica clássica.

A fim de estudarmos a propagação de ondas eletromagnéticas em meios dispersivos e não-dispersivos, consideremos as equações de Maxwell em meios materiais e na ausência de fontes, que se escrevem como:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0, \quad (3.7)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} - \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \mathbf{0}, \quad (3.8)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \mathbf{0}, \quad (3.9)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0. \quad (3.10)$$

⁷As equações de Maxwell (3.1-3.4) estão escritas no Sistema Internacional (SI) de Unidades.

⁸Ver [18].

Em meios isotrópicos não-dispersivos, as relações entre os campos fundamentais e os auxiliares são lineares

$$\mathbf{D}(\mathbf{x}, t) = \epsilon \mathbf{E}(\mathbf{x}, t), \quad (3.11)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{x}, t) = \frac{\mathbf{B}(\mathbf{x}, t)}{\mu}, \quad (3.12)$$

onde ϵ e μ são, respectivamente, a permissividade elétrica e a permeabilidade magnética do meio. Com isso, as equações de Maxwell (3.7-3.10) assumem a forma:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0, \quad (3.13)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} - \epsilon\mu \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \mathbf{0}, \quad (3.14)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \mathbf{0}, \quad (3.15)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0. \quad (3.16)$$

3.1.2 Equação de ondas eletromagnéticas

Aplicando o operador rotacional ($\nabla \times$) à equação (3.15) e utilizando a identidade vetorial

$$(\nabla \times \nabla) \times \mathbf{A} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A}, \quad (3.17)$$

obtemos, com o auxílio de (3.13):

$$\nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E} + \nabla \times \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla^2 \mathbf{E} + \frac{\partial}{\partial t}(\nabla \times \mathbf{B}) = \mathbf{0}. \quad (3.18)$$

Utilizando a equação (3.14), obtemos finalmente:

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = \mathbf{0}, \quad (3.19)$$

onde

$$v = \frac{1}{\sqrt{\epsilon\mu}}. \quad (3.20)$$

Sendo ϵ_0 e μ_0 a permissividade elétrica e a permeabilidade magnética do vácuo, respectivamente, podemos definir a velocidade c das ondas eletromagnéticas no vácuo como

$$c \equiv \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}}, \quad (3.21)$$

valor que corresponde à velocidade da luz no vácuo.⁹ Podemos, então, rees-

⁹O que levou à identificação da luz como uma onda eletromagnética.

crever (3.20) como:

$$v = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0\mu_0}} \frac{\sqrt{\epsilon_0\mu_0}}{\sqrt{\epsilon\mu}} = \frac{c}{n}, \quad (3.22)$$

onde definimos o índice de refração do meio como:

$$n \equiv \sqrt{\frac{\epsilon\mu}{\epsilon_0\mu_0}}. \quad (3.23)$$

Com um procedimento análogo ao que fizemos para obter a equação (3.19), podemos encontrar uma expressão idêntica para o campo magnético:¹⁰

$$\nabla^2 \mathbf{B} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} = \mathbf{0}. \quad (3.24)$$

Das equações (3.19) e (3.24), concluímos que cada componente dos campos $\mathbf{E}$ e $\mathbf{B}$ deve satisfazer a equação escalar de ondas:

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}(\mathbf{x}, t) = 0. \quad (3.25)$$

Apesar de termos deduzido a equação acima a partir das equações de Maxwell, ela não é equivalente às mesmas. As equações de Maxwell levam em consideração as propriedades vetoriais dos campos $\mathbf{E}$ e $\mathbf{B}$, enquanto a equação (3.25) não o faz.

Consideremos, agora, que ϵ e μ possam depender da frequência angular¹¹ ω . Assim, o índice de refração se escreve como

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{\epsilon(\omega)\mu(\omega)}{\epsilon_0\mu_0}}. \quad (3.26)$$

Com isso, v na equação de ondas (3.25) se torna função da frequência:

$$v(\omega) = \frac{c}{n(\omega)}. \quad (3.27)$$

Considerando a propagação no vácuo, temos

¹⁰O procedimento é o mesmo: aplica-se o operador rotacional na equação (3.14), utiliza-se a equação (3.16) e, por fim, (3.15).

¹¹Na realidade, em todos os meios dispersivos ϵ e μ serão funções de ω . O vácuo é, a rigor, o único meio conhecido no qual a permissividade elétrica e a permeabilidade magnética são constantes e, portanto, independentes da frequência de oscilação do campo.

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0, \quad (3.28)$$

$$\mu(\omega) = \mu_0. \quad (3.29)$$

Assim

$$n = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \mu_0}{\epsilon_0 \mu_0}} = 1, \quad (3.30)$$

portanto,

$$v(\omega) = c \quad (3.31)$$

e a equação de ondas se escreve como

$$\nabla^2 \psi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = 0. \quad (3.32)$$

Definindo o operador D'Alembertiano

$$\square \equiv \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2, \quad (3.33)$$

obtemos

$$\square \psi(\mathbf{x}, t) = 0. \quad (3.34)$$

3.1.3 Ondas planas homogêneas

Para que a equação (3.25) tenha solução na forma de ondas planas, i. e., do tipo

$$e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t)} \quad (3.35)$$

a seguinte relação deve ser satisfeita:

$$\omega = \pm v |\mathbf{k}| = \pm \frac{c}{n(\omega)} |\mathbf{k}| = \pm \frac{c}{\bar{n}(k)} |\mathbf{k}|, \quad (3.36)$$

onde

$$\bar{n}(k) = n(\omega(k)). \quad (3.37)$$

No caso em que ω e as componentes de $\mathbf{k}$ são números reais e $\omega > 0$, as soluções (3.35) representam ondas que se propagam na mesma direção e mesmo sentido do vetor de ondas $\mathbf{k}$. Tais ondas são homogêneas, o que significa que os planos de amplitude constante coincidem com os planos de fase constante.

Consideraremos nesta seção a propagação de ondas em uma dimensão - digamos, a direção z . O vetor número de onda angular é, portanto, dado por

$\mathbf{k} = k\hat{\mathbf{e}}_3$ ($\hat{\mathbf{e}}_3$ é um vetor unitário no sentido positivo da direção z). A equação (3.25) se escreve como

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2}\Psi(z, t) - \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi(z, t) = 0. \quad (3.38)$$

Assumindo $\omega = +v|\mathbf{k}|$, podemos escrever

$$\omega = \frac{c}{\bar{n}(k)}k. \quad (3.39)$$

Com isso, podemos definir a velocidade de fase como

$$v_f \equiv \frac{\omega(k)}{k} = \frac{c}{\bar{n}(k)}. \quad (3.40)$$

Devido à linearidade da equação de ondas (3.38), a solução mais geral possível é uma superposição da forma

$$\psi(z, t) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk A(k) e^{i(kz - \omega t)} + c.c. \quad (3.41)$$

onde $c.c.$ denota o conjugado complexo do primeiro termo do lado direito da equação (3.41). O valor da distribuição espectral $A(k)$ corresponde à contribuição de cada onda plana com número de onda k na integral.

Por questões de simplicidade, consideraremos a solução geral complexa:¹²

$$u(z, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk B(k) e^{i(kz - \omega t)}. \quad (3.42)$$

Se a propagação ocorre no vácuo, a relação entre ω e k é linear,

$$\omega = ck, \quad (3.43)$$

e podemos escrever (3.42) como

$$u(z, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk B(k) e^{ik(z - ct)} \quad (3.44)$$

$$= u(z - ct, 0). \quad (3.45)$$

Assim, vemos que o pacote se propaga com a velocidade c sem sofrer nenhuma mudança na forma inicial.

Entretanto, num meio dispersivo a relação entre ω e k não é linear. Para estudarmos em detalhes a propagação de ondas eletromagnéticas nesse tipo

¹²A solução (3.41) pode ser obtida tomando-se a parte real de (3.42).

de meio necessitamos conhecer $\bar{n}(k)$ (ou equivalentemente, $n(\omega)$) explicitamente. Tais relações dependem especificamente do meio considerado. No entanto, se considerarmos um pacote fortemente concentrado num certo número de onda k_0 , podemos expandir $\omega(k)$ em série de Taylor em torno de k_0 e aproximá-la pelos primeiros termos:

$$\omega(k) \simeq \omega_0 + \left[\frac{d\omega}{dk} \right]_{k_0} (k - k_0). \quad (3.46)$$

Com essa aproximação, o pacote (3.42) se escreve como

$$u(z, t) \simeq \frac{e^{i\left(k_0 \left[\frac{d\omega}{dk} \right]_{k_0} - \omega_0\right)t}}{\sqrt{2\pi}} \int dk B(k) e^{ik\left(z - \left[\frac{d\omega}{dk} \right]_{k_0} t\right)} \quad (3.47)$$

$$= e^{i\left(k_0 \left[\frac{d\omega}{dk} \right]_{k_0} - \omega_0\right)t} u\left(z - \left[\frac{d\omega}{dk} \right]_{k_0} t, 0\right), \quad (3.48)$$

o que mostra que, exceto por um fator de fase global (com frequência angular $\omega' = k_0 [d\omega/dk]_{k_0} - \omega_0$) o pacote se propaga *aproximadamente* sem sofrer distorção em sua forma inicial com uma velocidade denominada *velocidade de grupo* v_g dada por:

$$v_g \equiv \left[\frac{d\omega}{dk} \right]_{k_0}. \quad (3.49)$$

Com auxílio da equação (3.39):

$$v_g = c \left(\frac{\bar{n}(k_0) - k_0 \left[\frac{d\bar{n}}{dk} \right]_{k_0}}{\bar{n}^2(k_0)} \right). \quad (3.50)$$

Como $\bar{n}(k) = n(\omega)$, temos

$$\left[\frac{d\bar{n}(k)}{dk} \right]_{k_0} = \left[\frac{dn(\omega)}{dk} \right]_{k_0} = \left[\frac{dn(\omega)}{d\omega} \right]_{\omega_0} \left[\frac{d\omega(k)}{dk} \right]_{k_0} = \left[\frac{dn(\omega)}{d\omega} \right]_{\omega_0} v_g. \quad (3.51)$$

Portanto

$$v_g = \frac{c}{n(\omega_0) + \omega_0 \left[\frac{dn}{d\omega} \right]_{\omega_0}}. \quad (3.52)$$

Nas regiões onde ocorre dispersão normal, temos $(dn/d\omega) > 0$ e $n > 1$, por conseguinte, $v_g < v_f < c$. Contudo, em certos meios materiais podemos

ter regiões do espectro nas quais ocorre dispersão anômala, $dn/d\omega$ pode ser grande e negativa, n pode ser menor que a unidade e podemos ter $n(\omega) + \omega[dn/d\omega] < 1$, o que implica $v_g > c$ ou até mesmo velocidade de grupo negativa, bastando para isso que o denominador de (3.52) seja negativo. Porém, nas regiões em que $dn/d\omega$ é grande e negativa, ocorre uma rápida variação de ω com k , ou seja, $d^n\omega/dk^n$ são grandes e a aproximação (3.46) deixa de ser válida, visto que não podemos mais negligenciar os termos que contém derivadas de ordens mais altas, e (3.48) não mais se verifica, o que torna obscura a interpretação física da velocidade de grupo.

3.1.4 Sinais

Visto que é possível obtermos velocidades de fase e de grupo superluminais, podemos nos perguntar sobre a possibilidade de tais soluções entrarem em conflito com o princípio de causalidade em relatividade especial. Em outras palavras, é possível construirmos um pacote de ondas, num meio dispersivo com dispersão anômala, fortemente centrado numa frequência na qual $v_f > c$ ou $v_g > c$ e que transmita informação numa velocidade superluminal?

A resposta para essa pergunta foi dada no início do século passado por Sommerfeld e Brillouin [31]. De acordo com Brillouin, *um pacote de ondas que possua, em um dado instante inicial, uma frente de onda bem definida ao longo de sua direção de propagação constitui-se em um sinal*. Essa definição nos permite determinar, sem ambigüidades, a *velocidade máxima* de transmissão de *sinal*, identificada como a *velocidade de propagação da frente de onda* do pacote, uma vez que, independentemente da técnica experimental empregada, é impossível detectar o pacote *antes* da chegada de sua frente de onda.

A conclusão do estudo de Sommerfeld e Brillouin sobre a propagação de sinais eletromagnéticos em meios dispersivos de maior importância para este trabalho é que o seguinte comportamento tem caráter universal, ou seja, *independentemente* do meio material considerado:

$$\lim_{|k| \rightarrow \infty} \bar{n}(k) = 1, \quad (3.53)$$

ou equivalentemente:

$$\lim_{|\omega| \rightarrow \infty} n(\omega) = 1. \quad (3.54)$$

Portanto, observando a definição de sinal de Brillouin, consideremos o seguinte pacote propagando-se num meio dispersivo:

$$u(z, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk B(k) e^{i[kz - \omega(k)t]}, \quad (3.55)$$

onde

$$B(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int u(z, 0) e^{-ikz} dz. \quad (3.56)$$

A fim de satisfazer a definição de sinal adotada, $u(z, 0)$ deve ser não nula apenas numa região finita do espaço ou, pelo menos, deve ser nula numa região semi-infinita (à direita da origem, por exemplo). Com isso, $B(k)$ não contém pólos no semiplano superior do plano- k complexo e satisfaz as condições de aplicação do lema de Jordan (ver apêndice A). Tendo em vista a equação (3.36) e o limite (3.53), vemos que o argumento da exponencial do integrando de (3.55) se comporta assintoticamente da forma

$$i[kz - \omega(k)t] \longrightarrow ik(z - ct). \quad (3.57)$$

Evidentemente, de acordo com as condições de aplicação do lema de Jordan, obtemos que se i) $z > ct$ o contorno deve ser fechado pelo semiplano superior, o que dá um resultado nulo para a integral (3.55) devido à analiticidade de $B(k)$ nessa região, ii) $z < ct$ o contorno deve ser fechado pelo semiplano inferior, o que dá um resultado não nulo devido aos pólos de $B(k)$.

Assim, antes do instante

$$t = \frac{z}{c} \quad (3.58)$$

não chega ao ponto z nenhum sinal referente ao pacote (3.55). Portanto, a frente de onda se propaga com a velocidade c da luz no vácuo independentemente do meio e, como o sinal pode ser transmitido com a frente de onda ou após sua chegada, mas nunca antes dela, vemos que não ocorre violação do princípio de causalidade relativística, embora consideremos pacotes de ondas que apresentem velocidades de fase e de grupo superluminais.

No caso em que um pacote do tipo (3.55) se propaga no vácuo, podemos facilmente verificar que as velocidades de fase e de grupo são ambas iguais a velocidade c . Como, obviamente, o limite (3.53) se verifica, a frente de onda se propaga com velocidade $v_{fo} = c$. Com isso, identificamos a velocidade do sinal como sendo a velocidade da luz no vácuo. Em resumo, para pacotes de ondas planas homogêneas propagando-se no vácuo, vale:

$$v_g = v_f = v_{fo} = c. \quad (3.59)$$

Concluimos esta seção enfatizando que associar uma velocidade a uma onda não é uma tarefa simples. Conforme vimos brevemente, podemos associar a velocidade de fase, a de grupo, a da frente de onda e a de sinal e elas

não são, em geral, mutuamente equivalentes. Além disso, muitas vezes, nem todas possuem um sentido físico muito bem definido. Por exemplo, podemos definir a velocidade de grupo sempre como $d\omega/dk$, mas ela só possuirá um sentido físico quando a aproximação (3.46) for verificada.

Dessa forma, no problema de tunelamento em Mecânica Quântica, mesmo que pensássemos em definir o tempo de tunelamento como sendo a extensão da barreira de potencial dividida pela velocidade do pacote de ondas, essa definição não seria livre de ambigüidades.

Na seção seguinte apresentaremos algumas definições de tempo de tunelamento. Ao estudarmos uma barreira retangular e demonstrarmos o efeito Hartman, na última seção deste capítulo, retornaremos aos conceitos apresentados nesta seção.

3.2 Definições de tempos de tunelamento

Nesta seção, apresentaremos diversas definições de tempo de tunelamento no contexto da Mecânica Quântica não-relativística. Juntamente com cada definição, procuraremos apresentar uma interpretação plausível, sempre que possível, frente à Copenhagen.

3.2.1 O tempo de permanência estacionário

Iniciamos esta subseção com a equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\mathbf{x})\psi. \quad (3.60)$$

Nesta equação, a função complexa $\psi = \psi(\mathbf{x}, t)$ é a função de onda, ou vetor de estado da Mecânica Quântica, e $V(\mathbf{x})$ é o potencial que atua sobre o sistema quântico que ψ descreve. Assumimos, simplifcadamente, que $V(\mathbf{x})$ é uma função real independente do tempo.

Multiplicando a equação de Schrödinger pelo conjugado complexo da função de onda, obtemos

$$i\hbar \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi^* \nabla^2 \psi + V(\mathbf{x}) \psi^* \psi. \quad (3.61)$$

Por sua vez, a equação conjugada complexa à equação (3.60) se escreve como

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + V(\mathbf{x}) \psi^*. \quad (3.62)$$

Multiplicando esta última equação por ψ , encontramos

$$-i\hbar \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla^2 \psi^*) \psi + V(\mathbf{x}) \psi^* \psi. \quad (3.63)$$

Subtraindo (3.63) de (3.61), chegamos à equação de continuidade:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0. \quad (3.64)$$

Nesta expressão, ρ e $\mathbf{j}$ são funções reais da posição e do tempo definidas como:¹³

$$\rho \equiv \psi^* \psi, \quad (3.65)$$

$$\mathbf{j} \equiv \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*). \quad (3.66)$$

Pela definição (3.65), vemos que ρ é uma quantidade não-negativa, pois $\psi^* \psi = |\psi|^2$. De fato, ρ só é nula quando $\psi = 0$.

A fim de interpretarmos as quantidades (3.65) e (3.66), integramos a equação de continuidade (3.64) em todo o espaço e utilizamos o teorema de Gauss. Ao final, obtemos:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho(\mathbf{x}, t) d^3x + \int_A \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n} da = 0. \quad (3.67)$$

Com a condição física de que o campo ψ tenda a zero no infinito, a integral de superfície desta última equação é nula. Dessa forma, encontramos

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho(\mathbf{x}, t) d^3x = 0, \quad (3.68)$$

onde o volume de integração é infinito. Concluimos, então, que a quantidade

$$\int \rho d^3x \quad (3.69)$$

é independente do tempo, portanto, conservada. Mas qual quantidade física seria essa?

Segundo Born, impondo-se $\int \rho d^3x = 1$, essa quantidade pode ser interpretada como a probabilidade de se encontrar a partícula na região compreendida pelo espaço todo. Assim, a probabilidade de se encontrar o sistema quântico em qualquer sub-região do espaço não será maior do que a

¹³O leitor não deve confundir a função ρ da equação (3.64) com a densidade de carga elétrica que aparece na equação de Maxwell (3.1), representada pela mesma letra.

unidade, como deve ser uma quantidade à qual se está chamando de *probabilidade*. Por conseguinte, $\rho(\mathbf{x}, t)$ é a densidade de probabilidade da partícula ser encontrada na posição $\mathbf{x}$ no instante t e $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$ o fluxo de densidade de probabilidade associado a esse ponto do espaço e a esse instante de tempo.

Com essas quantidades à nossa disposição, podemos definir o tempo de permanência estacionário. Consideremos o caso no qual a propagação se dá unicamente em uma direção, digamos, a direção x . A equação de Schrödinger, nesse caso, se escreve como¹⁴

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x, t). \quad (3.70)$$

A quantidade $\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2$ é, agora, a densidade *linear* de probabilidade.

As soluções estacionárias da equação (3.70) são dadas por¹⁵

$$\psi(x, t) = \phi(x)e^{-iEt/\hbar}. \quad (3.71)$$

No caso estacionário, a densidade linear de probabilidade é independente do tempo e é dada por $\rho(x) = |\phi(x)|^2$, o que segue diretamente das equações (3.65) e (3.71). De (3.66) e (3.71) vemos que o fluxo de densidade linear de probabilidade é também independente do tempo e dado por:

$$j(x) = \frac{\hbar}{2im} \left(\phi(x)^* \frac{d\phi(x)}{dx} - \frac{d\phi(x)^*}{dx} \phi(x) \right) \quad (3.72)$$

Seja R uma região do espaço compreendida entre os pontos x_1 e x_2 , com $x_1 < x_2$. O *tempo de permanência estacionário* τ_P nessa região é definido como:¹⁶

$$\tau_P \equiv \frac{\int_{x_1}^{x_2} \rho(x) dx}{j_{in}}, \quad (3.73)$$

onde j_{in} é o fluxo de densidade linear de probabilidade *incidente* na região compreendida entre x_1 e x_2 , dado pela equação (3.72) com ϕ e ϕ^* trocados, respectivamente, por ϕ_{in} e ϕ_{in}^* , sendo ϕ_{in} relacionada com a função de onda incidente.¹⁷

¹⁴No caso unidimensional: $\nabla \rightarrow \frac{\partial}{\partial x}$.

¹⁵Nesta dissertação chamamos de *soluções estacionárias* aquelas associadas a *estados* que não mudam com o decorrer do tempo, ou seja, os auto-estados do operador hamiltoniano.

¹⁶O tempo de permanência estacionário foi introduzido por Smith em 1960 [32].

¹⁷A onda incidente a uma região é onda que se move em direção à ela.

O tempo de permanência estacionário (3.73) refere-se ao intervalo de tempo durante o qual o sistema quântico permaneceu na região R , sem qualquer menção aos instantes de chegada e de saída do sistema quântico dessa região. Nos problemas envolvendo tunelamento, em geral, a região R coincide com a região da barreira de potencial. Nesses casos, (3.73) refere-se a quanto tempo o sistema quântico permaneceu dentro da barreira. Contudo, como se pode notar pela expressão acima, a definição do tempo de permanência estacionário não envolve o potencial explicitamente. Este pode apenas aparecer implicitamente na solução que é utilizada para se escrever a densidade linear de probabilidade. Com o intuito de esclarecer o significado físico do tempo de permanência, consideremos uma partícula livre com momento definido. Calcularemos, então, o tempo de permanência estacionário para esta partícula neste estado na região R , anteriormente definida. Vale a pena enfatizar que, neste caso, tal região não tem nada de especial em relação a qualquer outra, visto que $V(x) = 0, \forall x$. A função de onda dessa partícula livre é dada por uma onda plana homogênea

$$\psi(x, t) = e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}. \quad (3.74)$$

Consideramos, sem perda de generalidade, $p > 0$. Observamos que a onda plana (3.74) é uma solução estacionária com $\phi(x) = e^{ipx/\hbar}$. A densidade linear de probabilidade é

$$\rho^{\text{livre}}(x) = |e^{ipx/\hbar}|^2 = 1. \quad (3.75)$$

Para calcular o fluxo incidente precisamos conhecer a onda incidente. A única onda envolvida no problema é uma onda propagante que incide sobre a região considerada. Portanto, ela é igual à onda incidente. Assim, o fluxo incidente é

$$j_{in}^{\text{livre}}(x) = \frac{\hbar}{2im} \left(e^{-ipx/\hbar} \frac{de^{ipx/\hbar}}{dx} - \frac{de^{-ipx/\hbar}}{dx} e^{ipx/\hbar} \right) = \frac{p}{m}. \quad (3.76)$$

Das equações (3.73), (3.75) e (3.76) encontramos o tempo de permanência estacionário τ_P^{livre} da partícula na região compreendida entre x_1 e x_2 :

$$\tau_P^{\text{livre}} = \frac{\int_{x_1}^{x_2} dx}{p/m} = \frac{x_2 - x_1}{p/m}. \quad (3.77)$$

Mas esse é exatamente o intervalo de tempo que uma partícula clássica livre permanece nessa região:

$$t^{\text{clássico}} = \frac{x_2 - x_1}{v}, \quad (3.78)$$

onde v é a velocidade da partícula clássica dada por $v = p/m$.

Aqui, cabe uma pequena digressão. Vamos analisar com mais cautela o resultado clássico (3.78). Para isso, partiremos da equação da cinemática: $x = x_0 + vt$, onde $x = x(t)$ é a posição da partícula livre no instante de tempo t , x_0 a posição inicial dessa partícula e v a sua velocidade, que é constante. Admitimos $x_0 < x_1$. A situação física é a seguinte: em $t = 0$ a partícula encontra-se na posição x_0 com uma velocidade v . Ela se propaga em direção à região R , atinge o ponto x_1 no instante $t = t^{\text{entrada}}$ e o ponto x_2 em $t = t^{\text{saída}}$, ou seja:

$$x(t^{\text{entrada}}) = x_1 = x_0 + vt^{\text{entrada}}, \quad (3.79)$$

$$x(t^{\text{saída}}) = x_2 = x_0 + vt^{\text{saída}}. \quad (3.80)$$

Das equações (3.78 - 3.80) podemos encontrar:

$$t^{\text{clássico}} = t^{\text{saída}} - t^{\text{entrada}} = \frac{x(t^{\text{saída}}) - x(t^{\text{entrada}})}{v}. \quad (3.81)$$

A Mecânica Clássica permite, dessa forma, escrever o *tempo de permanência clássico*, isto é, o intervalo de tempo no qual a partícula clássica permanece na região considerada, como uma subtração entre os instantes de tempo *bem definidos* nos quais a partícula entra e sai dessa região. Além disso, como podemos observar na expressão acima, é possível escrever o tempo de permanência clássico em função das posições da partícula nos instantes de entrada e de saída. Tais posições são, também, quantidades bem definidas na teoria clássica e correspondem, evidentemente, aos extremos da região considerada.

Uma interpretação semelhante, em termos dos instantes de entrada e de saída da partícula na região considerada, ou em termos das posições da partícula nesses instantes, não é possível na Mecânica Quântica. A razão para isso ficará clara quando olharmos mais atentamente para a solução (3.74). Essa solução é uma onda plana homogênea e, como tal, estende-se por todo o espaço. Mais do que isso, essa solução é uma auto-função do operador momento linear. Sendo assim, seu momento linear é conhecido, a saber, p . Uma vez que a posição e o momento são observáveis incompatíveis, não é possível atribuir-se valores bem definidos a essas duas quantidades simultaneamente. Dessa forma, sendo o momento conhecido, toda informação relacionada à

posição da partícula considerada é perdida. Na verdade, segundo a interpretação de Copenhague, quando o momento é conhecido, *não faz sentido* associar-se valores à posição do sistema quântico. Sendo assim, o problema não é que não sabemos onde a partícula está num determinado instante de tempo, mas que *não faz sentido* atribuir-se valores para sua posição em instante de tempo algum.¹⁸

Portanto, como não faz sentido falar sobre a posição da partícula em qualquer instante de tempo, também não faz sentido falar no instante de tempo no qual a partícula chega na extremidade inicial da barreira, pois tal afirmação admite que a posição da partícula seja x_1 naquele instante de tempo. O mesmo se aplica à extremidade final da barreira. Fica, então, claro que o tempo de permanência estacionário definido na Mecânica Quântica não pode ser escrito em termos das posições da partícula nas extremidades da região considerada. Tampouco pode ser escrito em termos dos instantes de tempo nos quais a partícula entra e sai dessa região, pois tais quantidades não possuem sentido. Logo, o tempo de permanência estacionário (3.73) refere-se unicamente ao intervalo de tempo no qual a partícula *permanece* na região considerada e nada tem a ver com o intervalo de tempo entre os instantes nos quais a partícula chega e sai dessa região pois, como vimos, tais instantes são quantidades sem sentido.

Vale a pena esclarecer, também, que o tempo de permanência não implica, em geral, que a partícula estudada tenha atravessado a região na qual ele é calculado. Isto apenas é verdade para o caso da partícula livre. O que ocorre, em geral, no caso específico de tunelamento, é que apenas uma parcela da onda incidente é transmitida através da barreira, sendo a parte restante refletida. O tempo de permanência, tal como ele foi definido, desconsidera qual *canal* a partícula assume ao deixar essa região, isto é, ele desconsidera se a partícula é refletida ou transmitida pela região considerada. O tempo de permanência, exatamente como seu nome sugere, refere-se unicamente ao intervalo de tempo no qual a partícula permanece na região estudada, não importando se a partícula é transmitida ou refletida, nem os instantes de tempo de chegada e saída desta na região na qual o tempo é calculado.

Na subseção seguinte, veremos que o potencial causa um atraso no movimento do sistema quântico tunelante.

¹⁸Essa afirmação vale enquanto o estado da partícula for o estado (3.74). Caso, eventualmente, uma medição do observável posição da partícula for efetuada em algum instante de tempo, o estado (3.74) será, então, substituído por um auto-estado do operador posição e essa afirmação deixará de ser válida.

3.2.2 O tempo de atraso e os tempos de fase

Consideremos, novamente, soluções estacionárias da equação de Schrödinger unidimensional (3.70), mas agora nos restringiremos aos casos nos quais o potencial $V(x)$ é nulo para $x < 0$ e para $x > a$, onde a é uma constante positiva com dimensão de comprimento. Além disso, estudaremos a situação na qual não há onda incidente vinda da direita. Dessa forma, a onda incidente sobre a barreira é dada por:

$$\psi_{\text{inc}}(x, t) = e^{i(kx - Et/\hbar)}, \quad (3.82)$$

onde $k = \sqrt{2mE}/\hbar$. Vale a pena ressaltar que a expressão (3.82) é válida somente para $x < 0$. Ainda para $x < 0$ temos uma outra onda, chamada de onda refletida, dada por:

$$\psi_{\text{ref}}^{(E)}(x, t) = R(E)e^{-i(kx + Et/\hbar)} = |R(E)|e^{-i[kx + Et/\hbar - \phi_R(E)]}. \quad (3.83)$$

Chamaremos $R(E) = |R(E)|e^{i\phi_R(E)}$ de coeficiente de reflexão.

Na região da barreira, a solução dependerá da forma explícita do potencial. Contudo, para $x > a$, as soluções são novamente do tipo de ondas planas:

$$\psi_{\text{trans}}^{(E)} = T(E)e^{i(kx - Et/\hbar)} = |T(E)|e^{i[kx - Et/\hbar + \phi_T(E)]}, \quad (3.84)$$

onde $T(E) = |T(E)|e^{i\phi_T(E)}$ é chamado de coeficiente de transmissão.¹⁹

Concentraremos-nos, agora, numa versão não-estacionária do mesmo problema. A onda incidente é agora dada por uma superposição de ondas estacionárias (3.82):

$$\psi_{\text{inc}}(x, t) = \int_0^\infty dE A_1(E) e^{i[k(E)x - Et/\hbar]}. \quad (3.85)$$

Nesta última expressão, $A_1(E)$ é a distribuição energética da onda incidente.

Consideraremos o problema no qual a onda incidente é centrada numa certa energia E_0 e, além disso, razoavelmente espacialmente localizada. Isso é feito impondo que o módulo de $A_1(E)$ tenha um pico em $E = E_0$ e, além disso, seja significantemente não-nulo apenas numa pequena região do espectro ΔE em torno de E_0 . Por “uma pequena região” queremos dizer que $\Delta E \ll E_0$. Associada a essa região ΔE do espectro existe um intervalo de tempo no qual o pacote está localizado, em algum ponto do espaço, dado

¹⁹As formas explícitas de $R(E)$ e $T(E)$ dependem da forma do potencial.

por $\delta t \approx h/\Delta E$. Ora, se, num ponto do espaço, o pacote é razoavelmente localizado no tempo, então, em algum instante de tempo, ele é razoavelmente localizado no espaço.

As ondas refletida e transmitida são dadas por superposições das ondas estacionárias (3.83) e (3.84), respectivamente:

$$\psi_{\text{ref}}(x, t) = \int_0^\infty dE A_2(E) e^{-i[k(E)x + Et/\hbar]}, \quad (3.86)$$

$$\psi_{\text{trans}}(x, t) = \int_0^\infty dE A_3(E) e^{i[k(E)x - Et/\hbar]}. \quad (3.87)$$

Os coeficientes de reflexão e de transmissão foram absorvidos nas definições das distribuições energéticas $A_2(E)$ e $A_3(E)$. Essas distribuições gozam das mesmas propriedades de $A_1(E)$, a saber, apresentam um pico em $E = E_0$, são significantemente não-nulas apenas numa vizinhança ΔE de E_0 e as ondas associadas são razoavelmente localizadas no espaço.

Podemos escrever as ondas incidente, refletida e transmitida como:

$$\psi_{\text{inc}}(x, t) = \int_0^\infty dE |A_1(E)| e^{i[k(E)x - Et/\hbar + \phi_1(E)]} \quad (3.88)$$

$$\psi_{\text{ref}}(x, t) = \int_0^\infty dE |A_2(E)| e^{-i[k(E)x + Et/\hbar - \phi_2(E)]} \quad (3.89)$$

$$\psi_{\text{trans}}(x, t) = \int_0^\infty dE |A_3(E)| e^{i[k(E)x - Et/\hbar + \phi_3(E)]} \quad (3.90)$$

Nestas equações, escrevemos $A_j(E) = |A_j(E)| e^{i\varphi_j(E)}$, para $j = 1, 2$ e 3 .

Olhando atentamente para as equações (3.83) e (3.84), vemos que a ação do potencial sobre cada uma das componentes das ondas refletida e transmitida é, além de uma modulação em suas amplitudes, uma simples mudança em suas fases, mudança esta que, em geral, depende da energia de cada componente. Portanto, podemos escrever:

$$\phi_2(E) = \phi_1(E) + \phi_R(E), \quad (3.91)$$

$$\phi_3(E) = \phi_1(E) + \phi_T(E), \quad (3.92)$$

onde $\phi_R(E)$ e $\phi_T(E)$ são as fases dos coeficientes de reflexão e de transmissão, já definidos anteriormente.

Utilizando o método da fase estacionária na integral (3.88), obtemos:²⁰

²⁰Ver apêndice B

$$\left. \frac{dk}{dE} \right|_{E_0} x - \frac{t}{\hbar} + \left. \frac{d\phi_1}{dE} \right|_{E_0} = 0. \quad (3.93)$$

Ou seja

$$t_{\text{inc}}(x) = \hbar \left. \frac{dk}{dE} \right|_{E_0} x + \hbar \left. \frac{d\phi_1}{dE} \right|_{E_0}. \quad (3.94)$$

Na última expressão, enfatizamos sua dependência com respeito à posição. Como t_{inc} está associado à onda incidente, x , na última expressão, deve ser negativo.

Utilizando o método da fase estacionária nas integrais (3.89) e (3.90) e levando em consideração (3.91) e (3.92), encontramos:

$$\left. \frac{dk}{dE} \right|_{E_0} x + \frac{t}{\hbar} - \left. \frac{d\phi_1}{dE} \right|_{E_0} - \left. \frac{d\phi_R}{dE} \right|_{E_0} = 0, \quad (3.95)$$

$$\left. \frac{dk}{dE} \right|_{E_0} x - \frac{t}{\hbar} + \left. \frac{d\phi_1}{dE} \right|_{E_0} + \left. \frac{d\phi_T}{dE} \right|_{E_0} = 0. \quad (3.96)$$

Com isso, escrevemos:

$$t_{\text{ref}}(x) = -\hbar \left. \frac{dk}{dE} \right|_{E_0} x + \hbar \left. \frac{d\phi_1}{dE} \right|_{E_0} + \hbar \left. \frac{d\phi_R}{dE} \right|_{E_0}; \quad (3.97)$$

$$t_{\text{trans}}(x) = \hbar \left. \frac{dk}{dE} \right|_{E_0} x + \hbar \left. \frac{d\phi_1}{dE} \right|_{E_0} + \hbar \left. \frac{d\phi_T}{dE} \right|_{E_0}. \quad (3.98)$$

t_{ref} é válido para $x < 0$ e t_{trans} para $x > a$.

Os tempos (3.94), (3.97) e (3.98) são associados aos picos dos pacotes incidente, refletido e transmitido, respectivamente.

Podemos calcular alguns instantes importantes. Por exemplo, o instante de entrada do pico de pacote incidente na barreira:

$$t_e = t_{\text{inc}}(0) = \hbar \left. \frac{d\phi_1}{dE} \right|_{E_0}. \quad (3.99)$$

Outro instante de tempo de particular importância é o tempo de saída da barreira do pico transmitido:

$$t_s = t_{\text{trans}}(a) = \hbar \left. \frac{dk}{dE} \right|_{E_0} a + \hbar \left. \frac{d\phi_1}{dE} \right|_{E_0} + \hbar \left. \frac{d\phi_T}{dE} \right|_{E_0} \quad (3.100)$$

A diferença entre esses dois instantes de tempo pode ser definida como um tempo de tunelamento:

$$T_{\text{tun}}^f \equiv t_s - t_e = \hbar \left. \frac{dk}{dE} \right|_{E_0} a + \hbar \left. \frac{d\phi_T}{dE} \right|_{E_0}. \quad (3.101)$$

Se o potencial fosse identicamente nulo, a expressão para a onda incidente seria válida em todo o espaço e, nesse caso, o pico do pacote de ondas percorreria uma distância a num intervalo de tempo que chamaremos de $t_{\text{vácuo}}$ dado por:

$$t_{\text{vácuo}} = \hbar \left. \frac{dk}{dE} \right|_{E_0} a. \quad (3.102)$$

Com isso, podemos escrever (3.101) como

$$T_{\text{tun}}^f = t_{\text{vácuo}} + \Delta t, \quad (3.103)$$

onde Δt é chamado de *tempo de atraso* e está relacionado ao atraso sofrido pelo pacote devido à presença do potencial.²¹ De acordo com as últimas três expressões, ele é dado por:

$$\Delta t \equiv \hbar \left. \frac{d\phi_T}{dE} \right|_{E_0}. \quad (3.104)$$

O instante de saída da região do potencial do pico refletido é

$$t_{sr} = t_{\text{ref}}(0) = \hbar \left. \frac{d\phi_1}{dE} \right|_{E_0} + \hbar \left. \frac{d\phi_R}{dE} \right|_{E_0}. \quad (3.105)$$

A diferença entre t_{sr} e o tempo de entrada do pico do pacote incidente (3.99) é:

$$t_r \equiv t_{sr} - t_e = \hbar \left. \frac{d\phi_R}{dE} \right|_{E_0}. \quad (3.106)$$

Assim, vemos que o pico do pacote não é, em geral, refletido instantaneamente pelo potencial.

Os tempos (3.101) e (3.106) são chamados de *tempo de fase da onda transmitida* τ_f^T e *tempo de fase da onda refletida* τ_f^R :

²¹[33] apresenta uma revisão sobre tempo de atraso na Mecânica Quântica, incluindo trabalhos em tunelamento.

$$\tau_f^T \equiv T_{\text{tun}}^f = \hbar \left. \frac{dk}{dE} \right|_{E_0} a + \hbar \left. \frac{d\phi_T}{dE} \right|_{E_0} \quad (3.107)$$

$$\tau_f^R \equiv t_r = \hbar \left. \frac{d\phi_R}{dE} \right|_{E_0} \quad (3.108)$$

Por razões que ficarão claras mais adiante, além dos tempos (3.107) e (3.108), é conveniente definir:

$$\tilde{\tau}_f \equiv |R|^2 \tau_f^R + |T|^2 \tau_f^T. \quad (3.109)$$

3.2.3 O tempo de Büttiker e Landauer

Nesta e nas seguintes subseções apresentaremos duas definições de tempo de tunelamento que consideram o próprio sistema tunelante como um relógio quântico. O ponto essencial dessa análise é considerar interações extras e bem conhecidas entre a barreira e o sistema. O tempo de Büttiker e Landauer, cujas idéias centrais serão apresentadas nesta subseção, considera a interação entre o sistema e uma barreira oscilatória no tempo. O tempo de Larmor, objetivo da subseção seguinte, considera a interação de um sistema carregado dotado de spin atravessando uma barreira provida de um campo magnético. Cálculos explícitos para os dois casos serão apresentados quando estudarmos a barreira retangular.

Em 1982, Büttiker e Landauer publicaram um artigo no qual eles consideravam não mais uma barreira estática, mas um potencial que depende senoidalmente do tempo:²²

$$V(x, t) = V_0(x) + V_1(x) \cos(\omega t). \quad (3.110)$$

Assumimos que esse potencial somente seja não-nulo numa região finita do espaço.

Para que o fenômeno de tunelamento ocorra, a barreira $V_0(x)$ deve ser intransponível classicamente. Além disso, como a expressão acima deixa claro, $V_0(x)$ é uma barreira estática. $V_1(x)$ é a amplitude, assumida “pequena”, de uma oscilação no tempo. Mais tarde, deixaremos claro o que queremos dizer por “pequena”.

Supomos que o sistema quântico incidente possua uma certa energia E . Quando esse sistema incide na barreira ele interage com a perturbação

²²O artigo original de 1982 é [34]. Alguns anos mais tarde, eles publicaram um artigo com os cálculos omitidos na primeira versão [35].

$V_1(x) \cos(\omega t)$. Devido a essa interação, o sistema trocará quanta de energias $n\hbar\omega$ com a barreira. Aqui, n é um número inteiro. Dizemos “trocará” porque o sistema pode tanto emitir quanto absorver quanta com energias que sejam múltiplos de $\hbar\omega$.

Uma vez que o sistema que absorve um quantum de energia pode tunelar mais facilmente, no sentido que o módulo de seu coeficiente de tunelamento é maior, do que um que não absorva, é possível comparar os coeficientes de tunelamento entre esses dois casos e inferir-se um intervalo de tempo durante o qual aconteceu a interação entre o sistema e a perturbação $V_1(x) \cos(\omega t)$. Esse intervalo de tempo é chamado de *tempo de Büttiker e Landauer*.

3.2.4 O tempo de Larmor

Suponhamos um sistema quântico com spin $1/2$ cujo estado inicial seja²³

$$|\psi(0)\rangle = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix}, \quad (3.111)$$

com u_1 e u_2 dados por

$$u_1 = \cos(\theta/2)e^{-i\varphi/2}; \quad (3.112)$$

$$u_2 = \sin(\theta/2)e^{i\varphi/2}. \quad (3.113)$$

O estado (3.111) é um auto-estado do operador $\mathbf{S} \cdot \mathbf{n}$, sendo $\mathbf{S}$ o operador spin e $\mathbf{n}$ um versor definido como $\mathbf{n} = \sin(\theta) \cos(\varphi)\mathbf{e}_1 + \sin(\theta)\sin(\varphi)\mathbf{e}_2 + \cos(\theta)\mathbf{e}_3$, ou seja, $|\psi(0)\rangle$ é um auto-vetor da projeção do operador spin na direção definida por $\mathbf{n}$.

Uma vez que

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}, \quad (3.114)$$

com $\boldsymbol{\sigma}$ sendo o vetor formado pelas matrizes de Pauli

²³Estamos nos restringindo, nesta análise, apenas ao grau de liberdade relacionado ao spin do sistema.

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}; \quad (3.115)$$

$$\sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}; \quad (3.116)$$

$$\sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad (3.117)$$

vemos que

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{n} |\psi(0)\rangle = \frac{\hbar}{2} |\psi(0)\rangle. \quad (3.118)$$

Suponhamos, agora, que o sistema quântico seja eletricamente neutro, mas possua um momento magnético intrínseco $\mathbf{M}$. A relação entre os operadores momento magnético e spin é $\mathbf{M} = g\mathbf{S}$, sendo a constante de proporcionalidade g chamada de razão giromagnética. Além disso, supomos que um campo magnético externo $\mathbf{B}$ atue sobre esse sistema. Por simplicidade, assumimos esse campo externo constante e unidirecional, digamos no sentido positivo da direção z , isto é, $\mathbf{B} \equiv B\mathbf{e}_3$, com $B > 0$. Com isso, o Hamiltoniano de interação entre o sistema e o campo magnético será dado por [22]

$$H_s = -\mathbf{M} \cdot \mathbf{B} = -\omega_L S_z, \quad (3.119)$$

com $\omega_L \equiv gB$ sendo a frequência de Larmor.

Dessa forma, o estado num instante $t \geq 0$ pode ser calculado através de

$$|\psi(t)\rangle = U(t, 0) |\psi(0)\rangle. \quad (3.120)$$

Nesta equação, $U(t, 0)$ é o operador de evolução temporal do sistema:

$$U(t, 0) = e^{-iH_s t/\hbar}. \quad (3.121)$$

Com o auxílio das últimas três equações, podemos calcular o valor esperado do operador spin num instante de tempo $t \geq 0$:

$$\langle \psi(t) | \mathbf{S} | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | e^{-iS_z \omega_L t/\hbar} \mathbf{S} e^{iS_z \omega_L t/\hbar} | \psi(0) \rangle. \quad (3.122)$$

Utilizando o teorema de Baker-Hausdorff [21], encontramos:

$$\begin{aligned}
e^{-iS_z\omega_L t/\hbar} S_x e^{iS_z\omega_L t/\hbar} = & S_x - i\frac{\omega_L t}{\hbar} [S_z, S_x] + \frac{1}{2!} \left(-i\frac{\omega_L t}{\hbar}\right)^2 [S_z, [S_z, S_x]] + \\
& + \frac{1}{3!} \left(-i\frac{\omega_L t}{\hbar}\right)^3 [S_z, [S_z, [S_z, S_x]]] + \\
& + \frac{1}{4!} \left(-i\frac{\omega_L t}{\hbar}\right)^4 [S_z, [S_z, [S_z, [S_z, S_x]]]] + \dots \quad (3.123)
\end{aligned}$$

Utilizando a relação de comutação das componentes do operador spin:

$$[S_j, S_k] = i\hbar \sum_l \epsilon_{jkl} S_l, \quad (3.124)$$

onde ϵ_{jkl} é o tensor de Levi-Civita, a expressão (3.123) se torna:

$$\begin{aligned}
e^{-iS_z\omega_L t/\hbar} S_x e^{i\omega_L t/\hbar} = & \left[1 - \frac{(\omega_L t)^2}{2!} + \frac{(\omega_L t)^4}{4!} - \frac{(\omega_L t)^6}{6!} + \dots\right] S_x + \\
& + \left[\omega_L t - \frac{(\omega_L t)^3}{3!} + \frac{(\omega_L t)^5}{5!} - \frac{(\omega_L t)^7}{7!} + \dots\right] S_y \\
= & \cos(\omega_L t) S_x + \sin(\omega_L t) S_y. \quad (3.125)
\end{aligned}$$

Cálculos semelhantes revelam:

$$e^{-iS_z\omega_L t/\hbar} S_y e^{iS_z\omega_L t/\hbar} = \cos(\omega_L t) S_y - \sin(\omega_L t) S_x; \quad (3.126)$$

$$e^{-iS_z\omega_L t/\hbar} S_z e^{iS_z\omega_L t/\hbar} = S_z. \quad (3.127)$$

Portanto, utilizando as equações (3.125-3.127) em (3.122):

$$\langle\psi(t)|S_x|\psi(t)\rangle = \cos(\omega_L t)\langle\psi(0)|S_x|\psi(0)\rangle + \sin(\omega_L t)\langle\psi(0)|S_y|\psi(0)\rangle; \quad (3.128)$$

$$\langle\psi(t)|S_y|\psi(t)\rangle = \cos(\omega_L t)\langle\psi(0)|S_y|\psi(0)\rangle - \sin(\omega_L t)\langle\psi(0)|S_x|\psi(0)\rangle; \quad (3.129)$$

$$\langle\psi(t)|S_z|\psi(t)\rangle = \langle\psi(0)|S_z|\psi(0)\rangle. \quad (3.130)$$

Vemos, assim, que para conhecermos os valores esperados para as componentes do spin num instante $t > 0$, apenas precisamos calcular esses mesmos valores esperados no instante $t = 0$. Para esse fim, utilizamos as equações (3.111-3.117):

$$\begin{aligned}\langle \psi(0)|S_x|\psi(0)\rangle &= \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\frac{\varphi}{2}} & \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\frac{\varphi}{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\left(\frac{\varphi}{2}\right)} \\ \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\left(\frac{\varphi}{2}\right)} \end{bmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2} \sin(\theta) \cos(\varphi).\end{aligned}\quad (3.131)$$

Semelhantemente:

$$\langle \psi(0)|S_y|\psi(0)\rangle = \frac{\hbar}{2} \sin(\theta) \sin(\varphi); \quad (3.132)$$

$$\langle \psi(0)|S_z|\psi(0)\rangle = \frac{\hbar}{2} \cos(\theta). \quad (3.133)$$

Substituindo, então, os valores esperados (3.131-3.133) em (3.128-3.130), obtemos:

$$\langle \psi(t)|S_x|\psi(t)\rangle = \frac{\hbar}{2} \sin(\theta) \cos(\varphi - \omega_L t); \quad (3.134)$$

$$\langle \psi(t)|S_y|\psi(t)\rangle = \frac{\hbar}{2} \sin(\theta) \sin(\varphi - \omega_L t); \quad (3.135)$$

$$\langle \psi(t)|S_z|\psi(t)\rangle = \frac{\hbar}{2} \cos(\theta). \quad (3.136)$$

Observamos que os valores esperados para as componentes do spin realizam uma precessão em torno do eixo z , que é o eixo ao longo do qual o campo magnético é direcionado, com uma frequência angular ω_L . Essa precessão é conhecida como precessão de Larmor [24]. Uma de suas características é que ela depende explicitamente do intervalo de tempo durante o qual ocorreu a interação entre o sistema quântico e o campo magnético. Dessa forma, a precessão de Larmor pode ser utilizada como um relógio que mede o intervalo de tempo durante o qual o sistema estudado permaneceu sob influência do campo externo. Assim sendo, se construirmos uma barreira de potencial que permita o fenômeno de tunelamento, adicionarmos a essa barreira um campo magnético uniforme e utilizarmos como sistema tunelante um sistema eletricamente neutro, porém dotado de um momento magnético intrínseco, a precessão de Larmor nos fornece uma medição de quanto tempo o sistema permaneceu sob influência do campo magnético. Se o campo magnético for nulo fora da região da barreira, a precessão de Larmor fornecerá o intervalo de tempo durante o qual o sistema quântico permaneceu na região da barreira. Esse é o chamado *tempo de Larmor*.

Calcularemos o tempo de Larmor explicitamente para uma barreira retangular na seção seguinte.

3.3 Resultados não-relativísticos

Iniciaremos esta seção apresentando a relação entre os tempos de permanência estacionário e os tempos de fase. Logo após, calcularemos os tempos de tunelamento definidos na seção anterior para o caso de uma barreira de potencial retangular. Por fim, calcularemos esses tempos no limite de uma barreira opaca e apresentaremos o *efeito Hartman*.

3.3.1 Relação entre os tempos de permanência e de fase

Na seção anterior, definimos diversos tempos de tunelamento. Alguns deles envolvem características extras, como a presença de campos magnéticos ou campos elétricos oscilantes, além da barreira usual. Contudo, o fenômeno de tunelamento ocorre mesmo na ausência desses campos extras. Uma questão que naturalmente surge é se existe alguma relação entre os diversos tempos de tunelamento anteriormente definidos ou se, *pelo menos*, existe alguma relação entre os tempos de tunelamento que não dependem de características extras, como, por exemplo, o tempo de permanência e o tempo de fase. Esta questão é o centro da presente subseção.

Nos trabalhos mais antigos, acreditava-se que o tempo de permanência, que desconsidera se o sistema quântico é transmitido ou refletido pela barreira, deveria ser igual ao $\tilde{\tau}_f$ da equação (3.109) [11]. Essa questão só foi resolvida satisfatoriamente em 2003, quando Winful encontrou a relação correta entre o tempo de permanência e os tempos de fase [38].

As soluções independentes do tempo da equação de Schrödinger satisfazem:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi = E\psi. \quad (3.137)$$

As soluções dessa equação dependem das coordenadas espaciais, da energia e da forma específica do potencial, mas as escreveremos simplesmente como ψ , por questão de simplicidade de notação. Além disso, assumimos que o potencial $V(x)$ seja contínuo por partes e nulo para $x \leq 0$ e $x \geq a$. A derivada de (3.137) com respeito à energia é dada por:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) - E\right)\frac{\partial\psi}{\partial E} = \psi. \quad (3.138)$$

Multiplicando esta última expressão pelo complexo conjugado da solução, obtemos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi^*\frac{\partial^3\psi}{\partial x^2\partial E}+[V(x)-E]\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial E}=\psi^*\psi. \quad (3.139)$$

A equação conjugada à (3.137) é:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi^2}{\partial x^2}+[V(x)-E]\psi^*=0. \quad (3.140)$$

Multiplicando esta equação pela derivada da solução com relação à energia, temos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\frac{\partial\psi}{\partial E}+[V(x)-E]\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial E}=0. \quad (3.141)$$

Subtraindo (3.141) de (3.139), encontramos:

$$\begin{aligned} \psi^*\psi &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2} \frac{\partial\psi}{\partial E} - \psi^* \frac{\partial^3\psi}{\partial x^2\partial E} \right) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2} \frac{\partial\psi}{\partial E} + \frac{\partial\psi^*}{\partial x} \frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial E} - \frac{\partial\psi^*}{\partial x} \frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial E} - \psi^* \frac{\partial^3\psi}{\partial x^2\partial E} \right) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial\psi^*}{\partial x} \frac{\partial\psi}{\partial E} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi^* \frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial E} \right) \right] \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial\psi^*}{\partial x} \frac{\partial\psi}{\partial E} - \psi^* \frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial E} \right). \end{aligned} \quad (3.142)$$

Integrando esta expressão na região do potencial ($0 \leq x \leq a$):

$$\begin{aligned} \int_0^a \psi^*\psi dx &= \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^a \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial\psi^*}{\partial x} \frac{\partial\psi}{\partial E} - \psi^* \frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial E} \right) dx \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial x} \frac{\partial\psi}{\partial E} - \psi^* \frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial E} \right)_{x=a} + \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{\partial\psi^*}{\partial x} \frac{\partial\psi}{\partial E} - \psi^* \frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial E} \right)_{x=0} \right]. \end{aligned} \quad (3.143)$$

Resta-nos, agora, calcular os termos entre parênteses dessa expressão.

A solução de (3.137) para $x \leq 0$ será denotada por ψ_I e ela é dada por:

$$\psi_I = e^{ikx} + Re^{-ikx} = e^{ikx} + |R|e^{i(\phi_R - kx)}. \quad (3.144)$$

Conseqüentemente, temos

$$\psi_I^* = e^{-ikx} + |R|e^{-i(\phi_R - kx)}. \quad (3.145)$$

De uma forma semelhante, denotaremos por ψ_{III} a solução de (3.137) para $x > a$. Nessa região, a solução se escreve como:

$$\psi_{III} = T e^{ikx} = |T| e^{i(\phi_T + kx)}, \quad (3.146)$$

sendo

$$\psi_{III}^* = |T| e^{-i(\phi_T + kx)} \quad (3.147)$$

seu complexo conjugado.

Os fatores R e T que aparecem nas expressões (3.144-3.147) são, respectivamente, os coeficientes de reflexão e de transmissão.

A derivada de (3.146) com respeito à energia é:

$$\frac{\partial \psi_{III}}{\partial E} = \left[\frac{\partial |T|}{\partial E} + i|T| \frac{\partial}{\partial E}(\phi_T + kx) \right] e^{i(\phi_T + kx)}. \quad (3.148)$$

A derivada de (3.147) com respeito à posição é dada por:

$$\frac{\partial \psi_{III}^*}{\partial x} = -ik|T| e^{-i(\phi_T + kx)}. \quad (3.149)$$

O produto de (3.149) por (3.148) é:

$$\frac{\partial \psi_{III}^*}{\partial x} \frac{\partial \psi_{III}}{\partial E} = -i \frac{k}{2} \frac{\partial |T|^2}{\partial E} + k|T| \frac{\partial}{\partial E}(\phi_T + kx). \quad (3.150)$$

A derivada de (3.148) com respeito à posição é:

$$\frac{\partial^2 \psi_{III}}{\partial x \partial E} = \left[i|T| \frac{\partial k}{\partial E} + ik \frac{\partial |T|}{\partial E} - k|T| \frac{\partial}{\partial E}(\phi_T + kx) \right] e^{i(\phi_T + kx)}. \quad (3.151)$$

Multiplicando essa expressão por ψ_{III}^* [equação (3.147)]:

$$\psi_{III}^* \frac{\partial^2 \psi_{III}}{\partial x \partial E} = i|T|^2 \frac{\partial k}{\partial E} + i \frac{k}{2} \frac{\partial |T|^2}{\partial E} - k|T|^2 \frac{\partial}{\partial E}(\phi_T + kx). \quad (3.152)$$

Aqui, utilizamos a relação $|T| \partial |T| / \partial E = (1/2) \partial |T|^2 / \partial E$.

Subtraindo esta última expressão de (3.150), obtemos:

$$\frac{\partial \psi_{III}^*}{\partial x} \frac{\partial \psi_{III}}{\partial E} - \psi_{III}^* \frac{\partial^2 \psi_{III}}{\partial x \partial E} = 2k|T|^2 \frac{\partial}{\partial E}(\phi_T + kx) - ik \frac{\partial |T|^2}{\partial E} - i|T|^2 \frac{\partial k}{\partial E}. \quad (3.153)$$

Calculando esta equação no ponto $x = a$, obtemos:

$$\left(\frac{\partial \psi_{III}^*}{\partial x} \frac{\partial \psi_{III}}{\partial E} - \psi_{III}^* \frac{\partial^2 \psi_{III}}{\partial x \partial E} \right)_{x=a} = 2k|T|^2 \frac{\partial}{\partial E} (\phi_T + ka) - ik \frac{\partial |T|^2}{\partial E} + i|T|^2 \frac{\partial k}{\partial E}. \quad (3.154)$$

Devido à equação (3.107), temos:

$$\frac{\partial}{\partial E} (\phi_T + ka) = \frac{d\phi_T}{dE} + \frac{dk}{dE} a = \frac{\tau_f^T}{\hbar}. \quad (3.155)$$

Uma vez que ψ_{III} calculada em $x = a$ é igual à ψ calculada nesse ponto (de acordo com a definição de ψ_{III}), podemos simplesmente retirar o índice *III* de (3.154). Dessa forma, encontramos:

$$\left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial E} - \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial E} \right)_{x=a} = \frac{2k}{\hbar} \tau_f^T - ik \frac{\partial |T|^2}{\partial E} - i|T|^2 \frac{\partial k}{\partial E}. \quad (3.156)$$

que é o primeiro termo entre parênteses de (3.143). A fim de calcular o segundo termo, derivamos (3.144) com respeito à energia:

$$\frac{\partial \psi_I}{\partial E} = ix \frac{\partial k}{\partial E} e^{ikx} + \left[\frac{\partial |R|}{\partial E} + i|R| \frac{\partial}{\partial E} (\phi_R - kx) \right] e^{i(\phi_R - kx)}. \quad (3.157)$$

Derivamos, também, (3.145) com respeito à posição:

$$\frac{\partial \psi_I^*}{\partial x} = -ike^{-ikx} + ik|R|e^{-i(\phi_R - kx)}. \quad (3.158)$$

O produto dessas duas derivadas é dado por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi_I^*}{\partial x} \frac{\partial \psi_I}{\partial E} &= kx \frac{\partial k}{\partial E} + i \frac{k}{2} \frac{\partial |R|^2}{\partial E} - k|R|^2 \frac{\partial}{\partial E} (\psi_R - kx) + \left[-ik \frac{\partial |R|}{\partial E} + \right. \\ &\quad \left. + k|R| \frac{\partial}{\partial E} (\phi_R - kx) \right] e^{i(\phi_R - 2kx)} - kx|R| \frac{\partial k}{\partial E} e^{-i(\phi_R - 2kx)}. \end{aligned} \quad (3.159)$$

Derivando (3.157) com relação a x , obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi_I}{\partial x \partial E} &= \left[i \frac{\partial k}{\partial E} - kx \frac{\partial k}{\partial E} \right] e^{ikx} + \left[-i|R| \frac{\partial k}{\partial E} + -ik|R| \frac{\partial |R|}{\partial E} + \right. \\ &\quad \left. + k|R| \frac{\partial}{\partial E} (\phi_R - kx) \right] e^{i(\phi_R - kx)}. \end{aligned} \quad (3.160)$$

Multiplicando (3.145) por (3.160), temos:

$$\begin{aligned}
\psi_I^* \frac{\partial \psi_I}{\partial x \partial E} = & - [kx + i(|R|^2 - 1)] \frac{\partial k}{\partial E} - i \frac{k}{2} \frac{\partial |R|^2}{\partial E} + k|R|^2 \frac{\partial}{\partial E} (\phi_R - kx) + \\
& + \left[-i|R| \frac{\partial k}{\partial E} - ik \frac{\partial |R|}{\partial E} + k|R| \frac{\partial}{\partial E} (\phi_R - kx) \right] e^{i(\phi_R - 2kx)} + \\
& + \left[i|R| \frac{\partial k}{\partial E} - kx|R| \frac{\partial k}{\partial E} \right] e^{-i(\phi_R - 2kx)}. \quad (3.161)
\end{aligned}$$

Subtraindo (3.161) de (3.160):

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \psi_I^*}{\partial x} \frac{\partial \psi_I}{\partial E} - \psi_I^* \frac{\partial^2 \psi_I}{\partial x \partial E} = & [2kx + i(|R|^2 - 1)] \frac{\partial k}{\partial E} + ik \frac{\partial |R|^2}{\partial E} \\
& - 2k|R|^2 \frac{\partial}{\partial E} (\phi_R - kx) + \\
& + i \frac{\partial k}{\partial E} [|R| e^{i(\phi_R - 2kx)} - |R| e^{-i(\phi_R - 2kx)}]. \quad (3.162)
\end{aligned}$$

Mas

$$\begin{aligned}
|R| e^{i(\phi_R - 2kx)} - |R| e^{-i(\phi_R - 2kx)} &= |R| e^{i\phi_R} e^{-i2kx} - |R| e^{-i\phi_R} e^{i2kx} \\
&= R e^{-i2kx} - R^* e^{i2kx} = R e^{-i2kx} - (R e^{-i2kx})^* \\
&= 2i \text{Im}(R e^{-i2kx}) \quad (3.163)
\end{aligned}$$

Com isso, (3.162) se escreve como

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \psi_I^*}{\partial x} \frac{\partial \psi_I}{\partial E} - \psi_I^* \frac{\partial^2 \psi_I}{\partial x \partial E} = & [2kx + i(|R|^2 - 1)] \frac{\partial k}{\partial E} + ik \frac{\partial |R|^2}{\partial E} + \\
& - 2k|R|^2 \frac{\partial}{\partial E} (\phi_R - kx) - 2 \frac{\partial k}{\partial E} \text{Im}(R e^{-i2kx}) \quad (3.164)
\end{aligned}$$

Calculando esta expressão no ponto $x = 0$, abandonando o índice I (devido à definição de ψ_I) e utilizando a equação (3.108), encontramos:

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial E} - \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial E} \right)_{x=0} = & - 2 \frac{k}{\hbar} \tau_f^R + i(|R|^2 - 1) \frac{\partial k}{\partial E} + \\
& + ik \frac{\partial |R|^2}{\partial E} - 2 \frac{\partial k}{\partial E} \text{Im}(R). \quad (3.165)
\end{aligned}$$

Subtraindo (3.165) de (3.156):

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial E} - \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial E} \right)_{x=a} - \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial E} - \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial E} \right)_{x=0} = \\ & = 2 \frac{k}{\hbar} \tilde{\tau}_f + 2 \frac{\partial k}{\partial E} \text{Im}(R) - ik \frac{\partial}{\partial E} (|R|^2 + |T|^2) - i \frac{\partial k}{\partial E} (|R|^2 + |T|^2 - 1), \end{aligned} \quad (3.166)$$

onde usamos a definição (3.109). Quando não ocorre absorção ou emissão de partículas, ou seja, quando o potencial é real, pode-se mostrar, a través da conservação da norma da função de onda, a seguinte relação:

$$|R|^2 + |T|^2 = 1. \quad (3.167)$$

Nesses casos, a equação (3.166) se torna

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial E} - \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial E} \right)_{x=a} - \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial E} - \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial E} \right)_{x=0} = \\ & = 2 \frac{k}{\hbar} \tilde{\tau}_f + 2 \frac{\partial k}{\partial E} \text{Im}(R). \end{aligned} \quad (3.168)$$

Substituindo este resultado em (3.143), encontramos:

$$\int_0^a \psi^* \psi dx = \frac{\hbar^2}{2m} \left[2 \frac{k}{\hbar} \tilde{\tau}_f + 2 \frac{\partial k}{\partial E} \text{Im}(R) \right]. \quad (3.169)$$

De acordo com (3.72) e (3.144), o fluxo incidente é:

$$j_{inc} = \frac{\hbar k}{m}. \quad (3.170)$$

Dividindo a equação (3.169) por (3.170), obtemos:

$$\frac{\int_0^a \psi^* \psi dx}{j_{inc}} = \tilde{\tau} + \frac{\hbar}{k} \frac{\partial k}{\partial E} \text{Im}(R). \quad (3.171)$$

Mas o lado esquerdo dessa expressão é exatamente a definição do tempo de permanência estacionário [conferir a equação (3.73)]. Assim:

$$\tau_P = \tilde{\tau}_f - \tau_i, \quad (3.172)$$

onde τ_i é chamado de tempo de auto-interferência e, devido à definição de k , é dado por

$$\tau_i = -\frac{\hbar}{k} \frac{\partial k}{\partial E} \text{Im}(R) = -\frac{m}{\hbar k^2} \text{Im}(R). \quad (3.173)$$

A equação (3.172) relaciona, portanto, dois tempos de tunelamento definidos de maneiras muito diferentes, a saber, o tempo de permanência, definido em termos da probabilidade de se encontrar o sistema na região da barreira, e os tempos de fase, definidos em termos das derivadas da fase da função de onda com a energia.

Na subseção que segue calcularemos os tempos de tunelamento definidos até aqui para uma barreira retangular.

3.3.2 Barreira de potencial retangular

Suponhamos um potencial do tipo:

$$V(x) = \begin{cases} V, & 0 \leq x \leq a; \\ 0, & \text{nos outros casos.} \end{cases} \quad (3.174)$$

A fim de que o tunelamento ocorra, assumimos $E < V$ no que segue.

Com esse potencial, as soluções estacionárias da equação (3.70) são dadas por $\phi^{(E,V;a)}e^{-iEt}$, onde:

$$\phi^{(E,V;a)}(x) = \begin{cases} \phi_I^{(E,V;a)}(x), & x < 0; \\ \phi_{II}^{(E,V;a)}(x), & 0 < x < a; \\ \phi_{III}^{(E,V;a)}(x), & x > a; \end{cases} \quad (3.175)$$

e

$$\phi_I^{(E,V;a)}(x) = Ae^{ikx} + B^{-ikx}; \quad (3.176)$$

$$\phi_{II}^{(E,V;a)}(x) = Ce^{-\rho x} + De^{\rho x}; \quad (3.177)$$

$$\phi_{III}^{(E,V;a)}(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}. \quad (3.178)$$

Nessas expressões temos:

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}; \quad (3.179)$$

$$\rho = \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}. \quad (3.180)$$

As seis constantes que aparecem nas expressões (3.176-3.178), a saber, A , B , C , D , F e G , são perfeitamente determinadas. Utilizando as condições

de continuidade da função de onda e de sua derivada espacial nas fronteiras da barreira podemos escrever as seis constantes em função de duas delas. A escolha de quais constantes serão tomadas como independentes é arbitrária. Nossa escolha será A e G , pois estas constantes estão relacionadas com as ondas que incidem sobre a barreira. Portanto, conhecendo as ondas incidentes, conhecemos o estado quântico, isto é, podemos obter todas as informações a respeito do sistema. A especificação da condição inicial determina uma delas em função da outra (digamos, G em função de A). Por fim, a escolha de uma “normalização” determina a última constante. Assumimos como condição inicial que não haja onda incidente vinda da direita. Com isso, temos que $G = 0$. Para o que segue, a normalização é irrelevante, então deixaremos a constante A sem ser determinada.

De acordo com o apêndice C, podemos escrever:

$$B = \frac{(k^2 + \rho^2)\sinh(\rho a)}{d(k, \rho; a)}A; \quad (3.181)$$

$$C = \frac{k(k + i\rho)e^{\rho a}}{d(k, \rho; a)}A; \quad (3.182)$$

$$D = -\frac{k(k - i\rho)e^{-\rho a}}{d(k, \rho; a)}A; \quad (3.183)$$

$$F = \frac{i2k\rho e^{-ika}}{d(k, \rho; a)}A. \quad (3.184)$$

A função $d(k, \rho; a)$ é definida como:

$$d(k, \rho; a) = (k^2 - \rho^2)\sinh(\rho a) + i2k\rho \cosh(\rho a). \quad (3.185)$$

Tempo de permanência

Calcularemos o tempo de permanência estacionário para um sistema quântico na região da barreira de potencial retangular.

De acordo com a definição (3.73) e com a solução (3.175), o tempo de permanência do sistema quântico na região da barreira é:

$$\tau_P = \frac{\int_0^a |\phi^{(E,V;a)}(x)|^2 dx}{\dot{j}_{inc}} = \frac{\int_0^a |\phi_{II}^{(E,V;a)}(x)|^2 dx}{\dot{j}_{inc}}. \quad (3.186)$$

Ainda de acordo com (3.175), o fluxo incidente é dado por:²⁴

²⁴O leitor não deve esquecer que não há onda incidente vinda da esquerda ($G = 0$).

$$j_{inc} = \frac{\hbar k}{m} |A|^2. \quad (3.187)$$

$|\phi_{II}^{(E,V;a)}(x)|^2$ pode ser calculado com o auxílio das expressões (3.177), (3.182) e (3.183), resultando em

$$|\phi_{II}^{(E,V;a)}(x)|^2 = \frac{2k^2}{|d(k, \rho; a)|^2} \{ (k^2 + \rho^2) \cosh[2\rho(a-x)] + \rho^2 - k^2 \} |A|^2, \quad (3.188)$$

aqui, $|d(k, \rho; a)|^2$ é o quadrado do módulo de (3.185):

$$|d(k, \rho; a)|^2 = (k^2 + \rho^2)^2 \sinh^2(\rho a) + 4k^2 \rho^2. \quad (3.189)$$

Substituindo as equações (3.187), (3.188) e (3.189) em (3.186) e integrando, obtemos o tempo de permanência de um sistema quântico na região de uma barreira retangular:²⁵

$$\tau_P(k, \rho; a) = \frac{mk}{\hbar |d(k, \rho; a)|^2} \left[\left(\frac{k^2 + \rho^2}{\rho} \right) \sinh(2\rho a) - 2a(k^2 - \rho^2) \right]. \quad (3.190)$$

Tempo de fase

Uma vez que o fator F está relacionado com a onda transmitida, podemos comparar as expressões (3.82), (3.84) e (3.184) e escrever o coeficiente de tunelamento para a barreira retangular como:

$$T(E) = T(k, \rho; a) = \frac{i2k\rho e^{-ika}}{d(k, \rho; a)}, \quad (3.191)$$

sendo seu módulo e fase dados, respectivamente, por:

$$|T(k, \rho; a)| = \frac{2k\rho}{\sqrt{(k^2 + \rho^2)^2 \sinh^2(\rho a) + 4k^2 \rho^2}}; \quad (3.192)$$

$$\phi_T(k, \rho; a) = \text{tg}^{-1} \left[\left(\frac{k^2 - \rho^2}{2k\rho} \right) \text{tgh}(\rho a) \right] - ka. \quad (3.193)$$

Podemos calcular a derivada de (3.193) com respeito à energia através de:

²⁵O leitor deve notar que o fator $|A|^2$ é cancelado.

$$\frac{d\phi_T}{dE} = \frac{\partial\phi_T}{\partial k} \frac{dk}{dE} + \frac{\partial\phi_T}{\partial \rho} \frac{d\rho}{dE} + \frac{\partial\phi_T}{\partial a} \frac{da}{dE}. \quad (3.194)$$

Visto que a não depende da energia, o último termo da equação acima é nulo. As derivadas parciais com respeito a k e a ρ podem ser calculadas com o auxílio de (3.193), resultando em:

$$\begin{aligned} \frac{\partial\phi_T(k, \rho; a)}{\partial k} &= \frac{\rho(k^2 + \rho^2)\sinh(2\rho a)}{|d(k, \rho; a)|^2} - a; \\ \frac{\partial\phi_T(k, \rho; a)}{\partial \rho} &= \frac{-k}{|d(k, \rho; a)|^2} [(k^2 + \rho^2)\sinh(2\rho a) - 2\rho a(k^2 - \rho^2)] . \end{aligned} \quad (3.195)$$

Substituindo esses resultados em (3.194):

$$\begin{aligned} \frac{d\phi_T(k, \rho; a)}{dE} &= -\frac{dk}{dE}a + \frac{1}{|d(k, \rho; a)|^2} \left\{ (k^2 + \rho^2)\sinh(2\rho a) \left[\rho \frac{dk}{dE} + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - k \frac{d\rho}{dE} \right] - 2k\rho a(k^2 - \rho^2) \frac{d\rho}{dE} \right\} . \end{aligned} \quad (3.196)$$

Através das equações (3.107), (3.196), encontramos o tempo de tunelamento calculado pelo método da fase estacionária para uma barreira retangular:

$$\begin{aligned} T_{\text{tun}}^f(k, \rho; a) &= \frac{\hbar}{|d(k, \rho; a)|^2} \left\{ (k^2 + \rho^2)\sinh(2\rho a) \left[\rho \frac{dk}{dE} - k \frac{d\rho}{dE} \right] + \right. \\ &\quad \left. + 2k\rho a(k^2 - \rho^2) \frac{d\rho}{dE} \right\} . \end{aligned} \quad (3.197)$$

Das equações (3.179) e (3.180):

$$\frac{dk}{dE} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2E}} = \frac{m}{\hbar^2} \frac{\hbar}{\sqrt{2mE}} = \frac{m}{\hbar^2 k}; \quad (3.198)$$

$$\frac{d\rho}{dE} = \frac{-1}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2(V-E)}} = \frac{-m}{\hbar^2} \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V-E)}} = -\frac{m}{\hbar^2 \rho}. \quad (3.199)$$

Com isso, o tempo de tunelamento (3.197) se escreve como:

$$T_{\text{tun}}^f(k, \rho; a) = \frac{m}{\hbar |d(k, \rho; a)|^2} \left[\frac{(k^2 + \rho^2)^2}{k\rho} \sinh(2\rho a) - 2ka(k^2 - \rho^2) \right]. \quad (3.200)$$

Embora o tempo de fase associado à reflexão não seja um tempo de tunelamento, também o calcularemos para uma barreira retangular nesta seção.

A onda refletida é aquela associada à amplitude B em (3.176). Essa amplitude pode ser escrita em termos da amplitude da onda incidente através da relação (3.181). Por comparação à equação (3.83), podemos escrever o coeficiente de reflexão como:

$$\begin{aligned} R(E) = R(k, \rho; a) &= \frac{(k^2 + \rho^2) \sinh(\rho a)}{d(k, \rho; a)} \\ &= \frac{(k^2 + \rho^2) \sinh(\rho a)}{\sqrt{(k^2 + \rho^2)^2 \sinh^2(\rho a) + 4k^2 \rho^2}} e^{i\phi_R(k, \rho; a)}, \end{aligned} \quad (3.201)$$

onde a fase $\phi_R(k, \rho; a)$ é dada por:

$$\phi_R(k, \rho; a) = -\text{tg}^{-1} \left[\frac{2k\rho}{(k^2 - \rho^2) \text{tgh}(\rho a)} \right]. \quad (3.202)$$

Contudo, essa fase pode ser reescrita como:²⁶

$$\begin{aligned} \phi_R(k, \rho; a) &= \text{tg}^{-1} \left[\left(\frac{k^2 - \rho^2}{2k\rho} \right) \text{tgh}(\rho a) \right] + \frac{\pi}{2} \\ &= \phi_T(k, \rho; a) + ka + \frac{\pi}{2}. \end{aligned} \quad (3.204)$$

²⁶Sejam z_1 e z_2 dois números complexos. Podemos escrevê-los na forma polar: $z_j = |z_j|e^{i\phi_j}$, com $j = 1, 2$. O número z_3 , formado pelo produto de z_1 por z_2 se escreve como: $z_3 = z_1 z_2 = |z_1|e^{i\phi_1}|z_2|e^{i\phi_2} = |z_1||z_2|e^{i(\phi_1+\phi_2)}$. Dessa forma, identificamos $|z_3| = |z_1||z_2|$ e $\phi_3 = \phi_1 + \phi_2$.

Supomos, agora, $z_1 = i$ e $z_2 = x + iy$, onde x e y são números reais. Temos, com isso, $z_1 = e^{i\pi/2}$ e $z_2 = \sqrt{x^2 + y^2}e^{i\text{tg}^{-1}(y/x)}$. Como vimos, o produto entre tais números é dado por $z_3 = z_1 z_2 = \sqrt{x^2 + y^2}e^{i[\text{tg}^{-1}(y/x) + \pi/2]}$. Contudo, $z_3 = i(x + iy) = -y + ix$. Escrevendo este último resultado na forma polar, obtemos $z_3 = \sqrt{x^2 + y^2}e^{-i\text{tg}^{-1}(x/y)}$. Identificamos, assim, as fases

$$-\text{tg}^{-1} \left(\frac{x}{y} \right) = \text{tg}^{-1} \left(\frac{y}{x} \right) + \frac{\pi}{2}. \quad (3.203)$$

Com isso, o tempo de fase associado à componente refletida pela barreira (equação 3.108) se torna

$$\tau_f^R(k, \rho; a) = \hbar \frac{d\phi_T(k, \rho; a)}{dE} + \hbar \frac{dk}{dE} a \equiv T_{\text{tun}}^f(k, \rho; a). \quad (3.205)$$

Ou, segundo a equação (3.200):

$$\tau_f^R(k, \rho; a) = \frac{m}{\hbar |d(k, \rho; a)|^2} \left[\frac{(k^2 + \rho^2)^2}{k\rho} \sinh(2\rho a) - 2ka(k^2 - \rho^2) \right]. \quad (3.206)$$

Visto que²⁷ $T_{\text{tun}}^f = \tau_f^T$, para o caso de uma barreira retangular, $\tilde{\tau}_f$, dado pela equação (3.109), pode ser escrito como:

$$\tilde{\tau}_f(k, \rho; a) = (|T(k, \rho; a)|^2 + |R(k, \rho; a)|^2) T_{\text{tun}}^f(k, \rho; a). \quad (3.207)$$

Das esquações (3.192) e (3.201):

$$|T(k, \rho; a)|^2 + |R(k, \rho; a)|^2 = \frac{(k^2 + \rho^2)^2 \sinh(\rho a) + 4k^2 \rho^2}{(k^2 + \rho^2)^2 \sinh(\rho a) + 4k^2 \rho^2} = 1, \quad (3.208)$$

conforme antecipamos para um potencial real. Portanto,

$$\bar{\tau}_f(k, \rho; a) = T_{\text{tun}}^f(k, \rho; a). \quad (3.209)$$

O coeficiente de reflexão (3.201) pode ser escrito como:

$$R(k, \rho; a) = \frac{(k^2 + \rho^2) \sinh(\rho a)}{|d(k, \rho; a)|^2} [(k^2 - \rho^2) \sinh(\rho a) - i2k\rho \cosh(\rho a)]. \quad (3.210)$$

Vemos assim, que sua parte imaginária é dada por:

$$\text{Im}[R(k, \rho; a)] = -\frac{2k\rho(k^2 + \rho^2) \sinh(\rho a) \cosh(\rho a)}{|d(k, \rho; a)|^2} = -\frac{k\rho(k^2 + \rho^2) \sinh(2\rho a)}{|d(k, \rho; a)|^2}. \quad (3.211)$$

Estamos, agora, em condições de calcular o tempo de permanência estacionário utilizando a equação (3.172) que, devido à (3.205), para o caso da barreira retangular se torna:

²⁷Conferir equação (3.107).

$$\tau_P(k, \rho; a) = T_{\text{tun}}^f - \tau_i(k, \rho; a). \quad (3.212)$$

O termo de interferência pode ser calculado utilizando as relações (3.173) e (3.211):

$$\tau_i(k, \rho; a) = \frac{m}{\hbar |d(k, \rho; a)|^2} \frac{\rho}{k} (k^2 + \rho^2) \sinh(2\rho a). \quad (3.213)$$

Substituindo este resultado em (3.212) e utilizando (3.200), encontramos:

$$\tau_P(k, \rho; a) = \frac{mk}{\hbar |d(k, \rho; a)|^2} \left[\left(\frac{k^2 + \rho^2}{\rho} \right) \sinh(2\rho a) - 2a(k^2 - \rho^2) \right], \quad (3.214)$$

que é precisamente o resultado (3.190) obtido através da definição do tempo de permanência estacionário.

O tempo de Büttiker e Landauer

Apresentaremos, agora, os cálculos do tempo de tunelamento de Büttiker e Landauer para uma barreira retangular. Contudo, antes de considerarmos esse caso, é conveniente estudarmos a situação na qual, em vez de uma barreira, temos um potencial constante para todo o x somado com uma perturbação dependente do tempo.

Para isso, consideremos a equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_0(x, t) = H_0 \phi_0(x, t), \quad (3.215)$$

com o Hamiltoniano H_0 dado por

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V, \quad (3.216)$$

sendo V constante para todo x e todo t . A solução estacionária mais geral possível da equação (3.215) para uma certa energia $E < V$ é²⁸

$$\phi_0(x, t) = (Ce^{-\rho x} + De^{\rho x})e^{-iEt/\hbar}. \quad (3.217)$$

²⁸A solução (3.217) não é uma solução física, uma vez que $\lim_{|x| \rightarrow \infty} |\phi_0(x, t)|^2 = \infty$. Esse comportamento no infinito é devido ao fato do potencial V ser constante para todo x e procurarmos por soluções com energias inferiores a esse potencial. Contudo, no caso que estudaremos em seguida, esse potencial será nulo fora de uma região finita do espaço. A solução (3.217) será aceitável, então, na região na qual o potencial for não-nulo e não valerá fora dela.

A quantidade ρ que aparece nessa expressão é definida como:

$$\rho = \rho(E, V) \equiv \frac{\sqrt{2m(V - E)}}{\hbar}. \quad (3.218)$$

Se em vez do Hamiltoniano H_0 em (3.215) tivéssemos:

$$H = H_0 + H_1(t), \quad (3.219)$$

a solução (3.217) seria substituída por

$$\phi(x, t) = \phi_0(x, t) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H_1(t') dt' \right\}, \quad (3.220)$$

sendo t_0 uma constante arbitrária. Podemos verificar que $\phi(x, t)$ é a solução correta simplesmente substituindo (3.220) na equação:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(x, t) = H \phi(x, t). \quad (3.221)$$

Suponhamos, agora, que $H_1(t)$ seja dado por

$$H_1(t) = V_1 \cos(\omega t). \quad (3.222)$$

Com isso, a integral que aparece na exponencial de (3.220) se torna

$$\int_{t_0}^t V_1 \cos(\omega t') dt' = \frac{V_1}{\omega} \sin(\omega t) - \frac{V_1}{\omega} \sin(\omega t_0). \quad (3.223)$$

Uma vez que vetores do espaço de Hilbert que diferem entre si apenas por uma fase global representam o mesmo estado quântico,²⁹ podemos escrever a solução do problema com o Hamiltoniano H simplesmente como

$$\phi(x, t) = (C e^{-\rho x} + D e^{\rho x}) e^{-iEt/\hbar} \exp \left[-i \frac{V_1}{\hbar \omega} \sin(\omega t) \right]. \quad (3.224)$$

Embora (3.224) seja solução de (3.221), ela não está escrita numa forma conveniente. É desejável que a solução que inclui o potencial que varia senoidalmente no tempo seja escrita como uma superposição de estados com energias que sejam múltiplos de $\hbar\omega$. Isso pode ser feito expandindo-se a última exponencial de (3.224) em termos de $e^{-in\omega t}$ [36]:

$$\exp \left[-i \frac{V_1}{\hbar \omega} \sin(\omega t) \right] = \sum_{n=-\infty}^{\infty} B_n e^{-in\omega t}. \quad (3.225)$$

²⁹Referência [23].

A fim de determinarmos os coeficientes B_n , substituímos essa expansão em (3.224) e utilizamos o resultado na equação de Schrödinger (3.221). Fazendo isso, encontramos:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} n\hbar\omega B_n e^{-in\omega t} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_1 \cos(\omega t) B_n e^{-in\omega t}. \quad (3.226)$$

Escrevendo a função co-seno como

$$\cos(\omega t) = \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2}, \quad (3.227)$$

obtemos

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} n\hbar\omega B_n e^{-in\omega t} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\frac{V_1}{2} B_n e^{-i(n-1)\omega t} + \frac{V_1}{2} B_n e^{-i(n+1)\omega t} \right]. \quad (3.228)$$

Esta última expressão pode ser reescrita como

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} n\hbar\omega B_n e^{-in\omega t} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{V_1}{2} [B_{n+1} + B_{n-1}] e^{-in\omega t}. \quad (3.229)$$

Utilizando a independência linear das funções exponenciais, encontramos:

$$\frac{2n}{V_1/\hbar\omega} B_n = B_{n+1} + B_{n-1}, \quad (3.230)$$

que é a relação de recorrência para as funções de Bessel [37]. Assim, identificamos os coeficientes da expansão (3.225) com as funções de Bessel de $V_1/\hbar\omega$ de ordem n :

$$B_n = J_n \left(\frac{V_1}{\hbar\omega} \right). \quad (3.231)$$

Com isso, a solução (3.224) pode finalmente ser escrita em termos de uma superposição de estados que deixa evidente a troca de quanta de energia entre o potencial e o sistema estudado:

$$\phi(x, t) = (C e^{-\rho x} + D e^{\rho x}) e^{-iEt/\hbar} \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n \left(\frac{V_1}{\hbar\omega} \right) e^{-in\omega t}. \quad (3.232)$$

Podemos escrever a somatória dessa equação como:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n \left(\frac{V_1}{\hbar\omega} \right) e^{-in\omega t} = \sum_{n=0}^{\infty} J_n \left(\frac{V_1}{\hbar\omega} \right) e^{-in\omega t} + \sum_{n=1}^{\infty} J_{-n} \left(\frac{V_1}{\hbar\omega} \right) e^{in\omega t}. \quad (3.233)$$

No lado direito dessa expressão, temos sempre n inteiro e positivo. Assim, podemos expandir as funções de Bessel que aparecem ali em série de MacLauren [37]:

$$J_n \left(\frac{V_1}{\hbar\omega} \right) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s}{s!(n+s)!} \left(\frac{V_1}{2\hbar\omega} \right)^{n+2s}; \quad (3.234)$$

$$J_{-n} \left(\frac{V_1}{\hbar\omega} \right) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^{s+n}}{s!(n+s)!} \left(\frac{V_1}{2\hbar\omega} \right)^{n+2s}. \quad (3.235)$$

Substituindo essas expansões em (3.233) e considerando o caso em que $V_1/\hbar\omega \ll 1$, isto é, desprezando termos de ordem $(V_1/\hbar\omega)^m$, onde $m \geq 2$, temos:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n \left(\frac{V_1}{\hbar\omega} \right) \approx 1 + \frac{V_1}{2\hbar\omega} e^{-i\omega t} - \frac{V_1}{2\hbar\omega} e^{i\omega t}. \quad (3.236)$$

Nessa aproximação, a solução (3.232) se escreve como

$$\phi(x, t) \approx (Ce^{-\rho x} + De^{\rho x}) \left(1 + \frac{V_1}{2\hbar\omega} e^{-i\omega t} - \frac{V_1}{2\hbar\omega} e^{i\omega t} \right) e^{-iEt/\hbar}. \quad (3.237)$$

Essa expressão deixa claro que quando a amplitude V_1 do potencial dependente do tempo é muito menor do que um quantum de energia $\hbar\omega$, o sistema quântico pode absorver ou emitir no máximo um quantum durante a interação com esse potencial.

Estamos, agora, em condições de estudar o problema de uma barreira retangular que varia senoidalmente no tempo. Consideremos a equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H_{BL} \psi(x, t), \quad (3.238)$$

onde o Hamiltoniano é dado por

$$H_{BL} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{BL}(x, t). \quad (3.239)$$

O potencial que depende das coordenadas espaço-temporais é definido como:

$$V_{BL}(x, t) = \begin{cases} V + V_1 \cos(\omega t), & 0 < x < a; \\ 0, & \text{nos outros casos,} \end{cases} \quad (3.240)$$

aqui, V e V_1 são potenciais constantes no espaço e no tempo.

Vemos, assim, que para $x < 0$ e para $x > a$ temos a situação livre, enquanto que entre esses dois pontos temos a barreira que varia senoidalmente no tempo. Contudo, a situação na região da barreira é idêntica àquela estudada no início desta parte.

Se considerarmos o caso em que $V_1/\hbar\omega \ll 1$, conforme vimos em nosso estudo inicial, o sistema quântico que incide na barreira com uma dada energia $E < V$ interage com esta de tal forma que o seu estado final é uma superposição de uma onda plana com a mesma energia incidente com duas outras ondas planas, uma com energia $E + \hbar\omega$ e outra com $E - \hbar\omega$. Dessa forma, embora a onda incidente seja composta apenas por uma onda plana com uma energia bem definida, a onda refletida é uma superposição de três ondas planas com energias E , $E + \hbar\omega$ e $E - \hbar\omega$. Semelhantemente, a onda transmitida é também uma superposição de ondas planas com essas três energias. Portanto, as soluções nas regiões $x < 0$ e $x > a$ são, respectivamente:

$$\begin{aligned} \psi_I(x, t) = & A e^{i(kx - Et/\hbar)} + B e^{-i(kx + Et/\hbar)} + B_+ e^{-i[k_+ x + (E + \hbar\omega)t/\hbar]} + \\ & + B_- e^{-i[k_- x + (E - \hbar\omega)t/\hbar]}, \end{aligned} \quad (3.241)$$

$$\psi_{III}(x, t) = F e^{i(kx - Et/\hbar)} + F_+ e^{i[k_+ x - (E + \hbar\omega)t/\hbar]} + F_- e^{i[k_- x - (E - \hbar\omega)t/\hbar]}. \quad (3.242)$$

Nessas expressões, temos

$$k = k(E) \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}; \quad (3.243)$$

$$k_{\pm} \equiv k(E \pm \hbar\omega). \quad (3.244)$$

Entre $x = 0$ e $x = a$ a solução é dada, parcialmente, por (3.237). Uma vez que temos ondas planas com energias $E + \hbar\omega$ e $E - \hbar\omega$ fora da região da barreira, devemos acrescentar soluções estacionárias com essas energias dentro barreira à solução (3.237). Portanto, na região da barreira, a solução é dada por:

$$\begin{aligned}
\psi_{II}(x, t) = & (Ce^{-\rho x} + De^{\rho x}) \left(1 + \frac{V_1}{2\hbar\omega} e^{-i\omega t} - \frac{V_1}{2\hbar\omega} e^{i\omega t} \right) e^{-iEt/\hbar} + \\
& + (C_+ e^{-\rho_+ x} + D_+ e^{\rho_+ x}) e^{-i(E+\hbar\omega)t/\hbar} + \\
& + (C_- e^{-\rho_- x} + D_- e^{\rho_- x}) e^{-i(E-\hbar\omega)t/\hbar},
\end{aligned} \tag{3.245}$$

onde ρ é dado por (3.218) e

$$\rho_{\pm} \equiv \rho(E \pm \hbar\omega, V). \tag{3.246}$$

Utilizando as condições de continuidade da função de onda e de sua derivada espacial nos extremos da barreira, podemos escrever os coeficientes F_+ e F_- , ou seja, as amplitudes das componentes transmitidas associadas às energias $E + \hbar\omega$ e $E - \hbar\omega$, respectivamente, como:

$$\begin{aligned}
F_{\pm} = & \pm \left(\frac{V_1}{\hbar\omega} \right) \frac{F e^{i(k-k_{\pm})a}}{\det[M(k_{\pm}, \rho_{\pm})]} \left\{ (\rho_{\pm}^2 - k_{\pm}^2) \sinh(\rho_{\pm}a) + \right. \\
& \left. - (\rho^2 - k_{\pm}^2) \frac{\rho_{\pm}}{\rho} \sinh(\rho a) + i(k + k_{\pm}) \rho_{\pm} [\cosh(\rho a) - \cosh(\rho_{\pm}a)] \right\}.
\end{aligned} \tag{3.247}$$

Nesta expressão,

$$\det[M(k_{\pm}, \rho_{\pm})] = 2(\rho_{\pm}^2 - k_{\pm}^2) \sinh(\rho_{\pm}a) - i4k_{\pm} \rho_{\pm} \cosh(\rho_{\pm}a) \tag{3.248}$$

e F é a amplitude da onda transmitida da barreira estática, que se relaciona com a onda incidente através de (3.184).³⁰

Para o caso de uma barreira opaca, ou seja, quando $\rho a \gg 1$ e $\rho_{\pm} a \gg 1$, podemos escrever:

$$\sinh(\rho a) \approx \cosh(\rho a) \approx \frac{e^{\rho a}}{2}, \tag{3.249}$$

$$\sinh(\rho_{\pm} a) \approx \cosh(\rho_{\pm} a) \approx \frac{e^{\rho_{\pm} a}}{2}. \tag{3.250}$$

Nessa aproximação, a equação (3.248) se torna

$$\det[M(k_{\pm}, \rho_{\pm})] \approx (\rho_{\pm}^2 - ik_{\pm}^2)^2 e^{\rho_{\pm} a}. \tag{3.251}$$

³⁰Conferir o apêndice D.

Portanto, para uma barreira opaca, F_+ e F_- se escrevem como

$$F_{\pm} \approx \pm \left(\frac{V_1}{2\hbar\omega} \right) \frac{F e^{i(k-k_{\pm})a}}{(\rho_{\pm} - ik_{\pm})^2} \left\{ (\rho_{\pm}^2 - k_{\pm}k) - (\rho^2 - k_{\pm}k) \frac{\rho_{\pm}}{\rho} e^{(\rho-\rho_{\pm})a} + \right. \\ \left. + i(k + k_{\pm})\rho_{\pm} [e^{(\rho-\rho_{\pm})a} - 1] \right\}, \quad (3.252)$$

ou

$$F_{\pm} \approx \mp \left(\frac{V_1}{2\hbar\omega} \right) \frac{F e^{i(k-k_{\pm})a}}{(\rho_{\pm} - ik_{\pm})^2} \left\{ \left[(\rho^2 - k_{\pm}k) \frac{\rho_{\pm}}{\rho} - i(k + k_{\pm})\rho_{\pm} \right] e^{(\rho-\rho_{\pm})a} + \right. \\ \left. - [(\rho_{\pm}^2 - k_{\pm}k) - i(k + k_{\pm})\rho_{\pm}] \right\}. \quad (3.253)$$

Suponhamos, agora, que a energia E da componente incidente da função de onda do sistema quântico, assim como a diferença entre o potencial V e essa energia, sejam muito maiores do que a energia de um quantum trocado durante a interação do sistema com a barreira dependente do tempo. Formalmente, consideramos $\hbar\omega/E \ll 1$ e $\hbar\omega/(V - E) \ll 1$. Assim, devido às expressões (3.218), (3.243), (3.244) e (3.246), podemos escrever, nessa aproximação:

$$k_{\pm} \approx k \pm \frac{m\omega}{\hbar k}; \quad (3.254)$$

$$\rho_{\pm} \approx \rho \mp \frac{m\omega}{\hbar\rho}. \quad (3.255)$$

Mas nessa ordem de aproximação, temos:

$$\frac{\rho_{\pm}}{\rho} \approx 1; \quad (3.256)$$

$$k_{\pm}k \approx k_{\pm}^2 \quad (3.257)$$

$$(k + k_{\pm})\rho_{\pm} \approx 2k_{\pm}\rho_{\pm}. \quad (3.258)$$

Portanto,

$$F_{\pm} \approx \mp \left(\frac{V_1}{2\hbar\omega} \right) \frac{F e^{i(k_{\pm} \mp \frac{m\omega}{\hbar k} - k_{\pm})\frac{a}{2}}}{(\rho_{\pm} - ik_{\pm})^2} \left[(\rho_{\pm}^2 - k_{\pm}^2 - i2k_{\pm}\rho_{\pm}) e^{(\rho_{\pm} \pm \frac{m\omega}{\hbar\rho} - \rho_{\pm})a} + \right. \\ \left. - (\rho_{\pm}^2 - k_{\pm}^2 - i2k_{\pm}\rho_{\pm}) \right] = \\ = \mp \left(\frac{V_1}{2\hbar\omega} \right) \frac{F e^{\mp i \frac{m\omega}{\hbar k} \frac{a}{2}}}{(\rho_{\pm} - ik_{\pm})^2} (\rho_{\pm} - ik_{\pm})^2 \left(e^{\pm \omega \frac{ma}{\hbar\rho}} - 1 \right) = \\ = \mp \left(\frac{V_1}{2\hbar\omega} \right) F e^{\pm i \frac{m\omega}{\hbar k} \frac{a}{2}} (e^{\pm \omega \tau_{BL}} - 1). \quad (3.259)$$

Onde τ_{BL} é o tempo de tunelamento de Büttiker e Landauer para uma barreira retangular opaca, dado por:

$$\tau_{BL} \equiv \frac{ma}{\hbar\rho}. \quad (3.260)$$

Dividindo a expressão (3.259) pela amplitude da onda incidente, encontramos os coeficientes de tunelamento associados às energias $E \pm \hbar\omega$, escritos aqui como $T_{\pm}$ em termos do coeficiente de tunelamento T da barreira estática:

$$T_{\pm} \equiv \frac{F_{\pm}}{A} \approx \mp \left(\frac{V_1}{2\hbar\omega} \right) T e^{\pm i \frac{m\omega}{\hbar\rho} \frac{a}{2}} (e^{\pm\omega\tau_{BL}} - 1). \quad (3.261)$$

Dessa forma,

$$|T_{\pm}|^2 \approx \left(\frac{V_1}{2\hbar\omega} \right)^2 |T|^2 (e^{\pm\omega\tau_{BL}} - 1)^2. \quad (3.262)$$

Observamos que

$$\begin{aligned} \frac{|T_+|^2 - |T_-|^2}{|T_+|^2 + |T_-|^2} &\approx \frac{(e^{\omega\tau_{BL}} - 1)^2 - (e^{-\omega\tau_{BL}} - 1)^2}{(e^{\omega\tau_{BL}} - 1)^2 + (e^{-\omega\tau_{BL}} - 1)^2} = \\ &= \frac{(e^{\omega\tau_{BL}} - e^{-\omega\tau_{BL}})(e^{\omega\tau_{BL}} + e^{-\omega\tau_{BL}} - 2)}{(e^{\omega\tau_{BL}} + e^{-\omega\tau_{BL}})(e^{\omega\tau_{BL}} + e^{-\omega\tau_{BL}} - 2)} = \text{tgh}(\omega\tau_{BL}). \end{aligned} \quad (3.263)$$

Ou seja,

$$\tau_{BL} \approx \frac{1}{\omega} \text{tgh}^{-1} \left(\frac{|T_+|^2 - |T_-|^2}{|T_+|^2 + |T_-|^2} \right). \quad (3.264)$$

Este resultado mostra que o tempo de tunelamento de Büttiker e Landauer para uma barreira retangular opaca, na aproximação na qual a amplitude do potencial dependente do tempo é muito menor do que um quantum de energia trocado entre o sistema e a barreira, pode ser calculado simplesmente conhecendo-se os coeficientes de tunelamento associados às componentes com energias $E \pm \hbar\omega$.

O tempo de Larmor

Conforme vimos na subseção (3.2.4), é possível medir o tempo de interação entre um sistema com spin e um campo magnético através da precessão de Larmor. Finalizamos aquela subseção afirmando que utilizando um sistema tunelante dotado de momento magnético e uma barreira de potencial que

apresenta um campo magnético, deve ser possível medir o tempo de tunelamento ou, mais precisamente, o intervalo de tempo durante o qual o sistema permanece na região da barreira, utilizando essa precessão. Esse tempo recebe o nome de tempo de Larmor e o calcularemos nesta etapa para uma barreira retangular.

Seja a equação de Schrödinger para uma partícula de spin 1/2:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_L(x) \right] \psi, \quad (3.265)$$

com

$$V_L(x) = \begin{cases} V - \omega_L S_z, & 0 < x < a; \\ 0, & \text{nos outros casos.} \end{cases} \quad (3.266)$$

Nesta expressão, S_z é o operador spin na direção z e ω_L é a frequência de Larmor, definida na subseção (3.2.4).

Esse potencial representa uma barreira retangular usual adicionada a um campo magnético uniforme na direção z , mas apenas não-nulo entre $0 < x < a$, cuja interação com o sistema de spin 1/2 é dada pelo hamiltoniano de interação (3.119).

A solução independente do tempo de (3.265) se escreve como

$$\psi_1(x) = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} e^{ikx} + \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix} e^{-ikx}, \quad (3.267)$$

para $x < 0$;

$$\psi_2(x) = \begin{pmatrix} C_1 e^{-\rho_1 x} \\ C_2 e^{-\rho_2 x} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} D_1 e^{\rho_1 x} \\ D_2 e^{\rho_2 x} \end{pmatrix}, \quad (3.268)$$

para $0 < x < a$ e, finalmente, como

$$\psi_3(x) = \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \end{pmatrix} e^{ikx}, \quad (3.269)$$

para $x > a$. Nessas expressões, temos

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}; \quad (3.270)$$

$$\rho_1 = \frac{\sqrt{2m(V - E - \frac{\hbar\omega_L}{2})}}{\hbar}; \quad (3.271)$$

$$\rho_2 = \frac{\sqrt{2m(V - E + \frac{\hbar\omega_L}{2})}}{\hbar}. \quad (3.272)$$

Uma vez que o potencial apresenta descontinuidades do tipo salto em $x = 0$ e $x = a$ e a equação (3.265) é de segunda ordem na derivada com respeito a x , temos que $\psi(x)$ e sua derivada espacial devem ser funções contínuas nos extremos da barreira. Essas condições levam ao seguinte conjunto de equações:

$$A_j + B_j = C_j + D_j; \quad (3.273)$$

$$ik(A_j - B_j) = -\rho_j(C_j - D_j); \quad (3.274)$$

$$C_j e^{-\rho_j a} + D_j e^{\rho_j a} = F_j e^{ika}; \quad (3.275)$$

$$-\rho_j(C_j e^{-\rho_j a} - D_j e^{\rho_j a}) = ik F_j e^{ika}, \quad (3.276)$$

$$(3.277)$$

com $j = 1, 2$.

Este conjunto de equações é semelhante àquele que encontramos quando estudamos o problema de tunelamento com a barreira retangular usual. Para notarmos isso, basta fazermos as seguintes trocas: $A \rightarrow A_j$, $B \rightarrow B_j$ e assim por diante, $G = 0$ e $\tilde{k} = i\rho_j$.³¹ Portanto, temos equações similares às (3.181-3.184):

$$B_j = \frac{(k^2 + \rho_j^2) \sinh(\rho_j a)}{d(k, \rho_j; a)} A_j; \quad (3.278)$$

$$C_j = \frac{k(k + i\rho_j) e^{\rho_j a}}{d(k, \rho_j; a)} A_j; \quad (3.279)$$

$$D_j = -\frac{k(k - i\rho_j) e^{-\rho_j a}}{d(k, \rho_j; a)} A_j; \quad (3.280)$$

$$F_j = \frac{i2k\rho_j e^{-ika}}{d(k, \rho_j; a)} A_j. \quad (3.281)$$

Observamos que as componentes com índice 1 independem daquelas com índice 2 e vice-versa. Podemos, assim, definir os coeficientes de tunelamento e de transmissão para cada índice como

$$T(k, \rho_j; a) \equiv \frac{F_j}{A_j}; \quad (3.282)$$

$$R(k, \rho_j; a) \equiv \frac{B_j}{A_j}, \quad (3.283)$$

³¹Conferir o apêndice C, especialmente as equações (C.11-C.14).

sendo seus módulos e fases dados por

$$|T(k, \rho_j; a)| = \frac{2k\rho_j}{|d(k, \rho_j; a)|}; \quad (3.284)$$

$$|R(k, \rho_j; a)| = \frac{(k^2 + \rho_j^2)\sinh(\rho_j a)}{|d(k, \rho_j; a)|}; \quad (3.285)$$

$$\phi_T(k, \rho_j; a) = \phi_j - ka; \quad (3.286)$$

$$\phi_R(k, \rho_j; a) = \phi_j + \frac{\pi}{2}. \quad (3.287)$$

Nestas expressões, definimos as fases:

$$\phi_j \equiv \text{tg}^{-1} \left[\left(\frac{k^2 - \rho_j^2}{2k\rho_j} \right) \text{tgh}(\rho_j a) \right]. \quad (3.288)$$

Com o auxílio dessas expressões, podemos reescrever as equações (3.278) e (3.281) como:

$$B_j = |R(k, \rho_j; a)| e^{i\frac{\pi}{2}} e^{i\phi_j} A_j; \quad (3.289)$$

$$F_j = |T(k, \rho_j; a)| e^{ika} e^{i\phi_j} A_j. \quad (3.290)$$

Faremos, agora, a aproximação de que a quantidade de energia $\hbar\omega_L$ seja muito menor do que a diferença entre a altura da barreira e a energia do sistema, ou seja, $\hbar\omega_L/(V - E) \ll 1$. Uma vez que a frequência de Larmor é relacionada com o campo magnético externo através de $\omega_L = gB$, vemos que essa aproximação significa que o campo magnético é muito pequeno quando comparado à quantidade $(V - E)/(\hbar g)$. Em primeira ordem na quantidade $\hbar\omega_L/(V - E)$, essa aproximação leva a

$$\rho_1 \approx \rho - \frac{m\omega_L}{2\hbar\rho}; \quad (3.291)$$

$$\rho_2 \approx \rho + \frac{m\omega_L}{2\hbar\rho}, \quad (3.292)$$

com

$$\rho \equiv \frac{\sqrt{2m(V - E)}}{\hbar}. \quad (3.293)$$

Em primeira ordem na quantidade $m\omega_L/(\hbar\rho)$, temos

$$|T(k, \rho_1; a)|^2 \approx \left| T\left(k, \rho - \frac{m\omega_L}{2\hbar\rho}; a\right) \right|^2 \approx |T(k, \rho; a)|^2 - \frac{\partial |T(k, \rho; a)|^2}{\partial \rho} \frac{m\omega_L}{2\hbar\rho}; \quad (3.294)$$

$$|R(k, \rho_1; a)|^2 \approx \left| R\left(k, \rho - \frac{m\omega_L}{2\hbar\rho}; a\right) \right|^2 \approx |R(k, \rho; a)|^2 - \frac{\partial |R(k, \rho; a)|^2}{\partial \rho} \frac{m\omega_L}{2\hbar\rho}; \quad (3.295)$$

$$|T(k, \rho_2; a)|^2 \approx \left| T\left(k, \rho + \frac{m\omega_L}{2\hbar\rho}; a\right) \right|^2 \approx |T(k, \rho; a)|^2 + \frac{\partial |T(k, \rho; a)|^2}{\partial \rho} \frac{m\omega_L}{2\hbar\rho}; \quad (3.296)$$

$$|R(k, \rho_2; a)|^2 \approx \left| R\left(k, \rho + \frac{m\omega_L}{2\hbar\rho}; a\right) \right|^2 \approx |R(k, \rho; a)|^2 + \frac{\partial |R(k, \rho; a)|^2}{\partial \rho} \frac{m\omega_L}{2\hbar\rho}. \quad (3.297)$$

Portanto, nessa mesma ordem, temos

$$|T(k, \rho_1; a)| |T(k, \rho_2; a)| \approx |T(k, \rho; a)|^2; \quad (3.298)$$

$$|R(k, \rho_1; a)| |R(k, \rho_2; a)| \approx |R(k, \rho; a)|^2. \quad (3.299)$$

Segundo as equações (3.278-3.281), conhecendo-se a onda incidente, isto é, conhecendo-se A_1 e A_2 , podemos calcular todas as demais envolvidas no problema. Faremos uma escolha para a onda incidente que facilite a comparação com os resultados obtidos na seção (3.2.4). Escolhemos o espinor associado à componente incidente como sendo (3.111), ou seja, $A_j = u_j$, sendo u_1 e u_2 definidos pelas equações (3.112) e (3.113).

Podemos, agora, calcular os valores esperados para as componentes do spin do sistema. Inicialmente, calcularemos esses valores esperados para o estado relacionado com a onda transmitida através da barreira. De acordo com as equações, (3.269) e (3.290), temos, para esse estado:

$$|\psi_t\rangle = \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |T(k, \rho_1; a)| e^{i\phi_1} A_1 \\ |T(k, \rho_2; a)| e^{i\phi_2} A_2 \end{pmatrix} e^{-ika}. \quad (3.300)$$

Esse estado não está normalizado. Portanto, o valor esperado para a componente k do operador spin deve ser calculado através da equação

$$\langle S_k \rangle_t \equiv \frac{\langle \psi_t | S_k | \psi_t \rangle}{\langle \psi_t | \psi_t \rangle}. \quad (3.301)$$

Utilizando as relações (3.114-3.115) e a escolha que fizemos para A_1 e A_2 , vemos que:

$$\langle \psi_t | S_x | \psi_t \rangle = \frac{\hbar}{2} |T(k, \rho_1; a)| |T(k, \rho_2; a)| \sin(\theta) \cos(\phi_2 - \phi_1 + \varphi). \quad (3.302)$$

Com a aproximação (3.298), ficamos com

$$\langle \psi_t | S_x | \psi_t \rangle \approx \frac{\hbar}{2} |T(k, \rho; a)|^2 \sin(\theta) \cos(\phi_2 - \phi_1 + \varphi) \quad (3.303)$$

Utilizando (3.294), (3.296) e (3.300), calculamos $\langle \psi_t | \psi_t \rangle$:

$$\langle \psi_t | \psi_t \rangle \approx |T(k, \rho; a)|^2 - \frac{\partial |T(k, \rho; a)|^2}{\partial \rho} \frac{m\omega_L}{2\hbar\rho} \cos(\theta). \quad (3.304)$$

Das equações (3.301), (3.303) e (3.304), encontramos o valor esperado para a componente x do spin para a onda transmitida:

$$\langle S_x \rangle_t \approx \frac{\hbar}{2} \frac{|T(k, \rho; a)|^2 \sin(\theta) \cos(\phi_2 - \phi_1 + \varphi)}{\left[|T(k, \rho; a)|^2 - \frac{\partial |T(k, \rho; a)|^2}{\partial \rho} \frac{m\omega_L}{2\hbar\rho} \cos(\theta) \right]}. \quad (3.305)$$

Realizando cálculos similares, encontramos:

$$\langle \psi_t | S_y | \psi_t \rangle \approx \frac{\hbar}{2} |T(k, \rho; a)|^2 \sin(\theta) \sin(\phi_2 - \phi_1 + \varphi); \quad (3.306)$$

$$\langle \psi_t | S_z | \psi_t \rangle \approx \frac{\hbar}{2} \left[|T(k, \rho; a)|^2 \cos(\theta) - \frac{\partial |T(k, \rho; a)|^2}{\partial \rho} \frac{m\omega_L}{2\hbar\rho} \right]; \quad (3.307)$$

$$\langle S_y \rangle_t \approx \frac{\hbar}{2} \frac{|T(k, \rho; a)|^2 \sin(\theta) \sin(\phi_2 - \phi_1 + \varphi)}{\left[|T(k, \rho; a)|^2 - \frac{\partial |T(k, \rho; a)|^2}{\partial \rho} \frac{m\omega_L}{2\hbar\rho} \cos(\theta) \right]}; \quad (3.308)$$

$$\langle S_z \rangle_t \approx \frac{\hbar}{2} \left[\frac{|T(k, \rho; a)|^2 \cos(\theta) - \frac{\partial |T(k, \rho; a)|^2}{\partial \rho} \frac{m\omega_L}{2\hbar\rho}}{\left[|T(k, \rho; a)|^2 - \frac{\partial |T(k, \rho; a)|^2}{\partial \rho} \frac{m\omega_L}{2\hbar\rho} \cos(\theta) \right]} \right]. \quad (3.309)$$

O estado de spin correspondente à componente refletida pela barreira, segundo (3.267) e (3.289), é

$$|\psi_r\rangle = \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |R(k, \rho_1; a)| e^{i\phi_1} A_1 \\ |R(k, \rho_2; a)| e^{i\phi_2} A_2 \end{pmatrix} e^{i\frac{\pi}{2}}. \quad (3.310)$$

Como esse estado também não é normalizado, o valor esperado da componente k do spin deve ser dado por

$$\langle S_k \rangle_r \equiv \frac{\langle \psi_r | S_k | \psi_r \rangle}{\langle \psi_r | \psi_r \rangle}. \quad (3.311)$$

Cálculos semelhantes àqueles feitos para o estado de spin correspondente à onda transmitida, levando-se em consideração as aproximações (3.295), (3.297) e (3.299), revelam:

$$\langle \psi_r | \psi_r \rangle \approx |R(k, \rho; a)|^2 - \frac{\partial |R(k, \rho; a)|^2}{\partial \rho} \frac{m\omega_L}{2\hbar\rho} \cos(\theta); \quad (3.312)$$

$$\langle \psi_r | S_x | \psi_r \rangle \approx \frac{\hbar}{2} |R(k, \rho; a)|^2 \sin(\theta) \cos(\phi_2 - \phi_1 + \varphi); \quad (3.313)$$

$$\langle \psi_r | S_y | \psi_r \rangle \approx \frac{\hbar}{2} |R(k, \rho; a)|^2 \sin(\theta) \sin(\phi_2 - \phi_1 + \varphi); \quad (3.314)$$

$$\langle \psi_r | S_z | \psi_r \rangle \approx \frac{\hbar}{2} \left[|R(k, \rho; a)|^2 \cos(\theta) - \frac{\partial |R(k, \rho; a)|^2}{\partial \rho} \frac{m\omega_L}{2\hbar\rho} \right]. \quad (3.315)$$

Utilizando estes resultados em (3.311), encontramos os valores esperados para as componentes do spin para o estado associado à onda refletida pela barreira:

$$\langle S_x \rangle_r \approx \frac{\hbar}{2} \frac{|R(k, \rho; a)|^2 \sin(\theta) \cos(\phi_2 - \phi_1 + \varphi)}{\left[|R(k, \rho; a)|^2 - \frac{\partial |R(k, \rho; a)|^2}{\partial \rho} \frac{m\omega_L}{2\hbar\rho} \cos(\theta) \right]}; \quad (3.316)$$

$$\langle S_y \rangle_r \approx \frac{\hbar}{2} \frac{|R(k, \rho; a)|^2 \sin(\theta) \sin(\phi_2 - \phi_1 + \varphi)}{\left[|R(k, \rho; a)|^2 - \frac{\partial |R(k, \rho; a)|^2}{\partial \rho} \frac{m\omega_L}{2\hbar\rho} \cos(\theta) \right]}; \quad (3.317)$$

$$\langle S_z \rangle_r \approx \frac{\hbar}{2} \frac{\left[|R(k, \rho; a)|^2 \cos(\theta) - \frac{\partial |R(k, \rho; a)|^2}{\partial \rho} \frac{m\omega_L}{2\hbar\rho} \right]}{\left[|R(k, \rho; a)|^2 - \frac{\partial |R(k, \rho; a)|^2}{\partial \rho} \frac{m\omega_L}{2\hbar\rho} \cos(\theta) \right]}. \quad (3.318)$$

Definamos, agora, para cada componente do spin, a quantidade:

$$\langle S_k \rangle_s \equiv \frac{\langle \psi_t | \psi_t \rangle \langle S_k \rangle_t + \langle \psi_r | \psi_r \rangle \langle S_k \rangle_r}{\langle \psi_t | \psi_t \rangle + \langle \psi_r | \psi_r \rangle}. \quad (3.319)$$

$\langle S_k \rangle_s$, conforme foi definida, é a média ponderada dos valores esperados para a componente k do spin nos estados associados às ondas que saem da barreira, isto é, a onda transmitida e a refletida. Devido às definições (3.301) e (3.311), o numerador do lado direito de (3.319) é simplesmente $\langle \psi_t | S_k | \psi_t \rangle + \langle \psi_r | S_k | \psi_r \rangle$. Além disso, devido às expressões (3.304) e (3.312), encontramos, para o denominador

$$\begin{aligned}
\langle \psi_t | \psi_t \rangle + \langle \psi_r | \psi_r \rangle &\approx |T(k, \rho; a)|^2 + |R(k, \rho; a)|^2 + \\
&- \frac{\partial}{\partial \rho} (|T(k, \rho; a)|^2 + |R(k, \rho; a)|^2) \frac{m\omega}{2\hbar\rho} \cos(\theta) = \\
&= 1,
\end{aligned} \tag{3.320}$$

onde utilizamos o resultado (3.208). Com isso, (3.319) se torna

$$\langle S_k \rangle_s \approx \langle \psi_t | S_k | \psi_t \rangle + \langle \psi_r | S_k | \psi_r \rangle. \tag{3.321}$$

Utilizando as relações (3.208), (3.303), (3.306), (3.307), (3.313), (3.314) e (3.315), obtemos:

$$\langle S_x \rangle_s \approx \frac{\hbar}{2} \sin(\theta) \cos(\phi_2 - \phi_1 + \varphi); \tag{3.322}$$

$$\langle S_y \rangle_s \approx \frac{\hbar}{2} \sin(\theta) \sin(\phi_2 - \phi_1 + \varphi); \tag{3.323}$$

$$\langle S_z \rangle_s \approx \frac{\hbar}{2} \cos(\theta). \tag{3.324}$$

Estas expressões indicam uma precessão dos valores esperados para o spin em torno do eixo z , que foi o eixo escolhido para a orientação do campo magnético na região da barreira, dependente do parâmetro $\phi_2 - \phi_1$. Elas têm as mesmas formas das equações que apresentam a precessão de Larmor encontradas na subseção (3.2.4). Comparando (3.322-3.324) com (3.134-3.136), identificamos o tempo de Larmor para uma barreira retangular:

$$\tau_L \approx \frac{\phi_1 - \phi_2}{\omega_L}. \tag{3.325}$$

Podemos calcular τ_L utilizando a definição das fases ϕ_1 e ϕ_2 (equação 3.288). Contudo, devemos lembrar que a relação (3.325) foi deduzida utilizando-se as aproximações (3.291) e (3.292) e deve ser válida em primeira ordem na quantidade $m\omega_L/(\hbar\rho)$. Com essa aproximação e a definição (3.288), podemos escrever:

$$\phi_1 \approx \text{tg}^{-1} \left[\left(\frac{k^2 - \rho^2}{2k\rho} \right) \text{tgh}(\rho a) \right] - \frac{\partial \left[\left(\frac{k^2 - \rho^2}{2k\rho} \right) \text{tgh}(\rho a) \right]}{\partial \rho} \frac{m\omega_L}{\hbar\rho}; \tag{3.326}$$

$$\phi_2 \approx \text{tg}^{-1} \left[\left(\frac{k^2 - \rho^2}{2k\rho} \right) \text{tgh}(\rho a) \right] + \frac{\partial \left[\left(\frac{k^2 - \rho^2}{2k\rho} \right) \text{tgh}(\rho a) \right]}{\partial \rho} \frac{m\omega_L}{\hbar\rho}. \tag{3.327}$$

Portanto,

$$\phi_1 - \phi_2 \approx \frac{mk\omega_L}{\hbar\rho|d(k, \rho; a)|^2} [(k^2 + \rho^2)\sinh(2\rho a) - 2\rho a(k^2 - \rho^2)]. \quad (3.328)$$

Com esse resultado, o tempo de Larmor (3.325) se torna:

$$\tau_L \approx \frac{mk}{\hbar|d(k, \rho; a)|^2} \left[\left(\frac{k^2 + \rho^2}{\rho} \right) \sinh(2\rho a) - 2a(k^2 - \rho^2) \right]. \quad (3.329)$$

Uma característica notável desse resultado é que embora o tempo de Larmor seja uma medição do tempo de interação entre o sistema quântico com spin 1/2 e o campo magnético que existe apenas onde a barreira existe, no limite de campo magnético fraco esse tempo não depende da intensidade do campo externo, uma vez que (3.329) independe da frequência de Larmor.³²

Vemos, também, que o tempo de Larmor não é, a rigor, uma medição do tempo de tunelamento. A razão para isso é que ele foi deduzido a partir dos “valores esperados” (3.319) que são, na realidade, médias calculadas sobre os valores esperados nos estados associados às ondas refletida e transmitida. Dessa forma, como precisamos do estado associado à componente refletida, além daquele associado à transmitida, o tempo de Larmor (3.329) deve ser uma medição do intervalo de tempo durante o qual o sistema quântico interagiu com o campo magnético. Uma vez que o o campo magnético só é não-nulo entre $x = 0$ e $x = a$, o tempo de Larmor é uma medição de quanto tempo o sistema *permaneceu* nessa região. Mas essa é precisamente a região da barreira. Portanto, (3.329) nos diz quanto tempo o sistema permaneceu na região da barreira.

Uma vez que o tempo de permanência mede quanto tempo o sistema quântico permaneceu nessa região, comparamos as expressões (3.190) e (3.329) e vemos que, para uma barreira retangular, no limite de campo magnético fraco, vale:

$$\tau_L \approx \tau_P. \quad (3.330)$$

Esse resultado mostra que dois tempos definidos de maneiras tão diferentes como o tempo de permanência, que é definido através de conceitos

³²O tempo de Larmor foi proposto por Baz [39] para se medir o tempo em processos de espalhamento, aplicado ao caso de tunelamento por Rybachenko [40] e estudado por Büttiker [41]. Esta dissertação segue [42] que, além do que foi aqui apresentado, também apresenta uma generalização relativística dessa definição de tempo.

como probabilidade e fluxo de densidade de probabilidade (equação 3.73), e o tempo de Larmor, definido através de valores esperados do observável spin interagindo com um campo magnético, mas ambos com a mesma interpretação, a saber, como sendo o intervalo de tempo durante o qual o sistema permanece na região da barreira, fornecem o mesmo resultado em primeira aproximação. Isto sugere que o conceito envolvido em suas interpretações, *talvez*, represente realmente uma quantidade física.³³

3.3.3 O efeito Hartman

Até aqui, apresentamos algumas definições de tempos de tunelamento e as calculamos explicitamente para uma barreira retangular. Algumas das definições apresentadas utilizam a interação entre o sistema tunelante e a barreira, como são os casos do tempo de Büttiker e Landauer e do tempo de Larmor. Neste último, necessitamos fazer a aproximação de um campo magnético fraco para obtermos o resultado. No tempo de Büttiker e Landauer, por sua vez, fizemos uma série de aproximações. Uma delas foi que a energia de um quantum trocado entre o sistema e a barreira oscilante fosse muito menor do que a energia do sistema e a diferença entre a altura da barreira estática e essa energia. Além disso, fizemos a aproximação de que a barreira estática fosse opaca. Dessa forma, o tempo de Büttiker e Landauer calculado pela equação (3.260) somente é válido nessa aproximação. O objetivo desta subseção é calcular os tempos de tunelamento que apresentamos também para o caso de uma barreira opaca.³⁴

Antes disso, vamos analisar o resultado (3.260):

$$\tau_{BL} = \frac{ma}{\hbar\rho}. \quad (3.331)$$

Observamos que este tempo de tunelamento, o qual, tornando a salientar, é válido somente no limite de uma barreira opaca, depende da massa m do sistema quântico, do momento ρ na região da barreira, ou seja, da diferença entre a altura da barreira e sua energia, e depende linearmente do comprimento a da barreira. Essa dependência linear com o comprimento da barreira é exatamente o que se espera para uma partícula clássica na presença de um potencial constante. Dessa forma, o tempo de tunelamento de Büttiker e Landauer (3.331) está de acordo com as idéias clássicas. Contudo, sendo

³³Ou, então, estamos enfrentando uma coincidência...

³⁴A barreira é dita opaca pois, nessa aproximação, temos $|T|^2 \approx 16k^2\rho^2 e^{-2\rho a} / (k^2 + \rho^2)^2$. Vemos, assim, que o quadrado do módulo do coeficiente de tunelamento é da mesma ordem de grandeza dos termos desprezados nessa aproximação.

o tunelamento um fenômeno puramente quântico, não devemos esperar que idéias clássicas sejam sempre corroboradas pelos resultados apresentados.

Tomemos, como exemplo, o tempo de tunelamento calculado pelo método da fase estacionária. Conforme vimos, ele é interpretado como o intervalo de tempo gasto pelo pico do pacote de ondas para atravessar a região da barreira de potencial. Para uma barreira retangular, o resultado (3.200),

$$T_{\text{tun}}^f(k, \rho; a) = \frac{m}{\hbar |d(k, \rho; a)|^2} \left[\frac{(k^2 + \rho^2)^2}{k\rho} \sinh(2\rho a) - 2ka(k^2 - \rho^2) \right], \quad (3.332)$$

apresenta claramente uma dependência não-linear com o comprimento da barreira, embora o sistema sofra apenas a influência de um potencial constante entre $x = 0$ e $x = a$. O leitor pode, talvez, sugerir que, sendo o tempo de Büttiker e Landauer linear em a e, lembrando, que (3.331) somente é válido para uma barreira opaca, nesse mesmo limite (3.332) também apresente a dependência linear no comprimento da barreira de potencial. Seguindo essa sugestão, calculamos (3.332) quando $\rho a \gg 1$, usando (3.189), (3.249) e desprezando termos de segunda ordem em $e^{-\rho a}$. O resultado é:

$$T_{\text{tun}}^f(k, \rho) \approx \frac{2m}{\hbar k \rho}, \quad (3.333)$$

ou seja, o tempo de tunelamento calculado através do método da fase estacionária para uma barreira retangular opaca é independente do comprimento da barreira. Esse resultado é conhecido como *efeito Hartman* [16]. Uma vez que, para uma barreira retangular, o tempo de fase associado à onda refletida, assim como $\bar{\tau}_f$, é idêntico a (3.332),³⁵ concluímos que esses dois tempos também deve independer de a para uma barreira opaca.

O tempo de permanência, como vimos, está relacionado com os tempos de fase através de (3.172). Sendo estes últimos independentes de a quando a barreira se torna opaca, surge a questão: τ_P apresenta o mesmo comportamento? A fim de respondermos a essa questão, calculamos (3.190),

$$\tau_P(k, \rho; a) = \frac{mk}{\hbar |d(k, \rho; a)|^2} \left[\left(\frac{k^2 + \rho^2}{\rho} \right) \sinh(\rho a) - 2a(k^2 - \rho^2) \right], \quad (3.334)$$

para uma barreira opaca. Obtemos:

$$\tau_P(k, \rho) \approx \frac{2mk}{\hbar \rho(k^2 + \rho^2)}. \quad (3.335)$$

³⁵Conferir equação (3.205).

Sendo o tempo de Larmor para uma barreira retangular aproximadamente igual a (3.334) [ver equação (3.330)], concluímos que ele também independe de a no limite de uma barreira opaca.

Portanto, para uma barreira retangular opaca, os tempos $T_{\text{tun}}^f(k, \rho; a)$, $\tau_f^R(k, \rho; a)$, $\bar{\tau}_f(k, \rho; a)$, $\tau_P(k, \rho; a)$ e $\tau_L(k, \rho; a)$ independem do comprimento da barreira.

Considerando o efeito Hartman, ou seja, a independência de a no tempo de tunelamento, veremos, no que segue, como podemos obter velocidades superluminais no contexto do tunelamento.

Tunelamento superluminal

No início desta subseção apresentamos os tempos de tunelamento na aproximação de uma barreira opaca. Vimos que diversos deles independem do comprimento da barreira, o que é chamado de tempo de efeito Hartman.

Como vimos anteriormente, o tempo de fase (3.107) indica o tempo gasto pelo pico do pacote de ondas para atravessar a região do potencial. Dessa forma, para uma barreira retangular, (3.332) representa o intervalo de tempo que o pico do pacote de ondas leva para ir de $x = 0$ até $x = a$.

Com isso, podemos associar uma velocidade de tunelamento referente ao pico do pacote como

$$v_T \equiv \frac{a}{T_{\text{tun}}^f}. \quad (3.336)$$

Para uma barreira retangular, essa velocidade deve depender, em geral, de k , ρ e a , uma vez que T_{tun}^f depende de tais quantidades.

Consideremos, agora, a expressão para o tempo de tunelamento calculado pelo método da fase estacionária para uma barreira retangular opaca, dado pela expressão (3.333). Com isso, (3.336) se torna

$$v_T \approx \frac{\hbar k \rho}{2m} a, \quad (3.337)$$

ou seja, a velocidade de tunelamento se torna, nessa aproximação, linear no comprimento da barreira.

Suponhamos agora que essa barreira opaca seja muito extensa, digamos

$$a > \frac{2mc}{\hbar k \rho}. \quad (3.338)$$

Quando isso ocorre, vemos que a velocidade de tunelamento se torna superluminal:

$$v_T > c. \quad (3.339)$$

Seria a transmissão de sinais superluminais possível utilizando o tunelamento e o efeito Hartman?

No início deste capítulo, apresentamos uma rápida revisão sobre velocidades associadas às ondas eletromagnéticas. Apresentamos, também, algumas situações nas quais velocidades superluminais em meios materiais ocorrem, bem como a essência dos trabalhos de Sommerfeld e Brillouin que mostra a impossibilidade de transmissão de sinais com velocidade superior à da luz no vácuo utilizando pacotes de ondas que apresentam tais velocidades. No que segue, mostraremos a tentativa de Stevens de demonstrar o mesmo para os efeitos superluminais que acabamos de encontrar para o fenômeno de tunelamento.

Frentes de onda e as soluções da equação de Schrödinger

Como vimos, o efeito Hartman, aliado a uma barreira suficientemente longa, leva ao tunelamento superluminal. Em tal fenômeno, o pico do pacote de ondas atravessa a barreira num intervalo menor do que aquele que luz leva para percorrer uma distância igual à extensão da barreira no vácuo. Seria possível utilizar esse resultado para enviar informação superluminalmente de um extremo ao outro da barreira?

Conforme vimos na seção (3.1), a teoria eletromagnética também apresenta velocidades superluminais quando consideramos a propagação de ondas em meios dispersivos com dispersão anômala. Contudo, naqueles casos, é possível construir pacotes com frentes de onda e estudar a evolução temporal de tais frentes. Conforme vimos, naqueles casos a frente de onda sempre se propaga com a velocidade c da luz no vácuo, mostrando, portanto, que o princípio de causalidade no contexto da teoria da relatividade especial não é violado. Seria possível realizar um estudo semelhante para o caso de tunelamento com efeito Hartman?

Stevens, em 1983, após ler o livro *Wave Propagation and Group Velocity*, de Brillouin,³⁶ estudou o processo de tunelamento considerando pacotes de onda incidentes com frentes de onda bem definidas [43]. Contudo, Stevens considerou apenas frentes de onda aproximadas. Estas não são, a rigor, frentes de onda, pois o conceito de frente de onda implica que o pacote deve ser nulo antes dela. Averiguaremos a razão de Stevens ter considerado frentes aproximadas.

³⁶Referência [31].

Para os nossos propósitos, basta considerarmos a equação de Schrödinger unidimensional para uma partícula livre:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2}. \quad (3.340)$$

A solução $\psi(x, t)$ pode ser escrita como [44]

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk B(k) e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t)}. \quad (3.341)$$

Nesta expressão, a distribuição espectral $B(k)$ é descrita em termos da função de onda em $t = 0$ como:

$$B(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi(x, 0) e^{-ikx}. \quad (3.342)$$

Seguiremos, então, o método de Sommerfeld e Brillouin, descrito no início deste capítulo. Como condição inicial, escolhemos uma função que apresenta uma frente de onda:

$$\psi(x, 0) = \begin{cases} 0, & x < x_2; \\ Ae^{ik_0 x}, & x_2 \leq x \leq x_1; \\ 0, & x > x_1, \end{cases} \quad (3.343)$$

sendo $k_0 > 0$ o número de onda no qual o pacote inicial é centrado e x_2 e x_1 dois pontos arbitrários do espaço tais que $x_2 < x_1$. Substituindo esta função de onda inicial na distribuição espectral (3.342), temos

$$B(k) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{e^{i(k_0 - k)x_1} - e^{i(k_0 - k)x_2}}{i(k_0 - k)} \right]. \quad (3.344)$$

Das equações (3.341) e (3.344), encontramos a função de onda para $t > 0$:

$$\psi(x, t) = \frac{A}{2\pi i} \left\{ e^{ik_0 x_1} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \left[\frac{e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m} t}}{k_0 - k} \right] e^{ik(x - x_1)} + \right. \\ \left. - e^{ik_0 x_2} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \left[\frac{e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m} t}}{k_0 - k} \right] e^{ik(x - x_2)} \right\}. \quad (3.345)$$

Nossa intenção seria aplicar o lema de Jordan (apêndice A) a esta expressão a fim de mostrarmos que esse pacote de ondas é nulo para $x > x_1 + \frac{\hbar k}{2m} t$. Contudo, observemos atentamente a função entre colchetes na expressão acima, a saber, $e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m} t} / (k_0 - k)$. O lema de Jordan somente pode

ser aplicado se o máximo dessa função sobre o semicírculo complexo tender a zero com $|k| \rightarrow \infty$. Sobre o semicírculo podemos escrever $k = |k|e^{i\theta}$, com $|k|$ constante. Portanto, temos:

$$\left| \frac{e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}}}{k_0 - k} \right| = \frac{\exp \left[\frac{\hbar |k|^2 t \sin(2\theta)}{2m} \right]}{\sqrt{k_0^2 - 2k_0|k| \cos(\theta) + |k|^2}}. \quad (3.346)$$

Tentando aplicar o lema de Jordan à primeira integral da equação (3.345), vemos que para $x > x_1$ devemos fechar o contorno de integração pelo semiplano superior. Nesse semiplano temos $0 < \theta < \pi$, portanto a função seno que aparece na última equação pode assumir qualquer valor entre -1 e +1. Uma vez que devemos ter $t > 0$, vemos que o máximo de (3.346) encontra-se em algum ponto entre $\theta = 0$ e $\theta = \pi/2$. Não é necessário calcular esse máximo, uma vez que qualquer ponto desse intervalo, (3.346) fornece:

$$\lim_{|k| \rightarrow \infty} \left| \frac{e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}}}{2m} \right| = \infty. \quad (3.347)$$

Portanto, o máximo dessa função não vai a zero sobre o semicírculo do plano- k complexo. Concluimos, assim, que o lema de Jordan não pode ser aplicado a este caso. Não temos, assim, nenhuma garantia de que o pacote seja nulo para $x > x_1 + \frac{\hbar k}{2m}t$ e, na verdade, ele não é. Conforme Stevens mostrou no artigo citado, a amplitude do pacote é muito pequena para $x > \frac{\hbar k_0}{m}t + x_1$, mas não é nula. Na verdade, Stevens chama exatamente o ponto onde a amplitude do pacote se torna apreciável de frente de onda. Mas, como observamos, é um nome inapropriado, de acordo com o conceito de frente de onda que utilizamos nesta dissertação.

Sendo assim, por que a equação de Schrödinger não admite frentes de onda?

A razão física para essa questão, é simples.

A equação de Schrödinger é uma equação não-relativística e, como tal, não respeita o princípio de causalidade relativístico. Esperar que a Mecânica Quântica não-relativística respeitasse tal princípio seria semelhante a esperar que, por exemplo, as soluções da equação do calor [45] também o fizessem.

Dessa forma, não é apropriado estudar questões envolvendo o princípio de causalidade relativístico utilizando uma teoria que só vale a energias pequenas comparadas à energia de repouso do sistema em questão. A fim de verificarmos se o tunelamento superluminal permite a transmissão de sinais com velocidades superiores a c , necessitamos de generalizações relativísticas dos resultados até aqui obtidos. Esse é um dos temas abordados no capítulo seguinte.

Capítulo 4

Tempos de tunelamento em teorias relativísticas

Neste capítulo apresentaremos generalizações relativísticas do tempo de fase calculado com as equações de Klein-Gordon e de Dirac. Na primeira seção, apresentaremos a equação de Klein-Gordon, definiremos o tunelamento para as soluções dessa equação, mostraremos que o efeito Hartman ocorre também no caso relativístico, compararemos nosso resultado com os resultados precedentes e estudaremos a conexão do tunelamento superluminal com a causalidade. Finalizaremos a seção analisando a possibilidade de se definir tempo de permanência através da equação de Klein-Gordon. Na segunda seção analisaremos a equação de Dirac. Mostraremos que o tempo de permanência pode ser definido com o auxílio dessa equação, demonstraremos uma relação entre esse tempo e o tempo de fase, calcularemos este último para uma barreira de potencial retangular e compararemos o resultado com aquele que será obtido na primeira seção do presente capítulo através da equação de Klein-Gordon.

4.1 O tempo de fase para o campo escalar

A equação de Klein-Gordon se escreve como:

$$\left[\partial^\mu \partial_\mu + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \psi = 0, \quad (4.1)$$

com $\partial_0 = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}$, $\partial_k = \frac{\partial}{\partial x^k}$ e $k = 1, 2$ e 3 .

Essa equação é uma equação relativística e descreve o campo escalar

complexo.¹

A fim de estudarmos o problema de tempo de tunelamento utilizando o campo escalar consideremos o acoplamento mínimo [47] na equação de Klein-Gordon. Neste acoplamento, as derivadas de (4.1) são substituídas por

$$\partial_\mu \rightarrow D_\mu = \partial_\mu - i \frac{e}{\hbar c} A_\mu, \quad (4.2)$$

sendo $A_\mu = A_\mu(x)$ a componente μ do quadri vetor potencial eletromagnético. Dessa forma, a equação (4.1) se torna:

$$\left[\partial^\mu \partial_\mu + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 - \frac{ie}{\hbar c} \partial_\mu A^\mu - \frac{2ie}{\hbar c} A^\mu \partial_\mu - \left(\frac{e}{\hbar c} \right)^2 A^\mu A_\mu \right] \psi = 0, \quad (4.3)$$

ou

$$\left\{ \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \partial^2 - \frac{ie}{\hbar c^2} \frac{A^0(\mathbf{x}, t)}{\partial t} - \frac{ie}{\hbar c} \partial \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) - \frac{2ie}{\hbar c^2} A^0(\mathbf{x}, t) \frac{\partial}{\partial t} + \right. \\ \left. - \frac{2ie}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \cdot \partial - \left(\frac{e}{\hbar c} \right)^2 [A^0(\mathbf{x}, t)^2 - \mathbf{A}(\mathbf{x}, t)^2] + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right\} \psi(x, t) = 0. \quad (4.4)$$

Escolhendo para o potencial eletromagnético

$$A^0(\mathbf{x}, t) \equiv -\frac{e}{c} V(x); \quad (4.5)$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \equiv 0, \quad (4.6)$$

e considerando-se a propagação ao longo do eixo x , a equação (4.4) se escreve como:

$$\left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2i \frac{V(x)}{\hbar c} \frac{\partial}{\partial t} - \left(\frac{V(x)}{\hbar} \right)^2 + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \psi(x, t) = 0. \quad (4.7)$$

Esta é, então, a equação de Klein-Gordon na presença de um potencial eletromagnético cujas componentes espaciais são nulas e cuja componente temporal depende apenas da posição.

¹Ver referência [46].

4.1.1 O tunelamento com o campo de Klein-Gordon

A fim de considerarmos uma versão relativística do fenômeno de tunelamento, consideremos que o potencial $V(x)$ na equação (4.7) seja uma barreira retangular de comprimento a e altura $V > 0$:

$$V(x) = \begin{cases} V, & 0 < x < a; \\ 0, & \text{nos outros casos.} \end{cases} \quad (4.8)$$

Neste caso, a solução geral da equação (4.7) é dada por:

$$\psi(x, t) = \begin{cases} \psi_I(x, t) = \psi_I^+ + \psi_I^-, & x < 0; \\ \psi_{II}(x, t) = \psi_{II}^+ + \psi_{II}^-; & 0 < x < a; \\ \psi_{III}(x, t) = \psi_{III}^+ + \psi_{III}^-, & x > a. \end{cases} \quad (4.9)$$

Nesta expressão, temos

$$\psi_I^\pm(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE A^\pm(E) e^{i[\pm k(E)x - Et/\hbar]}, \quad (4.10)$$

$$\psi_{II}^\pm(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE B^\pm(E) e^{i[\pm \tilde{k}(E)x - Et/\hbar]}, \quad (4.11)$$

$$\psi_{III}^\pm(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE C^\pm(E) e^{i[\pm k(E)x - Et/\hbar]}, \quad (4.12)$$

e

$$k(E) = \frac{E}{\hbar c} \sqrt{1 - \left(\frac{mc^2}{E} \right)^2}; \quad (4.13)$$

$$\tilde{k}(E) = k(E - V). \quad (4.14)$$

Nestas equações, a quantidade E está relacionada com a frequência ω de cada componente das ondas planas da decomposição de Fourier de ψ através de $E = \hbar\omega$. Devido às definições (4.13) e (4.14), vemos que as componentes de ψ que caracterizam modos propagantes com índice + em (4.9) se propagam para a direita, enquanto aquelas com índice - se propagam para a esquerda. Uma vez que soluções que apresentam $E^2 < (mc^2)^2$ são divergentes para $|x| \rightarrow \infty$, vemos que, fora da região da barreira, apenas os modos propagantes são fisicamente permitidos. Aliando-se a essa exigência o fato de E poder ser negativa, escrevemos

$$E = \pm(E_c + mc^2), \quad (4.15)$$

com $E_c \geq 0$. A quantidade mc^2 é a expressão para a energia de repouso de uma partícula com massa m . Interpretando a quantidade E como sendo sua energia total, podemos dizer que E_c seja sua energia cinética.²

Sendo a equação de Klein-Gordon (4.7) de segunda ordem na derivada espacial e o potencial (4.8) contínuo por partes, temos que $\psi(x, t)$ e $\frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x}$ devem ser funções contínuas nos pontos $x = 0$ e $x = a$. Com essas condições, encontramos o seguinte conjunto de equações:

$$A^+(E) + A^-(E) = B^+(E) + B^-(E); \quad (4.16)$$

$$ik(E)[A^+(E) - A^-(E)] = i\tilde{k}(E)[B^+(E) - B^-(E)]; \quad (4.17)$$

$$B^+(E)e^{i\tilde{k}(E)a} + B^-(E)e^{-i\tilde{k}(E)a} = C^+(E)e^{ik(E)a} + C^-(E)e^{-ik(E)a}; \quad (4.18)$$

$$i\tilde{k}(E)[B^+(E)e^{i\tilde{k}(E)a} - B^-(E)e^{-i\tilde{k}(E)a}] = ik(E)[C^+(E)e^{ik(E)a} - C^-(E)e^{-ik(E)a}]. \quad (4.19)$$

De acordo com o apêndice C, podemos escrever:³

$$A^-(E) = \frac{-i(k^2 - \tilde{k}^2)\text{sen}(\tilde{k}a)}{d_5(k, \tilde{k}; a)}A^+(E) + \frac{2k\tilde{k}e^{-ika}}{d_5(k, \tilde{k}; a)}C^-(E); \quad (4.20)$$

$$B^\pm(E) = \pm \frac{k(k \pm \tilde{k})e^{\mp i\tilde{k}a}}{d_5(k, \tilde{k}; a)}A^+(E) \mp \frac{k(k \mp \tilde{k})e^{-ika}}{d_5(k, \tilde{k}; a)}C^-(E); \quad (4.21)$$

$$C^+(E) = \frac{2k\tilde{k}e^{-ika}}{d_5(k, \tilde{k}; a)}A^+(E) - \frac{i(k^2 - \tilde{k}^2)\text{sen}(\tilde{k}a)}{d_5(k, \tilde{k}; a)}C^-(E), \quad (4.22)$$

com

$$d_5(k, \tilde{k}; a) \equiv 2k\tilde{k} \cos \tilde{k}a - i(k^2 + \tilde{k}^2)\text{sen}(\tilde{k}a). \quad (4.23)$$

Escolhemos os coeficientes $A^+(E)$ e $C^-(E)$ como quantidades independentes porque estas são as distribuições espectrais associadas às ondas que incidem sobre a barreira.

²Contudo, uma interpretação consistente da equação de Klein-Gordon só pode ser obtida no contexto da Teoria Quântica de Campos [48].

³Por economia de notação, escrevemos k e $\tilde{k}$ em vez de $k(E)$ e $\tilde{k}(E)$.

Analisaremos, agora, a expressão (4.14). Primeiramente, notamos que para $E < V - mc^2$ temos $\tilde{k}$ real. A condição para que os modos evanescentes ocorram, isto é, para que $\tilde{k}$ se torne um número imaginário, é $V - mc^2 < E < V + mc^2$. Uma vez que $|E| < mc^2$ não são permitidas fora da barreira, também não são permitidas entre $x = 0$ e $x = a$. Mantendo essa condição em mente e levando (4.15) em consideração, vemos que os modos evanescentes ocorrem na região da barreira para:⁴

$$0 < V - E_c < 2mc^2. \quad (4.24)$$

A primeira desigualdade que esta inequação apresenta nos diz que para que modos evanescentes ocorram entre $x = 0$ e $x = a$ é necessário que a altura da barreira seja superior à energia cinética do sistema quântico. Mas essa é exatamente a exigência para que o tunelamento ocorra na teoria não-relativística, uma vez que, naquele caso, a energia total do sistema fora da região da barreira coincide com sua energia cinética.

Contudo, o que nos diz a segunda parte da inequação (4.24)?

Essa segunda condição nos apresenta um limite superior para a diferença entre a altura do potencial e a energia cinética do sistema quântico para a ocorrência de modos evanescentes na região da barreira, ou seja, para que o tunelamento ocorra. Se essa diferença ultrapassar o limiar $2mc^2$, modos propagantes tornam a ocorrer na região da barreira. A explicação para tal fenômeno é a seguinte: para $V - E_c > 2mc^2$ a diferença de energia é suficiente para a criação de pares de partículas, uma vez que a energia de duas partículas com massas m é $2mc^2$. Assim sendo, nesse regime, o potencial cria partículas que se propagam no interior da barreira. Esse efeito é chamado de *tunelamento de Klein* [49].

Temos, assim, dois possíveis cenários:

- $V < 2mc^2$: os modos propagantes ocorrem para $E < -mc^2$ e $E > V + mc^2$ e os modos evanescentes para $mc^2 < E < V + mc^2$;
- $V > 2mc^2$: os modos evanescentes ocorrem para $V - mc^2 < E < V + mc^2$ e os modos propagantes para $E < -mc^2$, $E > V + mc^2$ e $mc^2 < E < V - mc^2$, sendo esta última região devido ao regime do tunelamento de Klein.

Chamando os valores de E para os quais o tunelamento ocorre de ϵ , podemos escrever [conferir equação (4.14)]:

⁴A equação (4.24) é uma condição necessária e suficiente para a existência de modos evanescentes.

$$\tilde{k}(\epsilon) = i\rho(\epsilon), \quad (4.25)$$

sendo

$$\rho(\epsilon) = \frac{(\epsilon - V)}{\hbar c} \sqrt{\left(\frac{mc^2}{\epsilon - V}\right)^2 - 1}. \quad (4.26)$$

Considerando que não haja onda incidente vinda da direita, temos:

$$C^-(E) \equiv 0, \quad \forall E. \quad (4.27)$$

No caso em que o pacote incidente seja centrado numa frequência ϵ_0 que caracteriza um modo evanescente na região da barreira e que, além disso, sua distribuição espectral seja praticamente nula para os modos que não sejam evanescentes entre $x = 0$ e $x = a$, isto é

$$|A(E)| \simeq 0, \quad \text{para } E \neq \epsilon, \quad (4.28)$$

podemos escrever as relações (4.20-4.22) como

$$A^-(\epsilon) = \frac{(k^2 + \rho^2)\sinh(\rho a)}{d(k, \rho; a)} A^+(\epsilon); \quad (4.29)$$

$$B^\pm(\epsilon) = \pm \frac{k(k \pm i\rho)e^{\pm \rho a}}{d(k, \rho; a)} A^+(\epsilon); \quad (4.30)$$

$$C^+(\epsilon) = \frac{i2k\rho e^{-ika}}{d(k, \rho; a)} A^+(\epsilon), \quad (4.31)$$

sendo esses coeficientes para outros valores de E praticamente nulos, devido à aproximação (4.28).

A função $d(k, \rho; a)$ que aparece nestas últimas equações é definida em (3.185), lembrando que k é dado por (4.13) e ρ por (4.26).

4.1.2 O efeito Hartman relativístico

Sendo $C^+(\epsilon)$ a distribuição espectral da onda transmitida, escrevemos o coeficiente de transmissão como

$$T(\epsilon) \equiv \frac{C^+(\epsilon)}{A^+(\epsilon)} = \frac{2|k\rho|}{|d(k, \rho; a)|} e^{i\phi_T^{KG}(k, \rho; a)}. \quad (4.32)$$

A fase $\phi_T^{KG}(k, \rho; a)$ associada à onda transmitida é dada por:⁵

⁵Utilizamos $x = |x| \exp i [1 - \text{sinal}(x)] \frac{\pi}{2}$.

$$\phi_T^{KG}(k, \rho; a) = \text{tg}^{-1} \left[\left(\frac{k^2 - \rho^2}{2k\rho} \right) \text{tgh}(\rho a) \right] - ka + \frac{\pi}{2} [2 - \text{sinal}(k) - \text{sinal}(\rho)], \quad (4.33)$$

sendo a função sinal definida como

$$\text{sinal}(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0; \\ -1, & x < 0. \end{cases} \quad (4.34)$$

A análise feita para as soluções da equação de Schrödinger na subseção (3.2.2) também se aplica às soluções da equação de Klein-Gordon. Dessa forma, podemos calcular o tempo de tunelamento obtido pelo método da fase estacionária através da definição (3.107). Fazendo isso, obtemos:

$$\tau_{f(KG)}^T(\epsilon_0; a) = \left\{ \frac{\hbar}{|d(k, \rho; a)|^2} \left[(k^2 + \rho^2) \sinh(2\rho a) \left(\rho \frac{dk}{d\epsilon} - k \frac{d\rho}{d\epsilon} \right) + 2k\rho a(k^2 - \rho^2) \frac{d\rho}{d\epsilon} \right] \right\}_{\epsilon=\epsilon_0}. \quad (4.35)$$

Esta expressão para o tempo de tunelamento, escrita em termos dos momentos k e ρ , possui a mesma forma nas teorias de Schrödinger e de Klein-Gordon, como pode ser facilmente verificado comparando-se as equações (3.197) e (4.35). Contudo, sendo os números de onda não-relativísticos definidos como $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ e $\rho = \sqrt{2m(V-E)}/\hbar$, em contraste com (4.13) e (4.26), concluímos que as expressões para os tempos de tunelamento (3.197) e (4.35) são muito diferentes quando escritas explicitamente em termos da energia do sistema e do potencial.

Antes de compararmos a equação (4.35) com sua análoga não-relativística, calcularemos $\tau_{f(KG)}^T(\epsilon_0; a)$ para uma barreira opaca.

Fazendo $\rho a \gg 1$ em (4.35) e desprezando termos de segunda ordem em $e^{-\rho a}$, encontramos:

$$\tau_{f(KG)}^T(\epsilon_0) \approx \left[\frac{2\hbar}{(k^2 + \rho^2)} \left(\rho \frac{dk}{d\epsilon} - k \frac{d\rho}{d\epsilon} \right) \right]_{\epsilon=\epsilon_0}. \quad (4.36)$$

Esta expressão mostra que o tempo de tunelamento calculado pelo método da fase estacionária para uma solução da equação de Klein-Gordon independe do comprimento da barreira para uma barreira opaca. Dito de outra forma, a expressão (4.36) mostra o efeito Hartman relativístico.

Além disso, (4.36) mostra que a ocorrência do efeito Hartman independe da relação de dispersão, isto é, das relações entre os momentos e a energia,

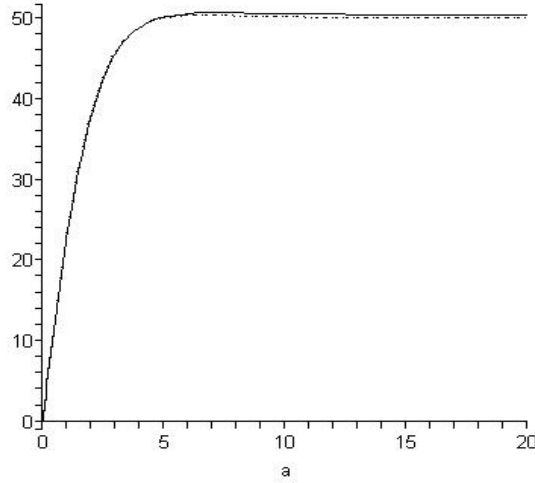


Figura 4.1: τ_f^S (linha tracejada) e τ_f^{KG} (linha contínua) para $E_c = 0,01$ e $V - E_c = 0,04$ como função de a .

uma vez que essa expressão é válida tanto para a teoria de Schrödinger quanto para a de Klein-Gordon, dentro das aproximações feitas [conferir (4.28)].

No restante desta seção, compararemos as equações (3.197) e (4.35).

4.1.3 Comparação entre os tempos de tunelamento relativístico e não-relativístico

Nesta subseção, compararemos os resultados para o tempo de tunelamento calculado para uma barreira retangular pelo método da fase estacionária com as equações de Schrödinger e de Klein-Gordon. Chamaremos (3.197) de τ_f^S e (4.35) de τ_f^{KG} .

Nas figuras que seguem, utilizamos $\hbar = c = 1$, $m = 1$.

Na figura (4.1), apresentamos os tempos de tunelamento calculados para valores de energia cinética e da diferença entre a altura do potencial e essa energia não-relativísticas. Conforme esperado, no regime não-relativístico a equação de Klein-Gordon prevê resultados praticamente idênticos aos previstos pela equação de Schrödinger. Uma vez que a diferença $V - E$ é fixa, ρ também é fixo. Dessa forma o limite da barreira opaca é obtido aumentando-se o comprimento da barreira. Essa figura mostra que para grandes valores de a , ou seja, do produto ρa , τ_f^S e τ_f^{KG} se tornam independentes de a , isto é, o efeito Hartman ocorre.

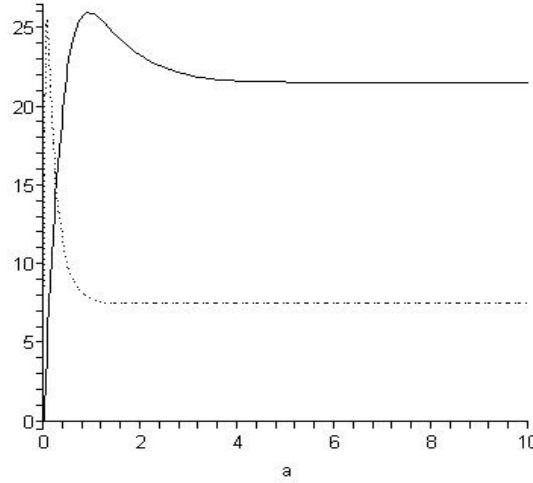


Figura 4.2: τ_f^S (linha tracejada) e τ_f^{KG} (linha contínua) para $E_c = 0,01$ e $V - E_c = 1,8$ como função de a .

Os resultados previstos por τ_f^S e τ_f^{KG} discordam se considerarmos um potencial relativístico, ainda que a energia cinética do sistema seja não-relativística. Essa situação é ilustrada na figura (4.2). Vemos que τ_f^{KG} satura num tempo superior ao que τ_f^S o faz.

Por outro lado, se a energia cinética for relativística, mas a diferença $V - E_c$ for não-relativística, como na figura (4.3), vemos que τ_f^{KG} satura num tempo menor do que τ_f^S .

A figura (4.4) mostra um caso no qual tanto a energia cinética quanto a diferença de energia são quantidades relativísticas. Vemos que τ_f^S e τ_f^{KG} nunca concordam. Além disso, a teoria de Klein-Gordon prevê um tempo de atraso negativo. Isto significa que o pico da onda transmitida surge na extremidade final da barreira *antes* do pico associado à onda incidente atingir o ponto $x = 0$, isto é, o início da barreira de potencial. O leitor pode se perguntar se, porventura, não ocorre aqui um problema com a causalidade. Essa questão será estudada adiante.

A figura (4.5) apresenta os tempos de tunelamento em função do potencial para uma energia cinética não-relativística. Se o potencial é pequeno quando comparado à energia de repouso da partícula, ambas as teorias prevêem resultados semelhantes. Contudo, conforme V se torna comparável a mc^2 vemos que as teorias não mais concordam sobre o valor do tempo de fase.

Para finalizar esta seção, observemos a figura (4.6), que apresenta τ_f^S

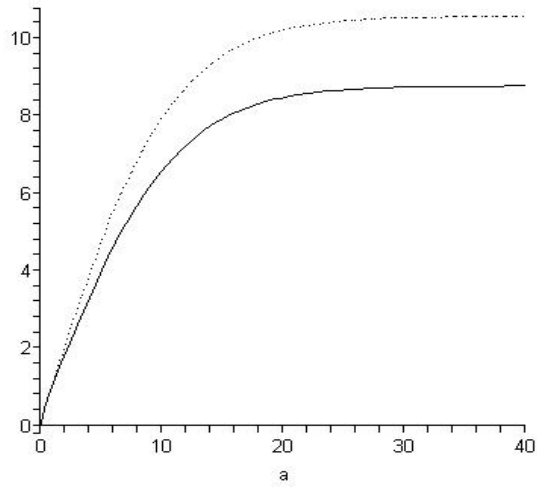


Figura 4.3: τ_f^S (linha tracejada) e τ_f^{KG} (linha contínua) para $E_c = 0,9$ e $V - E_c = 0,01$ em função de a .

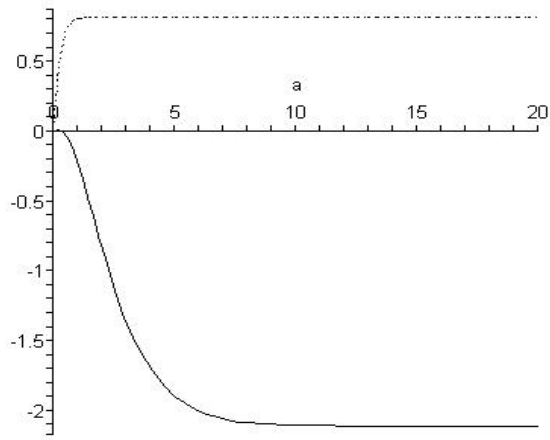


Figura 4.4: τ_f^S (linha tracejada) e τ_f^{KG} (linha contínua) para $E_c = 0,8$ e $V - E_c = 1,9$ em função de a .

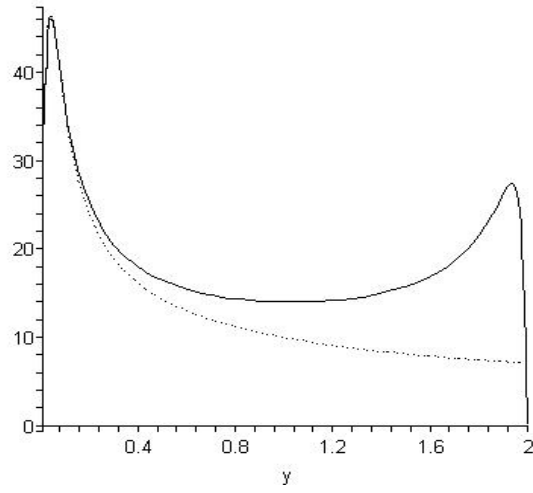


Figura 4.5: τ_f^S (linha tracejada) e τ_f^{KG} (linha contínua) para $E_c = 0,01$ e $a = 3$ em função de V .

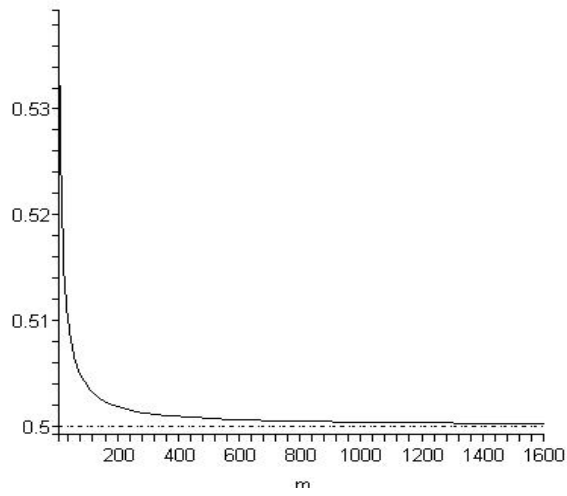


Figura 4.6: τ_f^S (linha tracejada) e τ_f^{KG} (linha contínua) para $E_c = 1$ e $V - E_c = 4$ em função de mc^2 .

e τ_f^{KG} em função da energia de repouso. Claramente τ_f^S é independente da energia de repouso, uma vez que uma teoria não-relativística, como é a teoria de Schrödinger, não depende dessa energia. Contudo, vemos que τ_f^{KG} satura com o aumento dessa energia. Por que esse comportamento ocorre?

Quando a energia de repouso é suficientemente alta para as demais energias envolvidas no problema, a saber, a energia cinética E_c e a diferença $V - E_c$, se tornarem desprezíveis quando comparadas a ela, temos o limite não-relativístico da teoria. Portanto, seus resultados devem ser equivalentes aos obtidos com a equação de Schrödinger. Como τ_f^S é uma constante com respeito a mc^2 , conforme a energia de repouso aumenta, τ_f^{KG} deve tender a essa mesma constante. É exatamente isso o que a figura (4.6) nos mostra.

É proveitoso ressaltar que nas situações nas quais as equações de Schrödinger e de Klein-Gordon prevêm resultados diferentes, vale a previsão desta última, por ser uma teoria relativística. A importância dos resultados apresentados nesta dissertação utilizando a teoria de Klein-Gordon é que eles estendem a validade de τ_f^S para energias nas quais a equação de Schrödinger mostra-se inapropriada. Além disso, a teoria de Klein-Gordon também corrobora os resultados da teoria de Schrödinger, nas regiões nas quais esta última é válida como, por exemplo, na figura (4.1).

O efeito Hartman em Schrödinger nos levou ao fenômeno do tunelamento superluminal. Vimos na subseção anterior que o efeito Hartman também ocorre em Klein-Gordon. Teríamos também o tunelamento superluminal para o campo escalar? Sendo a equação de Klein-Gordon válida mesmo em energias nas quais a equação de Schrödinger não o é, nos perguntamos: é possível haver violação do princípio de causalidade relativística utilizando o tunelamento em Klein-Gordon? Essas questões serão estudadas na subseção seguinte.

4.1.4 O tunelamento superluminal e a causalidade

Como vimos, o efeito Hartman também ocorre em teorias relativísticas. Os efeitos superluminais que surgem na teoria de Schrödinger devido à aplicação da equação (3.336) também aparecem em Klein-Gordon. Portanto, o tunelamento superluminal não é uma consequência de uma possível má aplicação de uma teoria não-relativística numa escala na qual ela não é válida. O tunelamento superluminal é, na verdade, um fenômeno muito estudado na literatura científica, tanto do ponto de vista teórico quanto do experimental [11]-[15].

Contudo, como estamos abordando o problema com uma teoria relativística, não esperamos que uma violação da causalidade ocorra, mesmo que

efeitos superluminais sejam encontrados. Podemos citar, como exemplos, as velocidades superiores à da luz que ocorrem na teoria eletromagnética e que foram estudadas por Sommerfeld e Brillouin, apresentadas na seção (3.1) desta dissertação.

Podemos, assim, considerar um pacote de ondas incidente que possua frente de onda bem definida num instante inicial e estudar a evolução temporal dessa frente. Segundo o método de Sommerfeld e Brillouin, só precisamos estudar as propriedades analíticas das distribuições espectrais das ondas envolvidas no problema e as relações de dispersão. Estudando as equações (4.20-4.22), vemos que para se conhecer os pólos de $A^-(E)$, $B^+(E)$, $B^-(E)$ e $C^+(E)$ precisamos conhecer os pólos de $A^+(E)$, que são dados pelas condições iniciais, e os zeros de $d_5(k, \rho; a)$ [equação (4.23)] no plano- E complexo.⁶ Infelizmente, encontrar todos os zeros complexos de uma equação transcendente complexa não é uma tarefa fácil. Sendo assim, abordaremos o problema de uma outra perspectiva.

Sendo a equação de Klein-Gordon uma equação relativística, suas soluções no vácuo mantêm frentes de onda e estas frentes se propagam com a velocidade c . Para mostrar que o tunelamento superluminal não viola a causalidade relativística, precisamos demonstrar que o mesmo ocorre na presença de um potencial constante. Consideremos a equação (4.7) com um potencial $V(x) = V$, sendo $V > 0$ constante para todo o x e todo t . A solução geral dessa equação é

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE D^+(E) e^{i[\tilde{k}(E)x - Et/\hbar]} + \int_{-\infty}^{+\infty} dE D^-(E) e^{-i[\tilde{k}(E)x + Et/\hbar]}, \quad (4.37)$$

sendo $\tilde{k}(E)$ dado por (4.14).

As distribuições espectrais $D^+(E)$ e $D^-(E)$ podem ser escritas como

$$D^\pm(E) = \frac{1}{4\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left[\psi(0, t) \pm \frac{1}{i\tilde{k}(E)} \frac{\partial \psi}{\partial x}(0, t) \right] e^{iEt/\hbar}, \quad (4.38)$$

ou seja, conhecendo-se ψ e sua derivada espacial em $x = 0$ em todo instante de tempo, podemos encontrar ψ em qualquer ponto do espaço-tempo.

Seja $\psi_0(x, t)$ uma solução monocromática da equação considerada que caracteriza um modo evanescente:

$$\psi_0(x, t) = e^{-\rho_0 x} e^{-iE_0 t/\hbar}, \quad (4.39)$$

⁶Lembramos que escolhemos $C^-(E) = 0$.

com $\rho_0 \equiv \rho(E_0)$, sendo ρ definido pela equação (4.26), $V - mc^2 < E_0 < V + mc^2$ e $E_0 > mc^2$.

Calculando ψ_0 e sua derivada espacial no ponto $x = 0$:

$$\psi_0(0, t) = e^{-iE_0t/\hbar}; \quad (4.40)$$

$$\frac{\partial \psi_0}{\partial x}(0, t) = -\rho_0 e^{-iE_0t/\hbar}. \quad (4.41)$$

Consideraremos uma solução que seja dada por (4.39) multiplicada por um pulso retangular, isto é, utilizaremos

$$\psi(0, t) = T(t)\psi_0(0, t); \quad (4.42)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial x}(0, t) = T(t)\frac{\partial \psi_0}{\partial x}(0, t) \quad (4.43)$$

como condições de contorno de (4.38). A função $T(t)$ que aparece nessas expressões é definida como

$$T(t) = \begin{cases} 1, & 0 \leq t \leq t'; \\ 0, & \text{nos outros casos.} \end{cases} \quad (4.44)$$

Com (4.40-4.44) em (4.38), encontramos

$$D^\pm(E) = \frac{1}{4\pi i} \left[1 \pm \frac{i\rho_0}{\tilde{k}(E)} \right] \left[\frac{e^{i(E-E_0)t'/\hbar} - 1}{E - E_0} \right]. \quad (4.45)$$

Ressaltamos que embora ψ_0 seja uma onda monocromática, a função definida pelas distribuições espectrais $D^+(E)$ e $D^-(E)$ acima claramente não o é.

Temos a intenção de calcular a equação (4.37) para os pontos $x > ct$. Uma vez que os modos propagantes que se movem para a direita são descritos pela primeira integral, analisaremos apenas ela. Calcularemos aquela integral através do método de Sommerfeld e Brillouin. Observamos que $D^+(E)$ satisfaz as condições necessárias para a aplicação do lema de Jordan. Além disso, essa distribuição espectral não possui pólos no semiplano superior do plano- E complexo. Todos os seus dois pólos repousam sobre o eixo real, sendo encontrados em⁷ $E = V \pm mc^2$. O argumento da exponencial da primeira integral de (4.37), para $|E - V| > mc^2$, pode ser escrito como:

⁷O ponto $E = E_0$ é uma singularidade removível. Podemos redefinir as distribuições espectrais nesse ponto como $D^+(E_0) = t'/(2\pi\hbar)$ e $D^-(E_0) = 0$.

$$i[\tilde{k}(E)x - Et/\hbar] = i\tilde{k}(E) \left[x - \frac{c}{n^{KG}(E)}t \right]. \quad (4.46)$$

O termo $n^{KG}(E)$ que aparece nessa expressão é o análogo do índice de refração (3.26) da teoria eletromagnética e é dado por

$$n^{KG}(E) \equiv \frac{\hbar\tilde{k}(E)c}{E}. \quad (4.47)$$

Utilizando a definição de $\tilde{k}$ [equações (4.13) e (4.14)], vemos que

$$\lim_{|E| \rightarrow \infty} n^{KG}(E) = 1. \quad (4.48)$$

Mas este é exatamente o comportamento encontrado por Sommerfeld e Brillouin para todo índice de refração eletromagnético, independentemente do meio material.⁸

Portanto, com $|E| \rightarrow \infty$ em (4.46), temos:

$$i[\tilde{k}(E)x - Et/\hbar] \rightarrow \frac{i|E|}{\hbar c} [x - ct]. \quad (4.49)$$

Assim, concluímos que $\psi(x, t)$ é nula para $x > ct$, o que mostra que a frente de onda que o pacote inicial possui se mantém ao longo do tempo e se propaga com a velocidade c da luz no vácuo.

Acabamos de demonstrar que as soluções da equação de Klein-Gordon mantêm frentes de onda mesmo na presença de um potencial constante. Na verdade, mostramos que mesmo sendo a solução centrada num modo evanescente, sua frente de onda é mantida. Portanto, se, para uma barreira retangular, tivermos uma onda incidente centrada num modo que caracteriza um modo evanescente na região da barreira mas que possua frente de onda, essa frente se mantém ao longo do tempo mesmo na região da barreira. Dessa forma, não pode haver violação do princípio de causalidade relativística.

O que ocorre, então, quando temos o tunelamento superluminal?

Conforme vimos, o tunelamento superluminal ocorre devido a uma velocidade associada ao pico do pacote de ondas, através da equação (3.336), para uma barreira opaca suficientemente longa. Dessa forma, se o pacote incidente possuir frente de onda, podem ocorrer duas coisas:⁹

⁸Limite (3.54).

⁹Lembramos que o fato do pacote incidente possuir frente de onda não implica que esta coincida com seu pico. O pico pode estar localizado muito atrás da frente.

- A situação é tal que a frente de onda atinge a extremidade final da barreira antes do pico chegar a esse mesmo ponto. Neste caso, o tunelamento superluminal pode ocorrer.
- Ao contrário, a situação é tal que o pico do pacote deveria chegar ao ponto $x = a$ antes que a frente de onda o fizesse. Como nenhuma parte do pacote pode ultrapassar sua frente de onda, o pico simplesmente desaparece quando alcança a frente, não atingindo a extremidade final da barreira. Portanto, o tunelamento superluminal não ocorre neste caso.

Vale a pena ressaltar que, assim como na teoria eletromagnética, mesmo quando efeitos superluminais ocorrem, o princípio de causalidade relativística é corroborado.¹⁰

4.1.5 O tempo de permanência via equação de Klein-Gordon

Além do tempo da fase, poderíamos tentar definir o tempo de permanência (3.73) para a teoria de Klein-Gordon.

A definição do tempo de permanência estacionário depende dos conceitos de probabilidade e de corrente de densidade de probabilidade. Essas duas quantidades satisfazem uma equação de continuidade, como vimos na equação (3.64). A versão relativística daquela equação é

$$\partial_\mu j^\mu = 0. \quad (4.50)$$

Nesta equação, j^μ é o quadrivetor densidade de probabilidade, sendo sua componente temporal a densidade de probabilidade propriamente dita e suas componentes espaciais as componentes da corrente associada. Nossa intenção é encontrar um quadrivetor a partir da equação de Klein-Gordon que satisfaça a equação de continuidade acima. Para isso, consideremos a equação conjugada à equação (4.3):

$$\left[\partial^\mu \partial_\mu + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 + \frac{ie}{\hbar c} \partial_\mu A^\mu + \frac{2ie}{\hbar c} A^\mu \partial_\mu - \left(\frac{e}{\hbar c} \right)^2 A^\mu A_\mu \right] \psi^* = 0. \quad (4.51)$$

¹⁰Ver, além de [31], o artigo de Lunardi, que estudou a propagação de feixes de Bessel eletromagnéticos no vácuo [50] e o trabalho de Borghardt, Belogovskii e Karpenko, que estudaram o mesmo problema com o campo escalar [51].

Comparando (4.3) com a equação acima, vemos que se ψ é solução da equação de Klein-Gordon, ψ^* é solução da mesma equação com A^μ trocado por $-A^\mu$.

A fim de derivarmos a equação de continuidade, multiplicamos a equação (4.3) por ψ^* e subtraímos do resultado a equação (4.51) multiplicada por ψ . Com isso, obtemos

$$\partial_\mu J^\mu = 0, \quad (4.52)$$

com¹¹

$$J^\mu = J^\mu(\psi, A^\mu) \equiv \frac{i\hbar}{2mc} (\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*) + \frac{e}{mc^2} \psi^* A^\mu \psi. \quad (4.53)$$

Esse quadrivetor possui a seguinte propriedade:

$$J^\mu(\psi^*, -A^\mu) = -J^\mu(\psi, A^\mu), \quad (4.54)$$

o que mostra que ele não pode ser considerado um quadrivetor densidade de probabilidade, uma vez que sua componente temporal pode ser negativa.

Não conseguimos, portanto, definir o conceito de probabilidade via equação de Klein-Gordon utilizando esse procedimento. Sendo assim, não conseguimos uma generalização relativística do tempo de permanência (3.73) utilizando essa equação.¹²

Na seção seguinte veremos como essa generalização é possível através da equação de Dirac e, além disso, compararemos nossos resultados para o tempo de fase obtidos com a equação de Klein-Gordon com os que serão demonstrados para Dirac.

4.2 Tempos de tunelamento para férmions

Nesta seção calcularemos o tempo de fase com a equação de Dirac para uma barreira retangular e o compararemos com o resultado obtido com a equação de Klein-Gordon. Para esse fim, encontraremos uma relação entre o tempo de permanência e o tempo de fase e calcularemos este último utilizando

¹¹A fim de obtermos (4.53), multiplicamos o resultado das operações descritas acima pelo fator $i\hbar/(2mc)$. O fator i torna J^μ real e o fator $\hbar/(2mc)$ dá a essa quantidade a dimensão de corrente de densidade de probabilidade e faz com que suas componentes espaciais coincidam com a expressão não-relativística (3.66), com $\mathbf{A} = \mathbf{0}$.

¹²Até onde sabemos, não existe um procedimento para se definir probabilidade em Klein-Gordon. Portanto, não se é possível definir o tempo de permanência via essa equação.

essa relação. Contudo, precisamos mostrar que a definição do tempo de permanência é possível na teoria de Dirac. Esse é o objetivo da seguinte subseção.

4.2.1 Probabilidade

A equação

$$\left(i\gamma^\mu\partial_\mu - \frac{mc}{\hbar}\right)\psi = 0, \quad (4.55)$$

com as quantidades γ^μ satisfazendo

$$\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}, \quad (4.56)$$

sendo $g^{\mu\nu}$ o tensor métrico, é chamada de equação de Dirac e descreve campos espinoriais de spin 1/2 [52].

Da relação (4.56), chamada de relação de anti-comutação, encontramos:

$$(\gamma^0)^2 = 1; \quad (4.57)$$

$$(\gamma^k)^2 = -1, \quad (4.58)$$

com $k = 1, 2$ ou 3 . Com isso, a equação de Dirac pode ser escrita na forma hamiltoniana simplesmente multiplicando-se (4.55) por $\hbar c\gamma^0$ pela esquerda:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H_D\psi. \quad (4.59)$$

O termo H_D que aparece nessa equação é o Hamiltoniano de Dirac e é definido como

$$H_D \equiv -i\hbar c\gamma^0\boldsymbol{\gamma} \cdot \boldsymbol{\partial} + \gamma^0 mc^2. \quad (4.60)$$

Sendo o hamiltoniano um observável, ele deve ser hermiteano. Mas $-i\hbar\partial$ é o operador momento linear, que é hermiteano. Assim, a condição de hermiticidade de H_D e as relações (4.56) e (4.57), fornecem:

$$(\gamma^0)^\dagger = \gamma^0; \quad (4.61)$$

$$(\gamma^k)^\dagger = -\gamma^k = \gamma^0\gamma^k\gamma^0, \quad (4.62)$$

ou, utilizando (4.57):

$$(\gamma^\mu)^\dagger = \gamma^0\gamma^\mu\gamma^0. \quad (4.63)$$

Com isso, somos capazes de mostrar que é possível definir-se o conceito de probabilidade de se encontrar a partícula associada ao campo de Dirac.

A interação do campo de Dirac com o campo eletromagnético pode ser descrita através do acoplamento mínimo (4.2). Com isso, a equação de Dirac se torna:

$$\left(i\gamma^\mu\partial_\mu - \frac{mc}{\hbar} + \frac{e}{\hbar c}\gamma^\mu A_\mu\right)\psi = 0. \quad (4.64)$$

A equação adjunta a esta é:

$$-i\partial_\mu\psi^\dagger\gamma^0\gamma^\mu\gamma^0 + \frac{e}{\hbar c}A_\mu\psi^\dagger\gamma^0\gamma^\mu\gamma^0 - \frac{mc}{\hbar}\psi^\dagger, \quad (4.65)$$

onde utilizamos (4.63). Multiplicando a equação acima por γ^0 pela direita, utilizando (4.57) e definindo

$$\bar{\psi} \equiv \psi^\dagger\gamma^0, \quad (4.66)$$

obtemos

$$-i\partial_\mu\bar{\psi}\gamma^\mu + \frac{e}{\hbar c}A_\mu\bar{\psi}\gamma^\mu - \frac{mc}{\hbar}\bar{\psi}. \quad (4.67)$$

Multiplicando (4.64) por $\bar{\psi}$ pela esquerda e subtraindo do resultado a equação (4.67) multiplicada por ψ pela direita, encontramos

$$\partial_\mu j^\mu = 0, \quad (4.68)$$

com

$$j^\mu \equiv c\bar{\psi}\gamma^\mu\psi. \quad (4.69)$$

Observamos que a componente temporal desse quadrivetor é¹³

$$j^0 = c\bar{\psi}\gamma^0\psi = c\psi^\dagger(\gamma^0)^2\psi = c\psi^\dagger\psi = c\sum_{l=1}^4\psi_l^*\psi_l = c\sum_{l=1}^4|\psi_l|^2 \geq 0, \quad (4.70)$$

onde utilizamos (4.57).

Assim, vemos que (4.69) pode ser interpretado como o quadrivetor densidade de probabilidade, sendo j^0/c a densidade probabilidade.

¹³Aqui, utilizamos o fato de que as quantidades γ^μ que satisfazem (4.56) são matrizes e que sua representação de menor ordem é 4×4 .

Dessa forma, considerando-se a propagação na direção z , podemos definir o tempo de permanência estacionário na região compreendida entre $z = z_1$ e $z = z_2$ como

$$\tau_P \equiv \frac{\int_{z_1}^{z_2} j^0 dz}{c j_{in}} = \frac{\int_{z_1}^{z_2} \psi^\dagger(z) \psi(z) dz}{j_{in}}. \quad (4.71)$$

Nesta expressão, $\psi(z)$ é uma solução estacionária da equação de Dirac e j_{in} é a corrente de probabilidade incidente.

4.2.2 Relação entre os tempos de tunelamento

Consideremos a equação (4.64) com o potencial eletromagnético dado por

$$A^0 = -\frac{c}{e} V(z); \quad (4.72)$$

$$\mathbf{A} = \mathbf{0}. \quad (4.73)$$

No que segue, consideramos $V(z)$ nulo fora do intervalo $0 < z < a$.

Escrevendo a equação resultante na forma hamiltoniana, temos:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[-i\hbar c \alpha_z \frac{\partial}{\partial z} + \beta mc^2 + V(z) \right] \psi, \quad (4.74)$$

sendo

$$\beta \equiv \gamma^0; \quad (4.75)$$

$$\alpha_k \equiv \gamma^0 \gamma^k. \quad (4.76)$$

As soluções estacionárias de (4.74) satisfazem

$$\left[-i\hbar c \alpha_z \frac{\partial}{\partial z} + \beta mc^2 + V(z) \right] \psi = E \psi. \quad (4.77)$$

Derivando esta última relação com respeito à energia:

$$\left[-i\hbar c \alpha_z \frac{\partial}{\partial z} + \beta mc^2 + V(z) - E \right] \frac{\partial \psi}{\partial E} = \psi. \quad (4.78)$$

A equação conjugada à equação (4.77) é

$$i\hbar c \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial z} \alpha_z + \psi^\dagger \beta mc^2 + [V(z) - E] \psi^\dagger = 0 \quad (4.79)$$

Multiplicando (4.78) por $\psi^\dagger$ pela esquerda e subtraindo do resultado a equação (4.79) multiplicada por $\partial\psi/\partial E$ pela direita, obtemos:

$$\psi^\dagger\psi = -i\hbar c \frac{\partial}{\partial z} \left(\psi^\dagger \alpha_z \frac{\partial\psi}{\partial E} \right). \quad (4.80)$$

Integrando esta última expressão entre $z = 0$ e $z = a$, encontramos:

$$\int_0^a \psi^\dagger\psi dz = -i\hbar c \left[\left(\psi^\dagger \alpha_z \frac{\partial\psi}{\partial E} \right)_{z=a} - \left(\psi^\dagger \alpha_z \frac{\partial\psi}{\partial E} \right)_{z=0} \right]. \quad (4.81)$$

Dividindo esta expressão pelo fluxo incidente e usando (4.71):

$$\tau_P = -\frac{\hbar c}{j_{in}} \left[\left(\psi^\dagger \alpha_z \frac{\partial\psi}{\partial E} \right)_{z=a} - \left(\psi^\dagger \alpha_z \frac{\partial\psi}{\partial E} \right)_{z=0} \right]. \quad (4.82)$$

A fim de calcularmos o lado direito, consideremos

$$\alpha_z = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_z \\ \sigma_z & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.83)$$

sendo σ_z a matriz de Pauli definida em (3.117), e as soluções independentes do tempo nas regiões $z < 0$ e $z > a$ dadas, respectivamente, por

$$\psi_I(z) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \eta \\ 0 \end{pmatrix} e^{ikz} + R \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -\eta \\ 0 \end{pmatrix} e^{-ikz}; \quad (4.84)$$

$$\psi_{III}(z) = T \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \eta \\ 0 \end{pmatrix} e^{ikz}. \quad (4.85)$$

Nestas expressões,

$$\eta \equiv \frac{\hbar k c}{E + mc^2}; \quad (4.86)$$

$$k \equiv \frac{\sqrt{E^2 - (mc^2)^2}}{\hbar c}, \quad (4.87)$$

e $R = |R|e^{i\phi_r}$ e $T = |T|e^{i\phi_t}$ são, respectivamente, os coeficientes de reflexão e de transmissão. Utilizando estas expressões na equação (4.82), encontramos¹⁴

¹⁴Como no caso não-relativístico, utilizamos $|R|^2 + |T|^2 = 1$. A relação (4.88) foi deduzida por Winful, Ngom e Litchinitser em 2004 [53].

$$\tau_P = \bar{\tau}_f - \tau_i. \quad (4.88)$$

Nesta expressão, definimos

$$\bar{\tau}_f = |T|^2 \tau_f^T + |R|^2 \tau_f^R; \quad (4.89)$$

$$\tau_f^T = \hbar \frac{d\phi_t}{dE} + \hbar \frac{dk}{dE} a; \quad (4.90)$$

$$\tau_f^R = \hbar \frac{d\phi_r}{dE} \quad (4.91)$$

$$\tau_i = -\frac{m}{\hbar k^2} \text{Im}(R), \quad (4.92)$$

que são quantidades encontradas na teoria não-relativística.

A equação (4.88) é, portanto, uma generalização relativística da relação (3.172). De fato, (4.88) relaciona os tempos de fase do mesmo modo que sua equação análoga não-relativística.

A seguir, calcularemos $\bar{\tau}_f$ para uma barreira retangular utilizando (4.88) e o compararemos com o resultado obtido com a equação de Klein-Gordon.

4.2.3 Comparação entre o tempo de fase via equações de Klein-Gordon e de Dirac

Consideremos a equação (4.77) na qual o potencial $V(z)$ representa uma barreira retangular:

$$V(z) = \begin{cases} V, & 0 < z < a; \\ 0, & \text{nos outros casos,} \end{cases} \quad (4.93)$$

com $E - mc^2 < V < E + mc^2$.

Por simplicidade, escolhemos as soluções nas regiões $x < 0$ e $x > a$ como sendo (4.84) e (4.85), respectivamente, e

$$\psi_{II}(z) = C \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ i\zeta \\ 0 \end{pmatrix} e^{-\rho z} + D \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -i\zeta \\ 0 \end{pmatrix} e^{\rho z}, \quad (4.94)$$

para $0 < z < a$, com

$$\zeta \equiv \frac{\hbar \rho c}{E + mc^2 - V}; \quad (4.95)$$

$$\rho \equiv \frac{\sqrt{(mc^2)^2 - (E - V)^2}}{\hbar c}. \quad (4.96)$$

Uma vez que a equação de Dirac é de primeira ordem na derivada espacial e o potencial possui descontinuidades de salto nos pontos $z = 0$ e $z = a$, temos as seguintes condições:

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0); \quad (4.97)$$

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a). \quad (4.98)$$

Com essas duas condições, as equações (4.84), (4.85) e (4.94) fornecem o seguinte sistema de equações:

$$1 + R = C + D; \quad (4.99)$$

$$\chi(1 - R) = i(C - D); \quad (4.100)$$

$$Te^{ika} = Ce^{-\rho a} + De^{\rho a}; \quad (4.101)$$

$$\chi Te^{ika} = i(Ce^{-\rho a} - De^{\rho a}). \quad (4.102)$$

Nestas expressões, definimos a quantidade

$$\chi \equiv \frac{\eta}{\zeta}. \quad (4.103)$$

Resolvendo o sistema acima, obtemos

$$C = \frac{(1 - i\chi)}{2\lambda} e^{\rho a}; \quad (4.104)$$

$$D = \frac{(1 + i\chi)}{2\lambda} e^{-\rho a}; \quad (4.105)$$

$$T = \frac{e^{-ika}}{\lambda}; \quad (4.106)$$

$$R = -i \left(\chi + \frac{1}{\chi} \right) \frac{\sinh(\rho a)}{2\lambda}, \quad (4.107)$$

com

$$\lambda \equiv \cosh(\rho a) - \frac{i}{2} \left(\chi - \frac{1}{\chi} \right) \sinh(\rho a). \quad (4.108)$$

Observamos que o coeficiente de reflexão pode ser escrito como

$$R = -\frac{i}{2|\lambda|^2} \left(\chi + \frac{1}{\chi} \right) \sinh(\rho a) \left[\cosh(\rho a) + \frac{i}{2} \left(\chi - \frac{1}{\chi} \right) \sinh(\rho a) \right]; \quad (4.109)$$

$$= \frac{1}{4|\lambda|^2\chi} (\chi^2 + 1) \left[\left(\chi - \frac{1}{\chi} \right) \sinh^2(\rho a) - i \sinh(2\rho a) \right]. \quad (4.110)$$

Com isso, o termo de auto-interferência (4.92) se torna:

$$\tau_i = \frac{mc^2(1 + \chi^2)}{4\hbar k^2 c^2 |\lambda|^2 \chi} \sinh(2\rho a). \quad (4.111)$$

Da equação (4.94), vemos que

$$\psi_{II}^\dagger(z) \psi_{II}(z) = (1 + \zeta^2)(|C|^2 e^{-2\rho z} + |D|^2 e^{2\rho z}) + 2(1 - \zeta^2) \operatorname{Re}(C^* D). \quad (4.112)$$

Utilizando as equações (4.104) e (4.105), encontramos

$$|C|^2 = \frac{(1 + \chi^2)}{4|\lambda|^2} e^{2\rho a}; \quad (4.113)$$

$$|D|^2 = \frac{(1 + \chi^2)}{4|\lambda|^2} e^{-2\rho a}; \quad (4.114)$$

$$C^* D = \frac{1 - \chi^2 + i2\chi}{4|\lambda|^2}. \quad (4.115)$$

Com isso, (4.112) se torna

$$\psi_{II}^\dagger(z) \psi_{II}(z) = \frac{1}{2|\lambda|^2} \left\{ (1 + \zeta^2)(1 + \chi^2) \cosh[2\rho(z - a)] + (1 - \zeta^2)(1 - \chi^2) \right\}. \quad (4.116)$$

Integrando esta equação na região da barreira:

$$\int_0^a \psi_{II}^\dagger \psi_{II}(z) dz = \frac{a}{2|\lambda|^2} \left[(1 + \zeta^2)(1 + \chi^2) \frac{\sinh(2\rho a)}{2\rho a} + (1 - \zeta^2)(1 - \chi^2) \right]. \quad (4.117)$$

O fluxo incidente é obtido a partir de (4.69) e (4.84):

$$j_{in} = 2c\eta = 2c\chi\zeta = \frac{2\chi\hbar\rho c^2}{E + mc^2 - V}, \quad (4.118)$$

onde usamos (4.95) e (4.103).

Dividindo (4.117) por (4.118) e utilizando (4.71), obtemos

$$\tau_P = \frac{a}{4\hbar\rho c^2|\lambda|^2\chi} \left[(E + mc^2 - V)(1 + \zeta^2)(1 + \chi^2) \frac{\sinh(2\rho a)}{2\rho a} + (E + mc^2 - V)(1 - \zeta^2)(1 - \chi^2) \right]. \quad (4.119)$$

De acordo com as definições (4.95) e (4.96), temos

$$(E + mc^2 - V)(1 + \zeta^2) = 2mc^2; \quad (4.120)$$

$$(E + mc^2 - V)(1 - \zeta^2) = 2(E - V). \quad (4.121)$$

Assim, o tempo de permanência na barreira retangular se torna

$$\tau_P = \frac{a}{2\hbar\rho c^2|\lambda|^2\chi} \left[mc^2(1 + \chi^2) \frac{\sinh(2\rho a)}{2\rho a} + (E - V)(1 - \chi^2) \right]. \quad (4.122)$$

Utilizando a relação (4.88), o tempo de auto-interferência (4.111) e o tempo de permanência (4.122), encontramos o tempo de fase $\bar{\tau}_f$ para uma barreira retangular:¹⁵

$$\bar{\tau}_f = \tau_P + \tau_i = \frac{a}{2\hbar\rho c^2|\lambda|^2\chi} \left[\frac{mV(2E - V)}{\hbar^2 k^2} (1 + \chi^2) \frac{\sinh(2\rho a)}{2\rho a} + (E - V)(1 - \chi^2) \right]. \quad (4.123)$$

Na seção anterior, calculamos o tempo de tunelamento através do método da fase estacionária para uma barreira retangular com o campo de Klein-Gordon. Como no caso não-relativístico, temos $\tau_{f(KG)}^T = \tau_{f(KG)}^R = \bar{\tau}_{f(KG)}$. Dessa forma, podemos comparar os resultados (4.35) com (4.123).

Nos gráficos que seguem, fazemos $\hbar = c = 1$ e $m = 1$.

A figura (4.7) mostra os tempos de fase calculados para energias não-relativísticas. Vemos que o efeito Hartman acontece também em Dirac. Observamos que, nesta escala de energia, ambas as teorias prevêem resultados muito semelhantes, especialmente para barreiras não muito extensas.

Contudo, quando consideramos o mesmo problema com energias relativísticas, a situação é diferente, como podemos ver na figura (4.8). Embora o efeito Hartman continue ocorrendo em ambas as teorias, seus valores discordam. Klein-Gordon prevê um tempo de fase negativo enquanto Dirac não o faz.

¹⁵A expressão (4.123) foi obtida em [53].

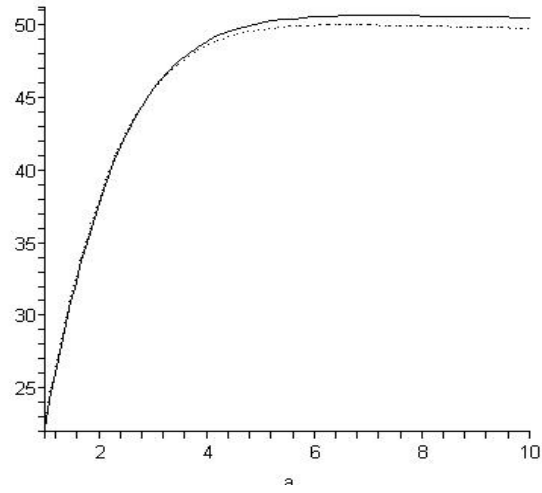


Figura 4.7: $\bar{\tau}_f$ para KG (linha contínua) e Dirac (linha tracejada) com $E = 1.01$ e $V = 0.05$ em função de a .

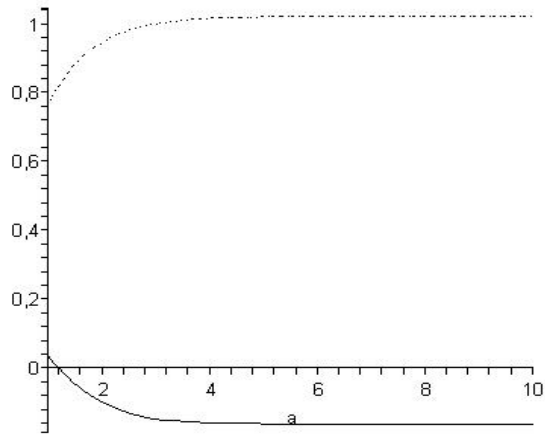


Figura 4.8: $\bar{\tau}_f$ para KG (linha contínua) e Dirac (tracejada) com $E = 3$ e $V = 3.5$ em função de a .

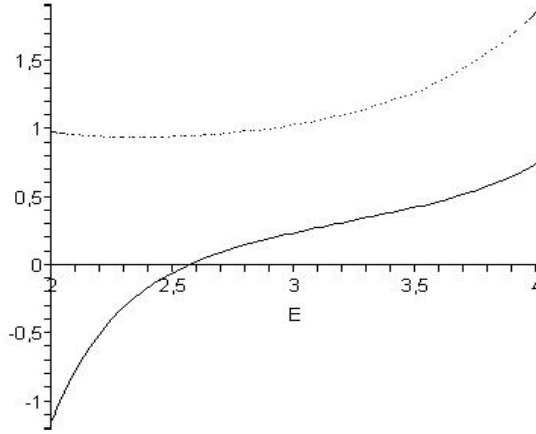


Figura 4.9: $\bar{\tau}_f$ para KG (linha contínua) e Dirac (linha tracejada) com $V = 3$ e $a = 2$ em função de E .

Por fim, vemos que as dependências dos tempos de fase segundo Klein-Gordon e segundo Dirac com respeito à energia são muito diferentes, conforme ilustrado na figura (4.9).

Mas por que os tempos de fase calculados através das equações de Klein-Gordon e de Dirac fornecem resultados diferentes, visto que a barreira retangular que utilizamos não apresenta campo magnético e, como vimos na subseção (3.2.4) para o caso não-relativístico, o spin da partícula somente é importante quando consideramos interação com esse campo?

Investiguemos.

Consideremos, primeiramente, a equação de Dirac com acoplamento mínimo (4.64):

$$\left(i\gamma^\mu D_\mu - \frac{mc}{\hbar}\right)\psi = 0, \quad (4.124)$$

onde D_μ é definido pelo acoplamento mínimo (4.2). Multiplicando (4.124) pelo operador $i\gamma^\mu D_\mu + mc/\hbar$, obtemos

$$\left[(i\gamma^\mu D_\mu)^2 - \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right]\psi = 0. \quad (4.125)$$

O primeiro termo do lado esquerdo dessa equação é

$$(i\gamma^\mu D_\mu)^2 = -\gamma^\mu \gamma^\nu D_\mu D_\nu. \quad (4.126)$$

Mas o produto das matrizes γ^μ pode ser escrito como

$$\begin{aligned}\gamma^\mu\gamma^\nu &= \frac{1}{2}(\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu) + \frac{1}{2}(\gamma^\mu\gamma^\nu - \gamma^\nu\gamma^\mu) \\ &= g^{\mu\nu} - i\sigma^{\mu\nu},\end{aligned}\tag{4.127}$$

onde usamos a relação (4.56) e a definição

$$\sigma^{\mu\nu} \equiv \frac{i}{2}[\gamma^\mu, \gamma^\nu].\tag{4.128}$$

Com isso, (4.126) se torna

$$(i\gamma^\mu D_\mu)^2 = -D^\mu D_\mu + i\sigma^{\mu\nu} D_\mu D_\nu.\tag{4.129}$$

Utilizando a propriedade $\sigma^{\mu\nu} = -\sigma^{\nu\mu}$, podemos escrever

$$\sigma^{\mu\nu} D_\mu D_\nu = \frac{1}{2}\sigma^{\mu\nu}[D_\mu, D_\nu].\tag{4.130}$$

De acordo com a definição de D_μ , temos

$$[D_\mu, D_\nu] = -i\frac{e}{\hbar c}(\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu).\tag{4.131}$$

Mas a expressão entre parênteses é a definição do tensor eletromagnético [18]:

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu.\tag{4.132}$$

Contraindo os índices de $F_{\mu\nu}$ com os de $\sigma^{\mu\nu}$, encontramos:

$$\sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu} = \sum_{jk} \sigma^{jk} F_{jk} + \sum_k (\sigma^{0k} F_{0k} + \sigma^{k0} F_{k0}),\tag{4.133}$$

aqui as somas vão de 1 até 3.

Observamos, agora, que os campos elétrico e magnético são escritos em termos das componentes de $A^\mu = (\phi, \mathbf{A})$ como

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A};\tag{4.134}$$

$$\mathbf{E} = \nabla\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}.\tag{4.135}$$

Assim, $F_{\mu\nu}$ pode ser escrito em termos desses campos como

$$F^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & -E_x & -E_y & -E_z \\ E_x & 0 & -B_z & B_y \\ E_y & B_z & 0 & -B_x \\ E_z & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.136)$$

Utilizando as propriedades de anti-simetria do tensor eletromagnético e de $\sigma^{\mu\nu}$ e as equações (4.76), (4.128) e (4.136), obtemos

$$\sum_k (\sigma^{0k} F_{0k} + \sigma^{k0} F_{k0}) = -2i\alpha \cdot \mathbf{E}. \quad (4.137)$$

De um modo semelhante, encontramos

$$\sum_{jk} \sigma^{jk} F_{jk} = -2\underline{\sigma} \cdot \mathbf{B}. \quad (4.138)$$

Nesta expressão definimos o vetor $\underline{\sigma}$, cujas componentes são dadas por

$$\underline{\sigma}^j = \frac{1}{2} \sum_{kl} \epsilon_{jkl} \sigma^{kl}, \quad (4.139)$$

sendo ϵ_{jkl} o tensor de Levi-Civita.

Com esses resultados a equação (4.125) se torna

$$\left[D^\mu D_\mu + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 - \frac{e}{\hbar c} (\underline{\sigma} \cdot \mathbf{B} - i\alpha \cdot \mathbf{E}) \right] \psi_D = 0. \quad (4.140)$$

Comparando esta expressão com a equação de Klein-Gordon com acoplamento mínimo,

$$\left[D^\mu D_\mu + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \psi_{KG} = 0, \quad (4.141)$$

vemos que a equação de Dirac, além de conter um termo de interação com o campo magnético, contém também um termo de interação com o campo elétrico que a equação de Klein-Gordon não possui.

Observamos que mesmo que o termo $\underline{\sigma} \cdot \mathbf{B}$ seja nulo, as equações de Dirac de segunda ordem (4.140) e de Klein-Gordon (4.141) são diferentes, devido à presença do termo $i\alpha \cdot \mathbf{E}$ na primeira equação. Na verdade, esse termo, no limite não-relativístico da equação de Dirac, se torna o termo de acoplamento spin-órbita [54].

Uma vez que a barreira retangular escolhida nos problemas de tunelamento é obtida a partir de um quadrvetor potencial eletromagnético com componentes espaciais nulas, vemos que, devido às equações (4.134) e (4.135), temos apenas o campo elétrico envolvido no problema. Portanto, as soluções

dessas duas equações não são iguais, devido ao “acoplamento spin-órbita”, o que explica o fato dos tempos de fase calculados através de uma ou de outra equação serem diferentes.

Capítulo 5

Conclusões

Apresentamos nesta dissertação uma revisão sobre as definições de tempos de tunelamento mais discutidas na literatura. Procuramos sempre discutir os conceitos envolvidos em cada definição, bem como interpretar cada tempo de tunelamento estudado de acordo com a visão positivista de Copenhagen da Mecânica Quântica.

Iniciamos nosso estudo no segundo capítulo, onde procuramos entender o papel do tempo na Mecânica Clássica. Concluimos que o tempo é considerado um parâmetro nessa teoria, embora possa, também, ser visto como uma variável canônica conjugada à Hamiltoniana do sistema estudado. Vimos, em seguida, que a teoria quântica associa operadores auto-adjuntos às funções dinâmicas da Mecânica Clássica. Contudo, segundo o teorema de Pauli, o mesmo não pode ser feito com o tempo, isto é, não existe um operador auto-adjunto associado à variável canonicamente conjugada à Hamiltoniana *para todos os problemas*. Assim, o tempo não é um observável no contexto da Mecânica Quântica. A primeira tarefa que nos propusemos foi tentar entender o que significa dizer que o tempo não é um observável. Devido ao grande número trabalhos experimentais sobre tempos de tunelamento que pode ser encontrado na literatura, concluímos que o tempo é uma quantidade mensurável na Mecânica Quântica.

Iniciamos o terceiro capítulo mostrando que associar uma velocidade a uma onda não é uma tarefa tão simples quanto parece. Portanto, não é muito promissor tentar definir o tempo de tunelamento como a razão entre a extensão da barreira e a velocidade do sistema quântico, pois esta última quantidade é ambígua até mesmo no caso livre. Ao revermos os trabalhos de Sommerfeld e Brillouin, concluimos que mesmo nas situações nas quais a teoria eletromagnética clássica apresenta efeitos superluminais, o princípio de causalidade relativística não é violado. Apresentamos, então, as quatro

definições de tempo de tunelamento mais discutidas na literatura: o tempo de permanência estacionário, o tempo de fase, o tempo de Büttiker e Landauer e o tempo de Larmor. Vimos que o tempo de permanência mede, como seu próprio nome sugere, o intervalo de tempo durante o qual o sistema quântico *permanece* na região da barreira, não importando se tal sistema é refletido ou transmitido. Entre nossos resultados, vimos que, em contraste com o tempo clássico, o tempo de permanência da Mecânica Quântica não pode ser escrito em termos dos instantes de entrada e de saída *do sistema* da região da barreira. O tempo de fase de tunelamento mede quanto tempo o pico do pacote de ondas leva para atravessar a barreira através da diferença entre os instantes de saída do pico transmitido na extremidade final da barreira e o de chegada do pico incidente no início da região classicamente proibida. Este tempo não pode ser confundido com o tempo que *o sistema* leva para entrar e sair da região de potencial pois, como concluímos na análise do tempo de permanência, dizer que o sistema entrou nessa região num determinado instante de tempo é uma afirmação sem sentido. Essa é, na verdade, a maior crítica ao tempo de fase. O tempo de Büttiker e Landauer associa um tempo ao sistema quântico tunelante que interage com uma barreira que possui uma modulação senoidal no tempo. A principal característica desse tempo é sua linearidade no comprimento da barreira, contudo, apenas é válido para uma barreira opaca, entre outras aproximações. O tempo de Larmor, por sua vez, considera um sistema dotado de spin e mede o tempo de interação entre este e um campo magnético confinado à região da barreira através da precessão de Larmor. Entre os resultados obtidos com a teoria não-relativística, reproduzimos a demonstração da relação entre o tempo de permanência e o de fase feita por Winful mostrando, com isso, que mesmo tempos definidos de maneira tão diferentes como esses são relacionados. Então, apresentamos cálculos explícitos para o caso de uma barreira retangular para os tempos anteriormente definidos. Vimos, assim, que nem todas as definições levam a resultados lineares no comprimento da barreira. Tomando o limite para o caso de uma barreira opaca, mostramos que muitos tempos de tunelamento independem do comprimento da barreira, ou seja, o efeito Hartman. Aliando o efeito Hartman a uma barreira retangular suficientemente extensa, demonstramos a existência de efeitos superluminais na Mecânica Quântica. Mostramos, também, que essa teoria é insatisfatória para se estudar questões associadas à violação do princípio de causalidade relativística.

Motivados pelo tunelamento superluminal obtido através da equação de Schrödinger, estudamos o tunelamento relativístico com as equações de Klein-Gordon e de Dirac no capítulo quatro. Para o campo escalar, propusemos a definição do tempo de fase e mostramos que este é escrito em termos dos números de onda para uma barreira retangular da mesma forma que sua

expressão análoga na teoria não-relativística, contudo, a dependência com a energia é muito diferente nos dois casos. Mostramos, também, o efeito Hartman relativístico na teoria de Klein-Gordon e demonstramos que a ocorrência desse efeito não depende das relações de dispersão. Além disso, constatamos que as equações de Schrödinger e de Klein-Gordon prevêm resultados semelhantes para os tempos de fase quando as energias envolvidas no problema são não-relativísticas, mas diferem nos outros casos. Concluimos, assim, que nossa proposta é uma generalização relativística adequada do conceito de tempo de tunelamento de fase.

Estudamos, em seguida, o tunelamento superluminal via Klein-Gordon e concluimos que a causalidade relativística não é violada. Na tentativa de se definir o tempo de permanência para o campo escalar, vimos que a equação de Klein-Gordon não é adequada para essa tarefa. Porém, vimos que essa definição é possível através da equação de Dirac, para a qual também apresentamos uma generalização da relação entre os tempos de fase e de permanência. Calculamos, enfim, o tempo de fase com a equação de Dirac para uma barreira retangular e comparamos o resultado com aquele obtido via equação de Klein-Gordon. Observamos que os resultados apenas coincidem para energias não-relativísticas. Explicamos a incompatibilidade dos resultados em termos do acoplamento spin-órbita que resulta da equação de Dirac, que não está presente na equação de Klein-Gordon.

No apêndice E apresentamos um resultado obtido por nós, a saber, o Sr. Bonin, o Dr. Pimentel e o Dr. Lunardi, em colaboração com o Dr. Manzoni, onde demonstramos uma relação entre os tempos de permanência e de fase para partículas relativísticas de spin¹ 0 e 1. Na demonstração dessa relação foi utilizada uma formulação hamiltoniana da teoria Duffin-Kemmer-Petiau, publicada na literatura. No entanto, recentemente emergiu um debate sobre a validade dessa formulação que, ao nosso ver, ainda não chegou a uma conclusão definitiva.²

Como nossa conclusão final, notamos que dada uma definição de tempo de tunelamento é sempre possível, em princípio, realizar-se um experimento para testá-la. Dessa forma, como as diversas definições não são, em geral, equivalentes, concluimos que pelo fato do tempo não ser um observável no contexto da teoria quântica, o *resultado da medição depende da técnica experimental empregada*. Por exemplo, podemos medir a fase do pacote de ondas e encontrar o tempo associado ao seu pico, o que nos fornecerá um resultado. Contudo, se o sistema descrito por esse mesmo pacote possuir spin, podemos aplicar um campo magnético na barreira e encontrar a precessão de

¹O artigo reproduzido naquele apêndice pode ser encontrado em [55].

²Ver [56].

Larmor realizando medições de spin do sistema. Com isso, podemos inferir o tempo de Larmor que é, em geral, diferente do tempo de fase. Dessa forma, vemos que, contrariamente à medição de energia, por exemplo, a qual é um observável e, portanto, as probabilidades de se obter um determinado valor independem da técnica utilizada, a medição de tempo, em especial, de tempo de tunelamento, depende da técnica experimental empregada.

Como trabalhos futuros podemos citar estudos formais das tentativas de operadores tempo, estudar a possibilidade de se definir o tempo de Larmor com sistemas com spins diferentes de $1/2$ e possíveis generalizações relativísticas.

Esperamos que nossas contribuições possam enriquecer essa área de pesquisa e lançar um pouco mais de luz sobre a debatida questão que é o tempo de tunelamento.

Apêndice A

Lema de Jordan

No cálculo de certas integrais do tipo

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{irz} f(z) dz,$$

somos levados a considerar a integral

$$I_R = \int_{C_R} e^{irz} f(z) dz, \quad (\text{A.1})$$

onde C_R é um semicírculo de centro na origem e raio R . O lema de Jordan, que consideraremos a seguir, estabelece condições suficientes para que esta integral tenda a zero com $R \rightarrow \infty$.¹

Seja $r > 0$ e $C_R = \{z = Re^{i\theta}, 0 \leq \theta \leq \pi\}$ no semiplano superior. Suponhamos que f seja regular nesse semiplano e que o máximo $G(R)$ de $|f(z)|$ para z em C_R tenda a zero com $R \rightarrow \infty$. Então $I_R \rightarrow 0$ com $R \rightarrow \infty$.

Demonstração. Temos

$$\begin{aligned} I_R &= \int_0^\pi e^{irR(\cos\theta + i\sin\theta)} f(Re^{i\theta}) iRe^{i\theta} d\theta \\ &= iR \int_0^\pi e^{-rR\sin\theta} f(Re^{i\theta}) e^{i(rR\cos\theta + \theta)} d\theta, \end{aligned}$$

donde

$$|I_R| \leq RG(R) \int_0^\pi e^{-rR\sin\theta} d\theta = 2RG(R) \int_0^{\pi/2} e^{-rR\sin\theta} d\theta. \quad (\text{A.2})$$

¹Conferir [57].

Como $\sin \theta \geq 2\theta/\pi$ no intervalo $0 \leq \theta \leq \pi/2$ (veja nota abaixo) temos

$$|I_R| \leq 2RG(R) \int_0^{\pi/2} e^{-2rR\theta/\pi} d\theta \quad (\text{A.3})$$

$$= \frac{\pi G(R)}{r} (1 - e^{-rR}) \rightarrow 0, \quad R \rightarrow \infty; \quad (\text{A.4})$$

Demonstra-se um resultado análogo para $r < 0$ e C_R no semiplano inferior $\text{Im } z \leq 0$.

Nota. Para demonstrar que $\sin \theta \geq 2\theta/\pi$ no intervalo $0 \leq \theta \leq \pi/2$ consideramos a função

$$f(\theta) = \sin \theta - \frac{2\theta}{\pi}.$$

cuja derivada

$$f'(\theta) = \cos \theta - \frac{2}{\pi}$$

se anula para um certo valor a , é positiva para $0 < \theta < a$ e negativa para $a < \theta < \pi/2$. A função f é então crescente no intervalo $0 < \theta < a$ e decrescente em $a < \theta < \pi/2$. Como $f(0) = f(\pi/2) = 0$, concluímos que $f(\theta) \geq 0$ em todo o intervalo $0 \leq \theta \leq \pi/2$, logo $\sin \theta \geq 2\theta/\pi$ nesse intervalo.

Apêndice B

Método da fase estacionária

O objetivo deste apêndice é apresentar de uma maneira sucinta o *método da fase estacionária*.

Consideremos a integral

$$I(x) = \int d\omega A(\omega) e^{i\omega x}. \quad (\text{B.1})$$

A função complexa $A(\omega)$ pode ser escrita como

$$A(\omega) = |A(\omega)| e^{i\phi(\omega)}. \quad (\text{B.2})$$

Então (B.1) se torna

$$I(x) = \int |A(\omega)| e^{i[\omega x + \phi(\omega)]}. \quad (\text{B.3})$$

Escrevendo a fase como

$$\varphi(\omega) = \omega x + \phi(\omega). \quad (\text{B.4})$$

A integral pode ser escrita da seguinte forma

$$I(x) = \int |A(\omega)| e^{i\varphi(\omega)} = \int |A(\omega)| \cos \varphi + i \int |A(\omega)| \sin \varphi. \quad (\text{B.5})$$

Os comportamentos qualitativos de $\cos \varphi$ e $\sin \varphi$ com respeito a ω são os mesmos. Se $|A(\omega)|$ for aproximadamente constante em torno de ω_0 e a fase φ variar muito, a integral $I(x)$ será aproximadamente nula, pois os integrandos do lado direito de (B.5) se comportarão aproximadamente como funções senoidais moduladas por uma função mais ou menos constante.

Portanto, para que $I(x)$ seja não nula, devemos ter exatamente a situação oposta: $|A(\omega)|$ com um pico em ω_0 e φ sendo estacionária em suas vizinhanças. Esta última condição é expressa como

$$\left. \frac{d\varphi}{d\omega} \right|_{\omega_0} = 0. \quad (\text{B.6})$$

Apêndice C

A barreira retangular

Quando consideramos um potencial do tipo

$$V(x) = \begin{cases} V, & 0 < x < a; \\ 0, & \text{nos outros casos,} \end{cases} \quad (\text{C.1})$$

em equações de segunda ordem na derivada espacial, como é o caso da equação de Schrödinger e da equação de Klein-Gordon, encontramos que a derivada espacial de segunda ordem do campo deve possuir descontinuidades do tipo salto nos pontos $x = 0$ e $x = a$.¹ Uma vez que a derivada espacial de segunda ordem de ψ apresenta descontinuidades do tipo salto nos extremos da barreira, sua derivada de primeira ordem deve ser contínua nesses pontos e assim deve ser também a própria função ψ . Portanto, para equações de segunda ordem na derivada espacial, o potencial (C.1) *implica* nas seguintes condições de continuidade para a função $\psi(x)$:

¹Em Schrödinger, temos:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] \psi, \quad (\text{C.2})$$

e em Klein-Gordon:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \left\{ \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 - \left[\frac{E - V(x)}{\hbar c} \right]^2 \right\} \psi. \quad (\text{C.3})$$

Essas duas equações mostram que quando o potencial $V(x)$ apresenta uma descontinuidade, $\partial^2 \psi / \partial x^2$ também a apresenta.

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0); \quad (\text{C.4})$$

$$\frac{\partial \psi_I}{\partial x}(0) = \frac{\partial \psi_{II}}{\partial x}(0); \quad (\text{C.5})$$

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a); \quad (\text{C.6})$$

$$\frac{\partial \psi_{II}}{\partial x}(a) = \frac{\partial \psi_{III}}{\partial x}(a); \quad (\text{C.7})$$

onde $\psi_I(x)$, $\psi_{II}(x)$ e $\psi_{III}(x)$ são as soluções da equação considerada nas regiões $x < 0$, $0 < x < a$ e $x > a$, respectivamente.

Suponhamos que as soluções nas três regiões sejam dadas por

$$\psi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}; \quad (\text{C.8})$$

$$\psi_{II}(x) = Ce^{i\tilde{k}x} + De^{-i\tilde{k}x}; \quad (\text{C.9})$$

$$\psi_{III}(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}. \quad (\text{C.10})$$

Dessa forma, as condições (C.4-C.7) levam às seguintes equações:

$$A + B = C + D; \quad (\text{C.11})$$

$$ik(A - B) = i\tilde{k}(C - D); \quad (\text{C.12})$$

$$Ce^{i\tilde{k}a} + De^{-i\tilde{k}a} = Fe^{ika} + Ge^{-ika}; \quad (\text{C.13})$$

$$i\tilde{k}(Ce^{i\tilde{k}a} - De^{-i\tilde{k}a}) = ik(Fe^{ika} - Ge^{-ika}). \quad (\text{C.14})$$

Uma vez que temos seis incógnitas e quatro equações linearmente independentes relacionando-as entre si, podemos escolher arbitrariamente duas dessas incógnitas para serem nossas variáveis independentes, enquanto escrevemos as quatro restantes em termos delas. Escolhemos A e G para serem nossas variáveis independentes. Essa escolha é feita porque devido às escolhas de sinais que fizemos nesta dissertação essas duas quantidades são as amplitudes das ondas incidentes da esquerda e da direita, respectivamente.

Utilizando as equações (C.11) e (C.12) podemos escrever C e D em termos de A e B :

$$C = \frac{1}{2} \left[\left(1 + \frac{k}{\tilde{k}} \right) A + \left(1 - \frac{k}{\tilde{k}} \right) B \right]; \quad (\text{C.15})$$

$$D = \frac{1}{2} \left[\left(1 - \frac{k}{\tilde{k}} \right) A + \left(1 + \frac{k}{\tilde{k}} \right) B \right]. \quad (\text{C.16})$$

Semelhantemente, utilizando (C.13) e (C.14), escrevemos F e G em termos de C e D :

$$F = \frac{1}{2} \left[\left(1 + \frac{\tilde{k}}{k} \right) e^{i\tilde{k}a} C + \left(1 - \frac{\tilde{k}}{k} \right) e^{-i\tilde{k}a} D \right] e^{-ika}; \quad (\text{C.17})$$

$$G = \frac{1}{2} \left[\left(1 - \frac{\tilde{k}}{k} \right) e^{i\tilde{k}a} C + \left(1 + \frac{\tilde{k}}{k} \right) e^{-i\tilde{k}a} D \right] e^{ika}. \quad (\text{C.18})$$

Podemos escrever F e G em termos de A e B simplesmente substituindo as expressões (C.15) e (C.16) em (C.17) e (C.18), resultando em:

$$F = d_1 A + d_2 B; \quad (\text{C.19})$$

$$G = d_3 A + d_4 B; \quad (\text{C.20})$$

sendo

$$d_1 = \frac{e^{-ika}}{2k\tilde{k}} [i(k^2 + \tilde{k}^2)\text{sen}(\tilde{k}a) + 2k\tilde{k}\cos(\tilde{k}a)]; \quad (\text{C.21})$$

$$d_2 = \frac{-ie^{-ika}}{2k\tilde{k}} (k^2 - \tilde{k}^2)\text{sen}(\tilde{k}a); \quad (\text{C.22})$$

$$d_3 = \frac{ie^{ika}}{2k\tilde{k}} (k^2 - \tilde{k}^2)\text{sen}(\tilde{k}a); \quad (\text{C.23})$$

$$d_4 = \frac{e^{ika}}{2k\tilde{k}} [-i(k^2 + \tilde{k}^2)\text{sen}(\tilde{k}a) + 2k\tilde{k}\cos(\tilde{k}a)]. \quad (\text{C.24})$$

Devido às equações (C.19) e (C.20) podemos escrever B e F em termos de A e G :

$$B = -\frac{d_3}{d_4} A + \frac{1}{d_4} G; \quad (\text{C.25})$$

$$F = \left(\frac{d_1 d_4 - d_2 d_3}{d_4} \right) A + \frac{d_2}{d_4} G. \quad (\text{C.26})$$

Substituindo (C.21-C.24) nessas equações, encontramos:

$$B = \frac{-i(k^2 - \tilde{k}^2)\text{sen}(\tilde{k}a)}{d_5(k, \tilde{k}; a)} A + \frac{2k\tilde{k}e^{-ika}}{d_5(k, \tilde{k}; a)} G; \quad (\text{C.27})$$

$$F = \frac{2k\tilde{k}e^{-ika}}{d_5(k, \tilde{k}; a)} A - \frac{i(k^2 - \tilde{k}^2)\text{sen}(\tilde{k}a)e^{-i2ka}}{d_5(k, \tilde{k}; a)} G, \quad (\text{C.28})$$

sendo o fator $d_5(k, \tilde{k}; a)$ definido como

$$d_5(k, \tilde{k}; a) \equiv 2k\tilde{k} \cos(\tilde{k}a) - i(k^2 + \tilde{k}^2) \text{sen}(\tilde{k}a). \quad (\text{C.29})$$

Substituindo a equação (C.27) nas expressões (C.15) e (C.16), obtemos:

$$C = \frac{k(k + \tilde{k})e^{-i\tilde{k}a}}{d_5(k, \tilde{k}; a)}A - \frac{k(k - \tilde{k})e^{-ika}}{d_5(k, \tilde{k}; a)}G; \quad (\text{C.30})$$

$$D = -\frac{k(k - \tilde{k})e^{i\tilde{k}a}}{d_5(k, \tilde{k}; a)}A + \frac{k(k + \tilde{k})e^{-ika}}{d_5(k, \tilde{k}; a)}G. \quad (\text{C.31})$$

As expressões (C.27), (C.28), (C.30) e (C.31) são as expressões procuradas que apresentam os coeficientes B , C , D e F em termos de A e de G . Contudo, nesta dissertação consideramos apenas os casos nos quais não há ondas incidentes vindas da direita. Em tais casos temos que o coeficiente G é nulo e escrevemos:

$$B = -\frac{i(k^2 - \tilde{k}^2) \text{sen}(\tilde{k}a)}{d_5(k, \tilde{k}; a)}A; \quad (\text{C.32})$$

$$C = \frac{k(k + \tilde{k})e^{-i\tilde{k}a}}{d_5(k, \tilde{k}; a)}A; \quad (\text{C.33})$$

$$D = -\frac{k(k - \tilde{k})e^{i\tilde{k}a}}{d_5(k, \tilde{k}; a)}A; \quad (\text{C.34})$$

$$F = \frac{2k\tilde{k}e^{-ika}}{d_5(k, \tilde{k}; a)}A. \quad (\text{C.35})$$

Nas situações nas quais o fenômeno de tunelamento ocorre, temos que k é um número real (associado a um modo propagante fora da região da barreira), mas $\tilde{k}$ é um número imaginário (associado a um modo evanescente na região da barreira). Sendo assim, escrevemos $\tilde{k} = i\rho$, sendo ρ um número real. Observamos que

$$\cos(\tilde{k}a) = \cos(i\rho a) = \cosh(\rho a); \quad (\text{C.36})$$

$$\text{sen}(\tilde{k}a) = \text{sen}(i\rho a) = i \text{senh}(\rho a). \quad (\text{C.37})$$

Além disso, temos que

$$d_5(k, \tilde{k}; a) = d_5(k, i\rho; a) = d(k, \rho; a). \quad (\text{C.38})$$

Nesta última expressão, $d(k, \rho; a)$ é a função definida pela equação (3.185). Com isso, as expressões (C.32-C.35) se tornam:

$$B = \frac{(k^2 + \rho^2)\sinh(\rho a)}{d(k, \rho; a)} A; \quad (\text{C.39})$$

$$C = \frac{k(k + i\rho)e^{\rho a}}{d(k, \rho; a)} A; \quad (\text{C.40})$$

$$D = -\frac{k(k - i\rho)e^{-\rho a}}{d(k, \rho; a)} A; \quad (\text{C.41})$$

$$F = \frac{i2k\rho e^{-ika}}{d(k, \rho; a)} A. \quad (\text{C.42})$$

Apêndice D

Barreira dependente do tempo

Neste apêndice, derivaremos a expressão (3.247).

Consideremos a equação de Schrödinger (3.238) com o Hamiltoniano dado por (3.239) e com o potencial (3.240). Como vimos, as soluções nas regiões $x < 0$, $0 < x < a$ e $x > a$ são dadas respectivamente por (3.241), (3.245) e (3.242). Tais soluções podem ser reescritas como:

$$\psi_I(x, t) = [Ae^{ikx} + Be^{-ikx} + B_+e^{-ik_+x}e^{-i\omega t} + B_-e^{-ik_-x}e^{i\omega t}] e^{-iEt/\hbar}, \quad (\text{D.1})$$

$$\begin{aligned} \psi_{II}(x, t) = & \left\{ \frac{2\hbar\omega}{V_1}Z(x) + [C_+e^{-\rho_+x} + D_+e^{\rho_+x} + Z(x)] e^{-i\omega t} + \right. \\ & \left. + [C_-e^{-\rho_-x} + D_-e^{\rho_-x} - Z(x)] e^{i\omega t} \right\} e^{-iEt/\hbar}; \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

$$\psi_{III}(x, t) = [Fe^{ikx} + F_+e^{ik_+x}e^{-i\omega t} + F_-e^{ik_-x}e^{i\omega t}] e^{-iEt/\hbar}. \quad (\text{D.3})$$

Em $\psi_{II}(x, t)$, introduzimos a função:

$$Z(x) \equiv \frac{V_1}{2\hbar\omega}(Ce^{-\rho x} + De^{\rho x}), \quad (\text{D.4})$$

e, no que segue, denotaremos sua derivada com respeito à posição por $Z'(x)$.

Pelos mesmos motivos mencionados no apêndice C, temos as quatro condições de continuidade:

$$\psi_I(0, t) = \psi_{II}(0, t); \quad (D.5)$$

$$\frac{\partial \psi_I}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial \psi_{II}}{\partial x}(0, t); \quad (D.6)$$

$$\psi_{II}(a, t) = \psi_{III}(a, t); \quad (D.7)$$

$$\frac{\partial \psi_{II}}{\partial x}(a, t) = \frac{\partial \psi_{III}}{\partial x}(a, t). \quad (D.8)$$

Levando em consideração (D.1) e (D.2), a condição (D.5) fornece:

$$\begin{aligned} A + B + B_+ e^{-i\omega t} + B_- e^{i\omega t} &= \frac{2\hbar\omega}{V_1} Z(0) + [C_+ + D_+ + Z(0)] e^{-i\omega t} + \\ &+ [C_- + D_- - Z(0)] e^{i\omega t}. \end{aligned} \quad (D.9)$$

Uma vez que as funções $e^{in\omega t}$, com n inteiro, são linearmente independentes, a equação acima nos fornece três equações:

$$A + B = \frac{2\hbar\omega}{V_1} Z(0); \quad (D.10)$$

$$B_{\pm} = C_{\pm} + D_{\pm} \pm Z(0). \quad (D.11)$$

De um modo semelhante, as demais condições (D.6-D.8), juntamente com (D.1-D.3), nos fornecem:

$$ik(A - B) = \frac{2\hbar\omega}{V_1} Z'(0); \quad (D.12)$$

$$-ik_{\pm} B_{\pm} = -\rho_{\pm}(C_{\pm} - D_{\pm}) \pm Z'(0); \quad (D.13)$$

$$\frac{2\hbar\omega}{V_1} Z(a) = F e^{ika}; \quad (D.14)$$

$$C_{\pm} e^{-\rho_{\pm} a} + D_{\pm} e^{\rho_{\pm} a} \pm Z(a) = F_{\pm} e^{ik_{\pm} a}; \quad (D.15)$$

$$\frac{2\hbar\omega}{V_1} Z'(a) = ik F e^{ika}; \quad (D.16)$$

$$-\rho_{\pm}(C_{\pm} e^{-\rho_{\pm} a} - D_{\pm} e^{\rho_{\pm} a}) \pm Z'(a) = ik_{\pm} F_{\pm} e^{ik_{\pm} a}. \quad (D.17)$$

Observamos que temos 12 equações linearmente independentes e 13 incógnitas, situação que nos permite escrever 12 coeficientes em termos de apenas um. Contudo, para nossos propósitos, precisamos apenas escrever F_+ e F_- em termos de F e, em seguida, identificarmos o que é F .

Partindo das equações (D.11) e (D.13), podemos escrever $C_{\pm}$ e $D_{\pm}$ em termos de $B_{\pm}$, $Z(0)$ e $Z'(0)$:

$$2\rho_{\pm}C_{\pm} = (\rho_{\pm} + ik_{\pm})B_{\pm} \mp [\rho_{\pm}Z(0) - Z'(0)]; \quad (D.18)$$

$$2\rho_{\pm}D_{\pm} = (\rho_{\pm} - ik_{\pm})B_{\pm} \mp [\rho_{\pm}Z(0) + Z'(0)]. \quad (D.19)$$

Com as relações (D.15) e (D.17), escrevemos $C_{\pm}$ e $D_{\pm}$ em termos de $F_{\pm}$, $Z(a)$ e $Z'(a)$:

$$2\rho_{\pm}C_{\pm} = (\rho_{\pm} - ik_{\pm})e^{\rho_{\pm}a}F_{\pm}e^{ik_{\pm}a} \mp [\rho_{\pm}Z(a) - Z'(a)]e^{\rho_{\pm}a}; \quad (D.20)$$

$$2\rho_{\pm}D_{\pm} = (\rho_{\pm} + ik_{\pm})e^{-\rho_{\pm}a}F_{\pm}e^{ik_{\pm}a} \mp [\rho_{\pm}Z(a) + Z'(a)]e^{-\rho_{\pm}a}. \quad (D.21)$$

Igualando (D.18) com (D.20) e (D.19) com (D.21), obtemos a seguinte relação entre $F_{\pm}$ e $B_{\pm}$ e a função $Z(x)$ e sua derivada calculadas nos extremos da barreira:

$$M(k_{\pm}, \rho_{\pm}) \begin{bmatrix} F_{\pm} \\ B_{\pm}e^{-ik_{\pm}a} \end{bmatrix} = \pm e^{-ik_{\pm}a} \begin{bmatrix} \eta_1^{\pm} \\ \eta_2^{\pm} \end{bmatrix}. \quad (D.22)$$

Nesta expressão matricial, temos:

$$M(k_{\pm}, \rho_{\pm}) \equiv \begin{bmatrix} (\rho_{\pm} + ik_{\pm})e^{-\rho_{\pm}a} & -(\rho_{\pm} - ik_{\pm}) \\ (\rho_{\pm} - ik_{\pm})e^{\rho_{\pm}a} & -(\rho_{\pm} + ik_{\pm}) \end{bmatrix}, \quad (D.23)$$

e

$$\eta_1^{\pm} = [\rho_{\pm}Z(a) + Z'(a)]e^{-\rho_{\pm}a} - [\rho_{\pm}Z(0) + Z'(0)]; \quad (D.24)$$

$$\eta_2^{\pm} = [\rho_{\pm}Z(a) - Z'(a)]e^{\rho_{\pm}a} - [\rho_{\pm}Z(0) - Z'(0)]. \quad (D.25)$$

A matriz inversa de (D.23) é:

$$M^{-1}(k_{\pm}, \rho_{\pm}) = \frac{1}{\det[M(k_{\pm}, \rho_{\pm})]} \begin{bmatrix} -(\rho_{\pm} + ik_{\pm}) & (\rho_{\pm} - ik_{\pm}) \\ -(\rho_{\pm} - ik_{\pm})e^{\rho_{\pm}a} & -(\rho_{\pm} + ik_{\pm})e^{-\rho_{\pm}a} \end{bmatrix}, \quad (D.26)$$

o termo $\det[M(k_{\pm}, \rho_{\pm})]$ é o determinante da matriz $M(k_{\pm}, \rho_{\pm})$, dado por:

$$\det[M(k_{\pm}, \rho_{\pm})] = 2(\rho_{\pm}^2 - k_{\pm}^2)\sinh(\rho_{\pm}a) - i4k_{\pm}\rho_{\pm}\cosh(\rho_{\pm}a). \quad (D.27)$$

Multiplicando (D.22) por (D.26) pela direita, obtemos:

$$\begin{bmatrix} F_{\pm} \\ B_{\pm} e^{-ik_{\pm}a} \end{bmatrix} = \pm \frac{e^{-ik_{\pm}a}}{\det[M(k_{\pm}, \rho_{\pm})]} \times \begin{bmatrix} -\rho_{\pm}(\eta_1^{\pm} - \eta_2^{\pm}) - ik_{\pm}(\eta_1^{\pm} + \eta_2^{\pm}) \\ -\rho_{\pm}(\eta_1^{\pm} e^{\rho_{\pm}a} + \eta_2^{\pm} e^{-\rho_{\pm}a}) + ik_{\pm}(\eta_1^{\pm} e^{\rho_{\pm}a} - \eta_2^{\pm} e^{-\rho_{\pm}a}) \end{bmatrix}. \quad (\text{D.28})$$

A primeira linha dessa expressão matricial nos fornece:

$$F_{\pm} = \mp \frac{e^{-ik_{\pm}a}}{\det[M(k_{\pm}, \rho_{\pm})]} [\rho_{\pm}(\eta_1^{\pm} - \eta_2^{\pm}) + ik_{\pm}(\eta_1^{\pm} + \eta_2^{\pm})]. \quad (\text{D.29})$$

De acordo com (D.24) e (D.25), temos:

$$\eta_1^{\pm} - \eta_2^{\pm} = -2[Z'(0) + \rho_{\pm}Z(a)\sinh(\rho_{\pm}a) - Z'(a)\cosh(\rho_{\pm}a)]; \quad (\text{D.30})$$

$$\eta_1^{\pm} + \eta_2^{\pm} = -2[\rho_{\pm}Z(0) - \rho_{\pm}Z(a)\cosh(\rho_{\pm}a) + Z'(a)\sinh(\rho_{\pm}a)]. \quad (\text{D.31})$$

Com isso, (D.29) se torna:

$$\begin{aligned} F_{\pm} = \pm \frac{2\rho_{\pm}e^{-ik_{\pm}a}}{\det[M(k_{\pm}, \rho_{\pm})]} \{ & Z'(0) + ik_{\pm}Z(0) + \\ & + Z(a) [\rho_{\pm}\sinh(\rho_{\pm}a) - ik_{\pm}\cosh(\rho_{\pm}a)] + \\ & + Z'(a) \left[\frac{ik_{\pm}}{\rho_{\pm}}\sinh(\rho_{\pm}a) - \cosh(\rho_{\pm}a) \right] \}. \end{aligned} \quad (\text{D.32})$$

Das equações (D.14) e (D.16), encontramos:

$$Z(a) = \frac{V_1}{2\hbar\omega} F e^{ika}; \quad (\text{D.33})$$

$$Z'(a) = ik \frac{V_1}{2\hbar\omega} F e^{ika}. \quad (\text{D.34})$$

Utilizando a definição da função $Z(x)$ (equação D.4) e sua derivada com respeito a x calculadas no ponto $x = a$ e igualando os resultados com as equações acima, podemos escrever C e D em termos de F . Fazendo isso, obtemos:

$$C = \left(\frac{\rho - ik}{2\rho} \right) e^{\rho a} F e^{ika}, \quad (\text{D.35})$$

$$D = \left(\frac{\rho + ik}{2\rho} \right) e^{-\rho a} F e^{ika}. \quad (\text{D.36})$$

Substituindo esses resultados em (D.4), encontramos $Z(x)$ em termos de F :

$$Z(x) = \frac{V_1}{2\hbar\omega} F e^{ika} \left\{ \cosh[\rho(a-x)] - i \frac{k}{\rho} \sinh[\rho(a-x)] \right\}. \quad (\text{D.37})$$

Calculando esta expressão e sua derivada com respeito à posição no ponto $x = 0$, obtemos:

$$Z(0) = \frac{V_1}{2\hbar\omega} F e^{ika} \left[\cosh(\rho a) - \frac{ik}{\rho} \sinh(\rho a) \right]; \quad (\text{D.38})$$

$$Z'(0) = \frac{V_1}{2\hbar\omega} F e^{ika} [ik \cosh(\rho a) - \rho \sinh(\rho a)]. \quad (\text{D.39})$$

Substituindo os resultados (D.33), (D.34), (D.38) e (D.39) em (D.32), encontramos finalmente:

$$\begin{aligned} F_{\pm} = \pm \frac{V_1}{2\hbar\omega} \frac{F e^{i(k-k_{\pm}a)}}{\det[M(k_{\pm}, \rho_{\pm})]} \left\{ (\rho_{\pm}^2 - k_{\pm}k) \sinh(\rho_{\pm}a) + \right. \\ \left. -(\rho^2 - k_{\pm}k) \frac{\rho_{\pm}}{\rho} \sinh(\rho a) + i(k + k_{\pm}) \rho_{\pm} [\cosh(\rho a) - \cosh(\rho_{\pm}a)] \right\}, \end{aligned} \quad (\text{D.40})$$

que é a expressão (3.247).

Resta-nos, agora, verificar o que o coeficiente F representa. Das expressões (D.4), (D.10), (D.12), (D.14) e (D.16), encontramos:

$$A + B = C + D; \quad (\text{D.41})$$

$$ik(A - B) = -\rho(C - D); \quad (\text{D.42})$$

$$C e^{-\rho a} + D e^{\rho a} = F e^{ika}; \quad (\text{D.43})$$

$$-\rho(C e^{-\rho a} - D e^{\rho a}) = ik F e^{ika}. \quad (\text{D.44})$$

Estas equações são idênticas às expressões (C.11-C.14) quando fazemos $\tilde{k} = i\rho$ e $G = 0$. Portanto, vemos que as expressões (D.41-D.44) são equações que relacionam os coeficientes de uma barreira estática, como aquela apresentada no apêndice C. Dessa forma, identificamos F com a amplitude da onda transmitida de uma barreira estática.

Apêndice E

Relação entre tempos tunelamento para bosons

Resumo

Obtemos uma relação entre os tempos de fase (extrapolados) e o tempo de permanência no contexto do tunelamento relativístico de bosons escalares e vetoriais, generalizando, assim, uma relação recentemente obtida por *Winful et al.* utilizando as equações de Schrödinger e de Dirac. Discutimos os problemas envolvidos na tentativa de se obter uma tal relação nos formalismos de Klein-Gordon e de Proca e demonstramos que a teoria alternativa de Duffin-Kemmer-Petiau fornece uma estrutura aceitável para se obter a tal generalização.

Relation between quantum tunneling times for bosons

C.A. Bonin,^{*, 1} J.T. Lunardi,^{†, 2} L.A. Manzoni,^{‡, 3} B.M. Pimentel^{*, 4}

^{*}*Instituto de Física Teórica, Universidade Estadual Paulista. Rua Pamplona 145, CEP 01405-900, São Paulo, SP, Brazil*

[†]*Grupo de Física Teórica e Modelagem Matemática, Departamento de Matemática e Estatística, Universidade Estadual de Ponta Grossa. Av. Gal. Carlos Cavalcanti 4748, CEP 84032-900, Ponta Grossa, PR, Brazil*

[‡]*Department of Physics and Astronomy, Macalester College, 1600 Grand Avenue, Saint Paul, MN 55105, USA*

5

We obtain a relation between (extrapolated) phase times and dwell time in the context of relativistic quantum tunneling of scalar and vector bosons, thus generalizing a relation recently obtained by Winful *et al.* using the Schrödinger and Dirac equations. We discuss the drawbacks involved in the attempting of obtaining such a relation within Klein-Gordon and Proca formalisms, and demonstrate that the alternative theory of Duffin-Kemmer-Petiau furnishes a suitable framework to obtain such a generalization.

E.1 Introduction

One of the oldest, and still controversial, problems in quantum mechanics is to find an unambiguous definition of the time scale characterizing the tunneling of a particle (or a wavepacket) through a potential barrier (the difficulties are related to the fact that in quantum mechanics time is considered as a parameter rather than as an observable [58]). From the several tunneling times which have been proposed (see, e.g., [59, 60]) the phase time, or group delay time, and the dwell time emerge as the most accepted ones [59].

These two definitions of time describe different aspects of the tunneling process. While the phase time is a measure of the time it takes for the peak of wave packet to tunnel through the potential, the dwell time is a measure

¹bonin@ift.unesp.br

²**Corresponding author:** lunardi@lagash.dft.unipa.it Presently at Dipartimento di Fisica e Tecnologie Relative, Università di Palermo. Viale delle Scienze, Edificio 18. I-90128 Palermo, Italy

³manzoni@macalester.edu

⁴pimentel@ift.unesp.br

of the time spent by the particle on the potential region. Despite of this, Winful [61] (see also [62, 59]) provided an elegant general proof, based on the properties of the Schrödinger equation, that these two times are related by

$$\tau_d = \bar{\tau}_p + \frac{\text{Im}(R)}{k} \hbar \frac{\partial k}{\partial E} , \quad (\text{E.1})$$

where k (E) is the wavelength (energy) of the particle, τ_d is the dwell time, R is the reflection coefficient and $\bar{\tau}_p$ is the phase time averaged over the reflected and transmitted channels (see below). The last term on the r.h.s. of the above equation is due to the interference between the incident and reflected waves to the left of the potential.

The importance of the above expression is, as observed by Winful [61], that it unifies two of the most important definitions of time associated with quantum tunneling (in a previous work Winful showed that an analogous relation holds also in the context of the tunneling of classical electromagnetic waves [63]). Therefore, it is natural to ask if this relation generalizes to relativistic quantum mechanics (specially in the light of the recent interest on relativistic quantum tunneling - see [64, 65], and references there cited). In fact, Winful *et al.* [64] considered such a relativistic generalization by obtaining the equivalent of (E.1) for spin 1/2 particles, that is, using Dirac's equation. One may then ask: Is this a universally valid relation? If so, it should also generalize for bosons. In order to analyze this question, a natural approach would be to start from Klein-Gordon (KG) equation to obtain the corresponding relation for scalar particles. However, following these lines one would fall into serious difficulties, the main one being the fact that it is not even clear if we can assign a sound physical interpretation to concepts such as dwell time in this context. In fact, such interpretation depends on a consistent definition of a probability density, which is well known to be impossible in this case due to the appearance of a second order time derivative in the KG equation⁶. One would find similar difficulties if starting from Proca equations to obtain the above mentioned generalization for vector bosons.

Therefore, it seems that, in order to consistently analyze the tunneling problem for bosons in the context of relativistic quantum mechanics, we must look for an alternative to the KG and Proca theories. Such an alternative was proposed by Duffin, Kemmer, and Petiau [66], which constructed a first-order equation, similar to the Dirac one, to describe both spin 0 and spin 1

⁶A probabilistic interpretation requires, as usual, that the particle is localized in a region large when compared to the Compton wavelength and that it interacts with weak and slowly varying external fields (see [72]).

particles. The Duffin-Kemmer-Petiau (DKP) theory has recently been the subject of a renewed interest in the contexts of quantum field theory and curved space-times, where several of its applications have been considered. Beside that, the issue of its equivalence (or not) to the KG and Proca theories has been investigated in depth, and it was demonstrated that DKP theory can be nonequivalent to KG/Proca in some situations involving interactions (see, e.g., [67, 68] and references there cited). However, one of the main differences (and advantages) of DKP theory has been largely overlooked (see, however, [69, 70]), namely the fact that DKP theory allows a consistent definition of a probability density, thus providing a well defined single-particle relativistic quantum mechanics of bosons (spins 0 and 1), which is not possible within the frameworks of KG and Proca theories, as it is well known. In this report we will demonstrate that all the concepts involved in the relativistic generalization of (E.1) are well defined within the DKP theory, therefore allowing its generalization for bosons.

In Section E.2 we introduce some basics of DKP theory, as needed for our purposes (for more in depth treatments we refer to the literature. See, e.g., [67, 68] and references there cited). In addition, we introduce the definition of the four-vector probability current density and discuss the particularities of introducing interactions in the DKP theory. Next, in Section III, we restrict ourselves to the one dimensional case and show that the usual definition of dwell time can be extended for the treatment of bosons in the context of DKP theory. After that we proceed to derive the generalization of (E.1) for scalar and vector bosons. Our final comments are presented in Section V. Throughout this work $g^{\mu\nu}$ is the metric of Minkowski space-time with signature $(+---)$. We use natural units ($\hbar = c = 1$) during the calculations.

E.2 DKP theory

The free DKP equation is a first-order equation in the space-time derivatives, and is formally identical to the Dirac equation [66]:

$$(i\beta^\mu\partial_\mu - m)\psi = 0 . \quad (\text{E.2})$$

However, the algebra obeyed by the matrices β^μ is

$$\beta^\mu\beta^\nu\beta^\rho + \beta^\rho\beta^\nu\beta^\mu = \beta^\mu g^{\nu\rho} + \beta^\rho g^{\nu\mu} . \quad (\text{E.3})$$

It was shown that there are only two non-trivial representations of the matrices β^μ [71]: one 5×5 and another 10×10 corresponding, respectively, to spin

0 and spin 1 particles. We choose a representation in which β^0 is hermitian and β^j anti-hermitian.

The equation (E.2) can easily be written in a Schrödinger-like form [67]:

$$i\partial_t\psi = H_0\psi , \quad (\text{E.4})$$

with the free Hamiltonian

$$H_0 = iS^{j0}\partial_j + m\beta^0 , \quad (\text{E.5})$$

where

$$S^{\mu\nu} \equiv [\beta^\mu, \beta^\nu] . \quad (\text{E.6})$$

Now, the procedure to obtain the conserved current density is standard [72]. Multiplying (E.4) from the left by $\psi^\dagger$ and subtracting from it the hermitian conjugate of (E.4) multiplied from the right by ψ , we obtain the continuity-like equation (see also [70])

$$\partial_t (\psi^\dagger\psi) + \partial_j (\psi^\dagger S^{0j}\psi) = 0 , \quad (\text{E.7})$$

which suggests that $(\psi^\dagger\psi, \psi^\dagger S^{0j}\psi)$ might be considered as our probability current. Now, introducing

$$\eta^{\mu\nu} \equiv (\beta^\mu\beta^\nu + \beta^\nu\beta^\mu) - g^{\mu\nu} ; \quad \bar{\psi} \equiv \psi^\dagger\eta^{00} , \quad (\text{E.8})$$

and noticing that $(\eta^{00})^2 = 1$ ⁷, after some simple algebra, we can put equation (E.7) in a covariant form

$$\partial_\mu j^\mu = 0 , \quad (\text{E.9})$$

with the covariant current density given by (see also Ref. [70])

$$j^\mu = \frac{1}{m} (\bar{\psi}\eta^{\mu\nu}\psi) u_\nu , \quad (\text{E.10})$$

where u_ν is the observer's four-velocity, and the factor $1/m$ is necessary to give the correct dimensions to j^μ .

In the observer's (laboratory) reference frame the above current reduces to $j^\mu = \frac{1}{m} (\bar{\psi}\eta^{\mu 0}\psi)$, and it is clear that its time component, $j^0 = \psi^\dagger\psi$, satisfies the requirement of being non negative, such that j^μ can be interpreted in the usual way as a conserved *probability current density*, with its temporal component being the probability density. This is in marked contrast with

⁷See reference [67]. But notice that there $\eta^{\mu\nu}$ refers to the metric, and ours η^{00} is referred to as η^0 .

the KG (and Proca) theory, where no such construction seems to be possible [72].

We can introduce interaction with an electromagnetic field through the minimal coupling procedure. Starting directly from the Schrödinger-like equation (E.4) and making the usual substitution $\partial_\mu \rightarrow D_\mu = \partial_\mu - ieA_\mu$, we obtain the following interacting Hamiltonian

$$H = iS^{j0}D_j - eA^0 + m\beta^0. \quad (\text{E.11})$$

Here it is worth to mention that, due to the algebra of the matrices β^μ , this procedure is not unique. Had we performed the minimal substitution in (E.2) the Hamiltonian we would obtain would be related to the above by $H' = H + \theta$, where $\theta = i\frac{e}{2m}F_{\alpha\mu}(\beta^\mu\beta^0\beta^\alpha + \beta^\mu g^{0\alpha})$ is called an anomalous term. However, it was shown in [73, 67] that such term has no physical meaning and it is in fact zero when we work with the physical components of the DKP field, that is, when we project the spin 0 and spin 1 sectors of the theory from general representations of the β^μ matrices [71]. Therefore, we will use (E.11) as our Hamiltonian with ψ understood as the physical DKP field.

E.3 Relation between τ_d and $\bar{\tau}_p$ for bosons

From now on we will restrict ourselves to the one dimensional tunneling problem. In the laboratory system, the DKP Hamiltonian in the presence of a time-independent potential $V(z)$, introduced as the temporal component of the four vector potential, can be written as

$$H = iS^{30}\partial_z - V(z) + m\beta^0, \quad (\text{E.12})$$

where we absorbed e into the definition of $V(z)$, which by its turn is assumed to be a smooth function that vanishes outside the interval $0 < z < a$. The stationary one-dimensional scattering problem is then described by the time-independent equation

$$(iS^{30}\partial_z - V(z) + m\beta^0)\psi = E\psi, \quad (\text{E.13})$$

which outside the potential region has the general solution

$$\psi_I^{(E)}(z) = u(k)e^{ikz} + Ru(-k)e^{-ikz} \quad (\text{E.14})$$

and

$$\psi_{III}^{(E)}(z) = Tu(k)e^{ik(z-a)}, \quad (\text{E.15})$$

where, $u(k)$ is a five (ten) component vector column, corresponding to the scalar (vector) solution. Here $k = \sqrt{E^2 - m^2}$ and the subscripts I and III refer, respectively, to the regions $z < 0$ and $z > a$. In (E.14), the first term corresponds to the incident wave and the second term stands for the wave reflected at the potential, while in the region III the solution corresponds to the transmitted wavefunction. In the above expressions the coefficients of reflection, $R(E)$, and transmission, $T(E)$, are complex functions of the energy and can be written as

$$R(E) = |R|e^{i\varphi_r} ; \quad T(E) = |T|e^{i\varphi_t} , \quad (\text{E.16})$$

where φ_r and φ_t are the reflection and transmission phases, respectively.

Let us now define the time scales characterizing the tunneling process. The (extrapolated) transmitted and reflected phase times are defined as (see [59, 61] and references there cited)

$$\tau_p^r = \frac{d\varphi_r}{dE} ; \quad \tau_p^t = \frac{d\varphi_t}{dE} , \quad (\text{E.17})$$

respectively, and $\bar{\tau}_p$ is defined as

$$\bar{\tau}_p \equiv |R|^2 \tau_p^r + |T|^2 \tau_p^t . \quad (\text{E.18})$$

Here we once again notice the relevance of using the DKP theory to address the boson tunneling problem. While it is possible to *formally* define the relations (E.16)-(E.18) in the KG/Proca theories, the probabilistic interpretation of (E.18) would not be possible in such cases. In the DKP theory, however, $\bar{\tau}_p$ has the usual interpretation as the phase time averaged over the transmitted and reflected channels.

The dwell time is defined as the time spent by the particle in the region of the potential [74, 75], that is, the probability of finding the particle in $0 \leq z \leq a$ divided by the incident flux of particles. Again, while it is not possible to define the dwell time in the KG and Proca theories, in the DKP theory it is given by the usual expression

$$\tau_d = \frac{\int_0^a j^0 dz}{j_{in}} = \frac{\frac{1}{m} \int_0^a \psi^\dagger \psi dz}{j_{in}} , \quad (\text{E.19})$$

where the incident flux is given by

$$j_{in} = \frac{1}{m} \psi_{in}^\dagger S^{03} \psi_{in} , \quad (\text{E.20})$$

where we used $\eta^{00}\eta^{03} = S^{03}$.

The probability of finding the particle in the region of potential can be written in terms of the reflected and transmitted wavefunction by following the same approach used in references [74, 61, 64]: we consider the E-derivative of (E.13) multiplied from the left by $\psi^\dagger$ and subtract from it the Hermitian conjugate of (E.13) multiplied from the right by $\frac{\partial\psi}{\partial E}$, obtaining $\psi^\dagger\psi = i\frac{\partial}{\partial z}(\psi^\dagger S^{30}\frac{\partial\psi}{\partial E})$, which can be integrated in the region of potential, giving

$$\int_0^a \psi^\dagger\psi dz = i \left(\psi^\dagger S^{30} \frac{\partial\psi}{\partial E} \right)_{z=a} - i \left(\psi^\dagger S^{30} \frac{\partial\psi}{\partial E} \right)_{z=0}. \quad (\text{E.21})$$

Then, dividing the above equation by $m j_{in}$ and using the requirement of continuity of the wavefunction, we obtain the following relation

$$\tau_d = \bar{\tau}_p + \tau_{si}, \quad (\text{E.22})$$

where the self-interference delay τ_{si} is given by

$$\begin{aligned} \tau_{si} = & -\frac{i}{u(k)^\dagger S^{30} u(k)} \left\{ u(k)^\dagger S^{30} \frac{\partial u(k)}{\partial E} [|T|^2 - 1] + \right. \\ & -u(-k)^\dagger S^{30} \frac{\partial u(-k)}{\partial E} |R|^2 - u(k)^\dagger S^{30} \frac{\partial u(-k)}{\partial E} R \\ & \left. -u(-k)^\dagger S^{30} \frac{\partial u(k)}{\partial E} R^* \right\}. \end{aligned} \quad (\text{E.23})$$

In the above result we have used (E.14) and (E.15) and definitions (E.17)-(E.19) for the dwell and phase times.

The relation (E.22), with the self-interference delay given in (E.23), holds for both spin 0 and spin 1 sectors of DKP theory and, therefore, provides the generalization of relation (E.1) to relativistic scalar and vector bosons. Now, it is easy to obtain the explicit form of the self-interference delay for the scalar and vector sectors. We must merely to express the matrix S^{30} and the vector column $u(k)$ in a specific 5×5 and 10×10 representation of DKP algebra, respectively (for the explicit form of the representation used here see [67] and [76]). Then, after some tedious but straightforward manipulations, we obtain the following result, which holds for *both* scalar and vector sectors⁸

$$\tau_{si} = \hbar \frac{m^2 c^2}{E(\hbar k)^2} \text{Im}(R), \quad (\text{E.24})$$

where we have restored the factors of $\hbar$ and c . Equations (E.22) and (E.24) are the desired relativistic generalization of (E.1) for the case of scalar and

⁸Notwithstanding the specific representations used for the scalar and vector sectors, this result holds for any other unitarily equivalent representation of DKP algebra.

vector bosons. It is straightforward to see that (E.24) reduces to the corresponding term in (E.1) in the nonrelativistic limit $E \rightarrow mc^2$.

The relevance of the above relation between tunneling times is that it relates time scales describing different aspects of the scattering process, namely that the dwell time is a local concept, while the phase times that appear in (E.1) and (E.22) are extrapolated from asymptotic phase times [59]. In addition, such a relation provides a different (and easier) way to calculate the dwell time [61, 64]. Besides, and more important, the inexistence of a self-interference delay has been argued as a criterion for a sensible definition of tunneling times in the literature (see [59] and references there cited). The flaw in the reasoning leading to this criterion was noticed in [60], but it was Winful [61] who first gave a clear demonstration that (E.22) follows from the Schrödinger equation. Later the result was generalized for Dirac's fermions [64]. Therefore, our result adds a contribution to the above mentioned works in corroborating that (E.22) is a general requirement of quantum mechanics, both nonrelativistic and relativistic, be it for fermions or bosons.

E.4 Conclusion

We have obtained the relativistic generalization of the relation (E.1) between dwell and phase (or group) times for the case of scalar and vector bosons. As observed above, when considered together with references [61, 64] this result corroborates the view that such a relation must be a general requirement of quantum mechanics.

It is important to notice that such a result is not to be expected within the more usual approaches for spin 0 and spin 1 particles, namely from KG and Proca theories. In fact, concepts which depend on the existence of a probabilistic interpretation associated with the wavefunction, such as dwell time, are meaningless in the context of those theories. In this work the use of DKP theory was essential in obtaining eqs. (E.22)-(E.24), since, as we have demonstrated, in this context all the concepts involved are well defined. This result can also be viewed as another illustration of the fact that DKP theory provides a sound one-particle relativistic quantum mechanics of bosons (see also [70, 69]), in contradistinction to the usual approaches based on KG and Proca equations. Studies concerning the generalization of (E.1) to the cases of massless scalar and vector particles (which include the photon) within DKP approach will appear elsewhere.

Acknowledgments

The authors thank the financial support from the Brazilian agencies CAPES (CAB), FAPESP (BMP), Fundação Araucária and CNPq (JTL and BMP). JTL also thanks the kind hospitality of the Observatory of Complex Systems of the University of Palermo.

Referências Bibliográficas

- [1] GODSTEIN, H.; POOLE, C.; SAFKO, J. **Classical Mechanics**, Third Edition, Addison Wesley, San Francisco (2002).
- [2] RAZAVY, M. **Quantum Theory of Tunneling**, World Scientific, New Jersey (2003).
- [3] OPPENHEIMER, R.; FOWLER, R. H. *Proc. Natl. Acad. Sci.* 14, 363 (1928).
- [4] NORDHEIM, L. *Proc. R. Soc. A* 119, 173 (1928).
- [5] CONDON, E. U. **Tunneling - how it all started**, *Am. J. Phys.* 46, No. 4 (1978).
- [6] KITTEL, C. **Introdução à Física do Estado Sólido**, Oitava Edição, LTC Editora, Rio de Janeiro (2006).
- [7] CONDON, E. U.; MORSE P. M. **Quantum Mechanics of Collision Processes I. Scattering of particles in a definite force field**, *Rev. Mod. Phys.* 3 43-88 (1931).
- [8] MacCOLL, L. A. **Note on the Transmission and Reflection of Wave Packets by Potential Barriers**, *Phys. Rev.* 40 621-625 (1932).
- [9] MUGA, J. G.; MAYATO, R. S.; EGUSQUIZA, I. L. **Time in Quantum Mechanics**, Springer-Verlag Heidelberg Berlin (2002).
- [10] PAULI, W. **General Principles of Quantum Mechanics**, Springer, Heidelberg (1980).
- [11] HAUGE, E. H.; STØVNENG, J. A. **Tunneling times: a critical review**, *Rev. Mod. Phys.* 81, No. 4 917-936 (1989).

- [12] OLKHOVSKY, V. S.; RECAMI, E. **RECENT DEVELOPMENTS IN THE TIME ANALYSIS OF TUNNELING PROCESSES**, *Physics Reports (Review Section of Pyhs. Rep.)* 214, No. 6 339-356 (1992).
- [13] OLKHOVSKY, V. S.; RECAMI, E. **TUNNELING TIMES AND “SUPERLUMINAL” TUNNELING: A BRIEF REVIEW**, arXiv:cond-mat/9802162 15 Feb 1998.
- [14] OLKHOVSKY, V. S.; RECAMI, E; JACKIEL, J. **Unified Time Analysis of Photon and (Nonrelativistic) Particle Tunneling, and the Superluminal group-velocity problem**, arXiv:quant-ph/0102007v1 1 Feb 2001.
- [15] WINFUL, H. G. **Tunneling time, the Hartman effect, and superluminality: A proposed resolution of an old paradox**, *Phys. Rep.* 436 1-69 (2006).
- [16] HARTMAN, T. E. **Tunneling of a Wave Packet**, *Journal of Applied Physics*, 33, Number 12, 3427-3433 (1962).
- [17] FLETCHER, J. R. **Time delay in tunneling through a potential barrier**, *J. Phys. C: Solid State Phys.* 18 L55-L59 (1985).
- [18] JACKSON, J. D. **Classical Electrodynamics**. 3rd edn., Wiley, New York, 1999.
- [19] KOBE, D. H. **Energy and *tempus* as canonical variables: application to a particle with a force quadratic in velocity**, *Eur. J. Phys.* 262-267 (1993).
- [20] KOBE, D. H. **Canonical transformation to energy and *tempus* in classical mechanics**, *Am. J. Phys.* 61 1031 (1993).
- [21] SAKURAI, J. J. **Modern Quantum Mechanics**, Revised Edition, Addison-Wesley Publishing Company, 1994.
- [22] OMNÈS, R. **The Interpretation of Quantum Mechanics**, Princeton Series in Physics, 1994.
- [23] DIRAC, P. A. M., **The Principles of Quantum Mechanics**, 4th edn. Oxford University Press (1958).
- [24] MESSIAH, A. **Quantum Mechanics**, Two volumer bounded as one. Dover Publications, New York (1999).

- [25] GIANNITRAPANI, R. **Positive-Operator-Valued-Time in Quantum Mechanics**, *International Journal of Theoretical Physics*, 36, No. 7, 1575-1584 (1997).
- [26] KOBE, D. H.; AGUILERA-NAVARRO, V. C. **The *tempus* operator in quantum mechanics**, *Topics in Theoretical Physics II, Festschrift for Abraham Hirz Zimerman*, IFT/UNESP São Paulo (1998).
- [27] AHARONOV, Y.; BOHM, D. **Time in Quantum Theory and the Uncertainty Relation for Time and Energy**, *Phys. Rev.* 122, 1649 (1961).
- [28] GOTO, T.; YAMAGUCHI, K.; SUDO, N. **On the Time Operator in Quantum Mechanics - Three Typical Examples**, *Progress of Theoretical Physics*, 66, No. 5 1525-1538 (1981).
- [29] GOTO, T.; NAKA, S.; YAMAGUCHI, K. **On the Time Operator in Quantum Mechanics. II - General Prescription in One Dimensional Case**, *Progress of Theoretical Physics*, 66, No. 6 1915-1925 (1981).
- [30] PESSOA Jr. O. **Conceitos de Física Quântica**, Segunda Edição, Editora Livraria da Física, São Paulo (2005).
- [31] BRILLOUIN, L. **Wave Propagation and Group Velocity**. Academic Press, New York, 1960.
- [32] SMITH, F. T. **Lifetime Matrix in Collision Theory**, *Phys. Rev.* 118, Number 1, 349-356 (1960).
- [33] de CARVALHO, C. A. A.; NUSSENZVEIG, H. M. **Time delay**, *Phys. Rep.* 364 83-174 (2002).
- [34] BÜTTIKER, M.; LANDAUER, R. **Traversal Time for Tunneling**, *Phys. Rev. Lett.* 49, 1739 (1982).
- [35] BÜTTIKER, M.; LANDAUER, R. **Traversal Time for Tunneling**, *Physica Scripta* 32, 429-434 (1985).
- [36] TIEN, P. K.; GORDON, J. P.; **Multiphoton Process Observed in the Interaction of Microwave Fields with the Tunneling between Superconductor Films**, *Phys. Rev.* 129, 647 (1963).
- [37] ARFKEN, G. B.; WEBER, H. J.; **Mathematical Methods for Physicists**, Fifth Edn. Academic Press, (2001).

- [38] WINFUL, H. B. **Delay Time and Hartman Effect in Quantum Tunneling**, *Phys. Rev. Lett.*, Vol 91, Number 26, 2003.
- [39] BAZ, A. I. *Sov. J. Nucl. Phys.* 4, 183 (1967); 5, 161 (1967).
- [40] RYBACHENCO, V. F. *Sov. J. Nucl. Phys.* 5, 635 (1967).
- [41] BÜTTIKER, M. *Phys. Rev. Lett.* 49, 1739 (1982).
- [42] LI, Zhi-Jian; LIANG, J. Q.; KOBE, D. H. **Larmor precession and barrier tunneling time of a neutral spinning particle**, arXiv:quant-ph/0109001 v1 1 Sep 2001.
- [43] STEVENS, K. W. H. **A one-dimensional barrier and time-dependent tunneling**, *J. Phys. C: Solid State* 16 3649-3661 (1983).
- [44] GOTTFRIED, K. **Quantum Mechanics** Volume 1: Fundamentals, W. A. Benjamin, Inc. New York (1966).
- [45] BOYCE, W. E.; DiPRIMA, R. C. **Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno** Sexta Edição Revisita, LTC Editora (1999).
- [46] SAKURAI, J. J. **Advanced Quantum Mechanics**, Addison-Wesley Publishing Company, Massachutts (1967).
- [47] SCHWEBER, S. S. **An Introduction to Relativistic Quantum Field Theory**, Row, Peterson and Company, Illinois (1961).
- [48] MANDL, F. **Introduction to Quantum Field Theory**, Interscience Publishers Inc., New York (1959).
- [49] DOMBEY, N.; COLEGAROS, A. **Seventy years of the Klein paradox**, *Phys. Rep.* 315, No 1 41-58 (1999).
- [50] LUNARDI, J. T. **Remarks on Bessel Beams, Signal and Superluminality**, *Phys. Lett. A* 291 66-72 (2001).
- [51] BORGHARDT, A. A.; BELOGOVISKII, M. A.; KARPENKO, D. Ya. **Superluminal solutions to the Klein-Gordon Equation and a causality problem**, *Phys. Lett. A* 318 342-344 (2003).
- [52] BJORKEN J. D.; DRELL, S. D., **Relativistic Quantum Mechanics**, McGraw-Hill Book Company, New York 1964.

- [53] WINFUL, H. G.; NGOM, M.; LITCHINITSER, N. M. **Relation between quantum tunneling times for relativistic particles** *Phys. Rev. A*, 052112 (2004).
- [54] TOLEDO PIZA, A. F. R. **Mecânica Quântica**, Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo (2003).
- [55] BONIN, C. A.; LUNARDI, J. T.; MANZONI, L. A.; PIMENTEL, B. M. **Relation between quantum tunnelling times for bosons** arXiv:quant-ph/0608002 v2 23 Aug 2006.
- [56] STRUYVE, W.; De BAERE, W.; De NEVE, J.; De WEIRDT, J. **On the uniqueness of paths for spin-0 and spin-1 quantum mechanics**, *Phys. Lett. A* 322 84-95 (2004).
- [57] ÁVILA, Geraldo S. S. **Funções de uma Variável Complexa**. Livros Técnicos e Científicos editora. Rio de Janeiro. 1974.
- [58] W. Pauli, *General Principles of Quantum Mechanics* (Springer, Heidelberg, 1980).
- [59] E. H. Hauge, and J. A. Stovneng, *Rev. Mod. Phys.* **61**, 917 (1989).
- [60] R. Landauer, and Th. Martin, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 217 (1994).
- [61] H. G. Winful, *Phys. Rev. Lett* **91**, 260401 (2003).
- [62] E. H. Hauge, J. P. Falck and T. A. Fjeldly, *Phys. Rev. B* **36**, 4203 (1987).
- [63] H. G. Winful, *Phys. Rev. E* **68**, 016615 (2003).
- [64] H. G. Winful, M. Ngom, and N. M. Litchinitser, *Phys. Rev. A* **70**, 052112 (2004).
- [65] P. Krekora, Q. Su and R. Grobe, *Phys. Rev. A* **63**, 032107 (2001).
V. Petrillo and D. Janner, *Phys. Rev. A* **67**, 012110 (2003).
X. Chen and C.-F. Li, *Phys. Rev. A* **68**, 052105 (2003).
- [66] G. Petiau, *Acad. R. Belg. Cl. Sci. Mém. Collect 8* **16**, No. 2 (1936).
N. Kemmer, *Proc. Roy. Soc. A* **166** (1938) 127.
R. J. Duffin, *Phys. Rev.* **54** (1938) 1114.

- [67] J. T. Lunardi, B. M. Pimentel, R. G. Teixeira and J. S. Valverde, *Phys. Lett. A* **268**, 165 (2000).
V. Ya. Fainberg and B. M. Pimentel, *Theor. Math. Phys.* **124** 1234 (2000).
V. Ya. Fainberg and B. M. Pimentel, *Braz. J. Phys.* **30** 275 (2000).
- [68] V. Gribov, *Eur. Phys. J. C* **10**, 71 (1999).
V. Ya. Fainberg and B. M. Pimentel, *Phys. Lett. A* **271** 16 (2000).
J. T. Lunardi, B. M. Pimentel, J. S. Valverde and L. A. Manzoni, *Int. J. Mod. Phys. A* **17**, 205 (2002).
Y. Sucu and N. Unal, *Eur. Phys. J. C* **44**, 287 (2005).
R. Casana, J. T. Lunardi, B. M. Pimentel and R. G. Teixeira, *Class. Quant. Grav.* **22**, 3083 (2005).
- [69] A. Boumali and L. Chetouani, *Phys. Lett. A* **346**, 261 (2005).
D. A. Owen and R. C. Barrett, *Phys. Lett. B* **574**, 197 (2003).
Y. Nadjadi and R. C. Barrett, *J. Phys. A: Math. Gen.* **27**, 4301 (1994).
- [70] P. Ghose, A. S. Majumdar, S. Guha and J. Sau, *Phys. Lett. A* **290**, 205 (2001).
- [71] H. Umezawa, *Quantum Field Theory* (North-Holland, Amsterdam, 1956).
- [72] J. D. Bjorken and S. D. Drell, *Relativistic Quantum Theory* (McGraw-Hill, 1964)
- [73] M. Nowakowski, *Phys. Lett. A* **244**, 329 (1998).
- [74] F. T. Smith, *Phys. Rev.* **118**, 349 (1960).
- [75] M. Büttiker, *Phys. Rev. B* **27**, 6178 (1983).
- [76] R. Casana, V. Ya. Fainberg, B. M. Pimentel, and J. S. Valverde, e-print hep-th/0309007. Published in *Phys. Lett. A* **316**, 33 (2003).