

UNESP
Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá

Guaratinguetá
2011

MARCELO GONÇALVES GARCIA

FORMALISMO DE FESHBACH-VILLARS: INCORREÇÕES E
CORREÇÕES

Dissertação apresentada à Faculdade de
Engenharia do Campus de Guaratinguetá,
Universidade Estadual Paulista, para a
obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Antonio Soares de Castro

Guaratinguetá
2011

Garcia, Marcelo Gonçalves
G216f Formalismo de Feshbach-Villars: incorreções e correções / Marcelo
Gonçalves Garcia – Guaratinguetá : [s.n], 2011.
73 f. : il.
Bibliografia: f. 59

Dissertação (Mestrado) – Universidade Estadual Paulista, Faculdade de
Engenharia de Guaratinguetá, 2011.
Orientador: Prof. Dr. Antonio Soares de Castro

1. Klein-Gordon, equações de. I. Título

CDU 530.145

MARCELO GONÇALVES GARCIA

ESTA DISSERTAÇÃO FOI JULGADA ADEQUADA PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE
“MESTRE EM FÍSICA”

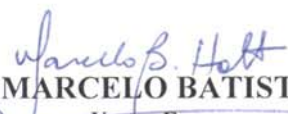
PROGRAMA: FÍSICA

APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO


Prof. Dr. Sílvia Maria Juliatti Winter
Coordenadora

BANCA EXAMINADORA:


Prof. Dr. ANTONIO SOARES DE CASTRO
Orientador / Unesp-Feg


Prof. Dr. MARCELO BATISTA HOTT
Unesp-Feg


Prof. Dr. ORLANDO OLAVO ARAGÃO ALEIXO E NEVES DE
OLIVEIRA
Universidade de Coimbra-Portugal

Fevereiro de 2011

DADOS CURRICULARES

MARCELO GONÇALVES GARCIA

NASCIMENTO	08.12.1982 – SÃO JOSÉ DOS CAMPOS / SP
FILIAÇÃO	David Tomaz Garcia Sueli Gonçalves Garcia
2004/2008	Curso de Graduação em Bacharelado em Física Universidade Estadual Paulista - Campus de Guaratinguetá

Publicações:

Título: Scattering and bound states of spinless particles in a mixed vector-scalar smooth step potential

Autores: Marcelo Gonçalves Garcia e Antonio Soares de Castro

Revista: Annals of Physics, **324**, 2372 (2009)

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar agradeço a Deus, vida única por trás de todas as vidas, fonte de toda existência e do amor inesgotável. Agradeço aos meus pais e a toda minha família, meus amigos por inúmeras ajudas no decorrer do curso, aos professores do departamento de Física e Matemática que contribuíram para a minha formação entre eles Alvaro de Souza Dutra, Denis Dalmazi, Marcelo Batista Hott e especialmente a Antonio Soares de Castro pela oportunidade que me deu e pela paciência, amizade e contribuição ímpar em minha formação profissional. Em especial à Barbara por seu amor, incentivo e apoio incansável durante a confecção deste trabalho.

Este trabalho contou com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES).

"Veja o falso como falso,
o verdadeiro como verdadeiro.
Olhe para o seu coração.
Siga a sua natureza."

(Buda)

Garcia, M. G. **Formalismo de Feshbach-Villars: Incorreções e correções.** 2011. Dissertação (Mestrado em Física) – Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista, Guaratinguetá, 2011.

RESUMO

Apresenta-se um desenvolvimento detalhado do formalismo de Feshbach-Villars, que consiste em uma formulação hamiltoniana para a teoria de Klein-Gordon. Mostra-se que existem alguns equívocos na literatura relacionada com esse formalismo, como a normalização, a definição do valor esperado de um operador e o efeito da conjugação de carga sobre a densidade de corrente de carga. Em seguida mostra-se suas correções. Além disso, introduz-se o acoplamento escalar que até então não é conhecido na literatura desse formalismo.

PALAVRAS-CHAVE: Formalismo Feshbach-Villars, Klein-Gordon, Valor esperado, Conjugação de carga.

Garcia, M. G. **Feshbach-Villars formalism: incorrections and corrections.** 2011. Dissertação (Mestrado em Física) – Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista, Guaratinguetá, 2011.

ABSTRACT

It is presented a detailed development of the Feshbach-Villars formalism, which consists in a Hamiltonian formulation for the Klein-Gordon theory. A few misconceptions found in the literature related to that formalism, such as normalization, expectation value and the effect of charge-conjugation transformation on the charge current, is pointed out. Then, the proper treatment for those quantities is presented. In addition, a scalar coupling never accounted before in the Feshbach-Villars formalism is investigated.

KEYWORDS: Feshbach-Villars formalism, Klein-Gordon, Expectation value, Charge conjugation

Sumário

I	Introdução	12
1	Notação relativística	14
2	Equação de Klein-Gordon	18
2.1	Carga do campo de Klein-Gordon	21
2.2	Zitterbewegung	24
2.3	Interação com um campo externo	25
2.4	Conjugação de carga	26
3	Equação de Klein-Gordon no formalismo de Schrödinger	28
3.1	Soluções de partícula livre e produto interno	31
3.2	Valor esperado	34
3.3	Zitterbewegung	36
3.4	Limite não-relativístico	36
3.5	Interação com um campo externo	37
3.6	Conjugação de carga	40
4	A representação de Feshbach-Villars	43
4.1	Unitariedade, valor esperado e lei de transformação de operadores	45
4.2	A hamiltoniana na representação Feshbach-Villars	46
4.3	Densidade de carga-corrente	47
4.4	Velocidade de grupo e a densidade de corrente de carga	48
4.5	Interação com um campo externo	50
5	Interpretação dos operadores na MQR	53
6	Apêndice	61
6.1	Transformação de Lorentz	61
6.2	Invariância de gauge	62
6.3	Ortogonalidade na representação de Klein-Gordon	63
6.4	Ortogonalidade na representação de Schrödinger	63
6.5	Cálculo do operador posição na representação Φ	64
6.6	Densidade de carga-corrente	65
6.7	Tensor de energia-momento	66
6.8	Uma equação de onda não-relativística com spin	67
6.8.1	Abaixamento de ordem da equação de Schrödinger	67
6.8.2	Partículas em um campo eletromagnético e o momento magnético	71
6.9	Completeza das matrizes de Pauli	72
6.10	Uma regra de cálculo para as matrizes de Pauli	73

Faz algum tempo que foi desenvolvida uma formulação hamiltoniana para a equação de Klein-Gordon [1], [2]. Embora esse formalismo esteja cristalizado em muitos trabalhos e livros-texto como em [1]-[20] parece que ele não é bem conhecido e certamente não tem sido largamente utilizado. Entretanto, deve-se mencionar sua utilização na descrição de átomos [21] e do espalhamento elástico pión-núcleo [4]. Feshbach e Villars [2] mostraram que é possível encontrar uma representação para a equação de Klein-Gordon na qual propriedades paradoxais de alguns operadores desaparecem. Mais precisamente, eles mostraram que nessa representação transformada é particularmente claro como associar operadores com as variáveis dinâmicas clássicas, obtendo assim a forma esperada para o limite não-relativístico desses operadores.

A equação de Klein-Gordon descreve o comportamento de bósons de spin 0 por meio de uma equação de segunda ordem. A presença da segunda derivada temporal faz com que o componente temporal da corrente conservada não seja positivo-definido, e assim sendo, ele não pode ser interpretado como uma densidade de probabilidade. Contudo, não há dificuldade com a interpretação da densidade e da corrente da equação de Klein-Gordon se essas grandezas forem interpretadas como densidade de carga e densidade de corrente de carga, ao invés de densidade e corrente de probabilidade [22]. O formalismo de Feshbach-Villars tenta resgatar uma corrente de probabilidade para a teoria dos bósons sem spin. Na equação de Feshbach-Villars, os dois graus de liberdade associados com o campo de Klein-Gordon são descritos em termos de um vetor coluna com dois componentes e a equação de movimento é de primeira ordem. Entretanto, a equação de movimento envolve uma hamiltoniana não-hermitiana. Este fato é responsável por uma miríade de comportamentos interessantes que distinguem o formalismo de primeira ordem de Feshbach-Villars dos formalismos de Schrödinger e Dirac, tais como a normalização da função de onda, ortogonalidade de autofunções e o cálculo de valores esperados. A realidade dos valores esperados de observáveis impõe uma generalização do conceito de hermiticidade dos operadores do espaço de Hilbert. Sendo assim, descortina-se a conveniência de uma investigação pormenorizada do formalismo matemático subjacente da teoria de Feshbach-Villars. Contudo, uma série de equívocos no que diz respeito a valores esperados e conjugação de carga vêm sendo cometidos em muitos trabalhos e livros-texto como por exemplo em [2]-[4],[6],[7], [10]-[12],[16], [19] e [20]. Neste trabalho estabelecemos como se deve calcular os valores esperados corretamente e esclarecemos o problema da conjugação de carga no formalismo de Feshbach-Villars.

Capítulo 1

Notação relativística

Na teoria da relatividade, as magnitudes físicas relevantes devem ser representáveis em um espaço-tempo unificado, que permita relacionar adequadamente as medidas feitas por diferentes observadores. Isso implica que grandezas vetoriais das teorias não-relativísticas devem se tornar quadrivetores nas teorias relativísticas, cuja parte espacial coincide com as componentes vetoriais das grandezas correspondentes das teorias não-relativísticas. O espaço-tempo quadridimensional no qual o intervalo entre dois eventos infinitesimalmente próximos, com coordenadas (x, y, z, t) e $(x + dx, y + dy, z + dz, t + dt)$, é definido por

$$ds^2 = c^2 dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2 = c^2 dt^2 - d\mathbf{r}^2, \quad (1.1)$$

é conhecido como *espaço de Minkowski*. Aqui, c é a velocidade da luz no vácuo. Esse intervalo entre dois eventos é conhecido como um *escalar de Lorentz*, visto que é invariante sob transformações de Lorentz¹. Pela definição de intervalo acima, os eventos em que $ds^2 > 0$ são chamados do tipo-tempo, aqueles em que $ds^2 < 0$ são chamados do tipo-espaço e aqueles em que $ds^2 = 0$ são ditos do tipo-luz. Definimos uma matriz G , com elementos $g_{\mu\nu}$, dada por

$$G = (g_{\mu\nu}) = \begin{pmatrix} g_{00} & g_{01} & g_{02} & g_{03} \\ g_{10} & g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ g_{20} & g_{21} & g_{22} & g_{23} \\ g_{30} & g_{31} & g_{32} & g_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.2)$$

A matriz G define uma *métrica* no espaço de Minkowski e seus elementos $g_{\mu\nu}$ são chamados de componentes do *tensor métrico*. Os componentes do tensor métrico estão escritos em uma forma chamada *covariante* $g_{\mu\nu}$. É conveniente introduzir os elementos $g^{\mu\nu}$ (forma *contravariante*) da inversa da matriz G . Para encontrá-los, fazemos uso da condição

$$GG^{-1} = \hat{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (1.3)$$

e assim

$$G^{-1} = (g^{\mu\nu}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.4)$$

¹Vide Apêndice 6.1

Para a métrica que estamos usando, os componentes do tensor métrico em suas formas covariante e contravariante são iguais

$$g^{\mu\nu} = g_{\mu\nu}. \quad (1.5)$$

Os componentes do vetor posição, na forma contravariante são dados por

$$x^\mu = (x^0, x^1, x^2, x^3) = (ct, x, y, z) = (ct, \mathbf{r}), \quad \mu = 0, 1, 2, 3. \quad (1.6)$$

Aqui, x^0 representa o componente temporal do quadrivetor e x^i com $i = 1, 2, 3$ representa os componentes espaciais. Com a ajuda de $g_{\mu\nu}$ definimos a operação abaixamento de índice

$$x_\mu = g_{\mu\nu}x^\nu = (x_0, x_1, x_2, x_3) = (ct, -x, -y, -z) = (ct, -\mathbf{r}) \quad (1.7)$$

encontrando assim os componentes do quadrivetor posição em sua forma covariante. Nessa última equação utilizamos a convenção de Einstein da soma sobre índices repetidos: toda vez que um índice aparecer repetido, tal como ν nesta última equação, deve-se efetuar uma soma de 0 a 3 sobre tal índice. Convencionaremos, também, que índices gregos tais como $\alpha, \beta, \mu, \nu, \dots$ assumem os valores 0, 1, 2, 3 ao passo que índices latinos tais como i, j, k, l, \dots tomam os valores 1, 2, 3. Note que o abaixamento de índice apenas troca o sinal dos componentes espaciais do quadrivetor. Analogamente, podemos definir uma operação levantamento de índice

$$x^\mu = g^{\mu\nu}x_\nu. \quad (1.8)$$

Isso significa que podemos facilmente transformar componentes covariantes em contravariantes e vice-versa. O produto escalar de dois quadrivetores arbitrários

$$V = V^\mu \hat{e}_\mu \quad \text{e} \quad W = W^\nu \hat{e}_\nu, \quad (1.9)$$

pode ser escrito como

$$\begin{aligned} V \cdot W &= (V^\mu \hat{e}_\mu) \cdot (W^\nu \hat{e}_\nu) = V^\mu W^\nu \hat{e}_\mu \cdot \hat{e}_\nu \\ &= V^\mu W^\nu g_{\mu\nu} = V^\mu W_\mu = V_\mu W^\mu \\ &= V^0 W^0 - \mathbf{V} \cdot \mathbf{W}, \end{aligned} \quad (1.10)$$

onde usamos

$$\hat{e}_\mu \cdot \hat{e}_\nu = g_{\mu\nu}. \quad (1.11)$$

Em particular

$$V^2 \equiv V \cdot V = (V^0)^2 - (\mathbf{V})^2. \quad (1.12)$$

Dessa forma, podemos escrever (1.1) como um produto escalar

$$ds^2 = dr \cdot dr = dx_\nu dx^\nu = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu = c^2 dt^2 - d\mathbf{r}^2. \quad (1.13)$$

O quadrivetor momento, ou simplesmente quadrimomento, é definido como

$$p = \sum_{\mu=0}^3 p^\mu \hat{e}_\mu,$$

onde os componentes do quadrimomento em sua forma contravariante são dados por

$$p^\mu = (E/c, p_x, p_y, p_z) = (E/c, \mathbf{p}), \quad (1.14)$$

onde $|E|$ é a energia relativística da partícula. Desta forma, energia e momento linear passam a constituir um quadrivetor, fazendo com que as leis da conservação da energia e do momento linear deixem de ser independentes, tornando-se aspectos de uma lei de conservação covariante do quadrimomento. Para os componentes do quadrimomento na forma covariante temos

$$p_\mu = (E/c, -p_x, -p_y, -p_z) = (E/c, -\mathbf{p}). \quad (1.15)$$

Note que o produto escalar de p com ele mesmo nos dá

$$p^2 = p^\mu p_\mu = \frac{E^2}{c^2} - \mathbf{p}^2. \quad (1.16)$$

Da relação de dispersão $E^2 = c^2 \mathbf{p}^2 + m^2 c^4$, onde m é a massa de repouso da partícula, conclui-se que

$$p^2 = m^2 c^2. \quad (1.17)$$

É muito útil apresentar os componentes do operador nabla quadridimensional em sua forma covariante

$$\partial_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) = \left(\frac{1}{c} \partial_t, \vec{\nabla} \right) \quad (1.18)$$

e em sua forma contravariante como

$$\partial^\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x_\mu} = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\frac{\partial}{\partial x}, -\frac{\partial}{\partial y}, -\frac{\partial}{\partial z} \right) = \left(\frac{1}{c} \partial_t, -\vec{\nabla} \right). \quad (1.19)$$

Assim, com a ajuda de (1.18) e (1.19) definimos os componentes do operador quadrimomento como

$$\hat{p}^\mu = i\hbar \partial^\mu = \left(\frac{\hat{E}}{c}, \hat{\mathbf{p}} \right), \quad \hat{p}_\mu = i\hbar \partial_\mu = \left(\frac{\hat{E}}{c}, -\hat{\mathbf{p}} \right) \quad (1.20)$$

onde \hbar é a constante de Planck reduzida, isto é $\hbar = h/(2\pi)$, de tal forma que

$$\hat{E} = i\hbar \partial_t \quad \text{e} \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \vec{\nabla}. \quad (1.21)$$

É interessante notar que o produto escalar do operador momento com ele mesmo nos dá

$$\hat{p}^\mu \hat{p}_\mu = -\hbar^2 \partial^\mu \partial_\mu = -\hbar^2 \square \quad (1.22)$$

onde

$$\square \equiv \partial^\mu \partial_\mu = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \quad (1.23)$$

é o conhecido operador d'Alembertiano.

Os campos elétrico \mathbf{E} e magnético \mathbf{B} satisfazem as relações

$$\mathbf{E} = -\vec{\nabla} A_0 - \frac{1}{c} \partial_t \mathbf{A}, \quad \mathbf{B} = \vec{\nabla} \times \mathbf{A}, \quad (1.24)$$

onde A_0 é o potencial escalar elétrico e \mathbf{A} é o potencial vetor magnético. Na física quântica relativística as quantidades A_0 e \mathbf{A} são respectivamente os componentes temporal e espacial de um quadrivetor, denominado quadripotencial eletromagnético com componentes

$$A^\mu = (A_0, A_x, A_y, A_z) = (A_0, \mathbf{A}) = g^{\mu\nu} A_\nu. \quad (1.25)$$

Aqui, A^μ são os componentes contravariantes e $A_\mu = (A_0, -\mathbf{A})$ os componentes covariantes. O acoplamento de uma partícula com carga elétrica e com o campo eletromagnético pode ser efetuado com a substituição dos operadores energia e momento expressos em (1.21) por

$$i\hbar\partial_t \rightarrow i\hbar\partial_t - eA_0, \quad \hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}. \quad (1.26)$$

Esta prescrição é conhecida como acoplamento mínimo, ou substituição mínima, e pode ser escrita da seguinte forma contravariante

$$\hat{p}^\mu \rightarrow \hat{p}^\mu - \frac{e}{c}A^\mu. \quad (1.27)$$

Uma partícula pode estar sujeita a outros tipos de interações que não a eletromagnética, mas esta última é o protótipo para todos os outros tipos de interações vetoriais. Muitas vezes no decorrer do texto usaremos a seguinte definição

$$V^\mu = eA^\mu = (eA_0, e\mathbf{A}) \equiv (V_t, \mathbf{V}_e). \quad (1.28)$$

Quando uma partícula está sujeita a um campo escalar usamos a prescrição

$$m \rightarrow M = m + V_s/c^2.$$

Capítulo 2

Equação de Klein-Gordon

Na mecânica quântica não-relativística, a equação de Schrödinger

$$i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r},t) \quad (2.1)$$

corresponde à relação de energia-momento não-relativística na forma de operadores,

$$\hat{E} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (2.2)$$

onde

$$\hat{E} = i\hbar\partial_t, \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}, \quad (2.3)$$

são os operadores energia e momento respectivamente. Tentamos encontrar uma equação que analogamente corresponda à relação de energia relativística. Para encontrar essa equação, podemos começar com a expressão (1.16)

$$p^\mu p_\mu = \frac{E^2}{c^2} - \mathbf{p}^2 = m^2 c^2, \quad (2.4)$$

que nos dá a relação de energia relativística para partículas livres. Substituindo p^μ por seu operador

$$\hat{p}^\mu = i\hbar\partial^\mu \quad (2.5)$$

em (2.4), podemos atuar esses operadores sobre uma função de onda, para obter assim

$$\hat{p}^\mu \hat{p}_\mu \psi = m^2 c^2 \psi, \quad (2.6)$$

ou ainda, usando (1.22)

$$\left[\square + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \psi = 0. \quad (2.7)$$

Essa equação é usualmente conhecida como equação de Klein-Gordon, mas foi sugerida em 1926 por Klein [23], Fock [24] e Gordon [25].

Agora, procuramos construir uma equação análoga à equação da continuidade para o formalismo de Schrödinger. Podemos fazer isso usando o mesmo procedimento feito naquele formalismo. Tomando o complexo conjugado de (2.6) encontramos

$$(\hat{p}_\mu \hat{p}^\mu - m^2 c^2) \psi^* = 0. \quad (2.8)$$

Multiplicamos a primeira equação por ψ^* e a segunda por ψ , além disso, subtraímos uma da outra e encontramos

$$\psi^* (\hat{p}_\mu \hat{p}^\mu - m^2 c^2) \psi - \psi (\hat{p}_\mu \hat{p}^\mu - m^2 c^2) \psi^* = 0. \quad (2.9)$$

Usando a forma explícita para o operador momento, podemos reescrever (2.9) como

$$\psi^* \partial_\mu \partial^\mu \psi - \psi \partial_\mu \partial^\mu \psi^* = 0, \quad (2.10)$$

levando em conta que

$$\partial_\mu (\psi^* \partial^\mu \psi) = (\partial_\mu \psi^*) (\partial^\mu \psi) + \psi^* \partial_\mu \partial^\mu \psi, \quad (2.11)$$

$$\partial_\mu (\psi \partial^\mu \psi^*) = (\partial_\mu \psi) (\partial^\mu \psi^*) + \psi \partial_\mu \partial^\mu \psi^*$$

temos de (2.10) que

$$\psi^* \partial_\mu \partial^\mu \psi - \psi \partial_\mu \partial^\mu \psi^* = \partial_\mu (\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*) = 0. \quad (2.12)$$

Multiplicando (2.12) por $i\hbar/(2m)$ e definindo o quadrivetor

$$j'^\mu \equiv \frac{i\hbar}{2m} \psi^* \overleftrightarrow{\partial}^\mu \psi, \quad (2.13)$$

obtemos que

$$\partial_\mu j'^\mu = 0. \quad (2.14)$$

Em (2.13) inserimos a constante $i\hbar/(2m)$, pois estamos tentando obter com j'^0 uma densidade de probabilidade e, além disso, que ela tenha o correto limite não-relativístico. Explicitamente, a equação (2.14) pode ser reescrita como

$$\partial_t \left[\frac{i\hbar}{2mc^2} (\psi^* \partial_t \psi - \psi \partial_t \psi^*) \right] + \vec{\nabla} \cdot \left[\frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) \right] = 0. \quad (2.15)$$

Se definirmos $j'^\mu = (c\rho', \mathbf{j}')$ com

$$\rho' \equiv \frac{i\hbar}{2mc^2} \psi^* \overleftrightarrow{\partial}_t \psi, \quad \mathbf{j}' \equiv \frac{\hbar}{2mi} \psi^* \overleftrightarrow{\nabla} \psi \quad (2.16)$$

teremos em (2.15) a equação

$$\partial_t \rho' + \vec{\nabla} \cdot \mathbf{j}' = 0, \quad (2.17)$$

que é a equação da continuidade. Uma integração sobre o espaço nos dá

$$\int_V \partial_t \rho' dV = \frac{d}{dt} \int_V \rho' dV = - \int_V \vec{\nabla} \cdot \mathbf{j}' dV = - \oint_S \mathbf{j}' \cdot \mathbf{n} dS, \quad (2.18)$$

se a região de integração V engloba todo o espaço tridimensional e a densidade de corrente tende a zero com suficiente rapidez no infinito, a integral de superfície é nula, e portanto

$$\frac{d}{dt} Q' = 0, \quad Q' = \int_V \rho' dV \quad (2.19)$$

e Q' é constante. Seria tentador interpretar ρ' em (2.16) como uma densidade de probabilidade. No entanto, existe um problema em tal interpretação, pois, como a equação

de Klein-Gordon é uma equação de segunda ordem na derivada temporal, para um dado tempo t , precisamos conhecer tanto ψ como $\partial_t \psi$, e estes podem assumir valores arbitrários o que implica que ρ' não é positivo-definido e dessa forma não pode ser uma densidade de probabilidade.

Além do mais, existem problemas quanto a interpretação do fator evolução temporal e da energia, como veremos a seguir. Essas são algumas das causas do porquê a equação de Klein-Gordon foi abandonada por tanto tempo. No entanto, em 1934 quando Pauli e Weisskopf [22] propuseram que não haveria dificuldade na interpretação de ρ' e j' se essas quantidades fossem interpretados como densidade de carga e densidade de corrente de carga, os estudos sobre essa equação surgiram novamente. Se multiplicarmos (2.13) pela carga e da partícula encontramos a *densidade de corrente de carga*

$$j^\mu \equiv \frac{ie\hbar}{2m} \psi^* \overleftrightarrow{\partial}^\mu \psi = \{c\rho, \mathbf{j}\}, \quad (2.20)$$

onde

$$\rho = \frac{ie\hbar}{2mc^2} \psi^* \overleftrightarrow{\partial}_t \psi \quad (2.21)$$

e

$$\mathbf{j} = \frac{e\hbar}{2mi} \psi^* \overleftrightarrow{\nabla} \psi. \quad (2.22)$$

A densidade de carga (2.21) pode ser positiva, negativa ou nula, e isso está relacionado com a existência de partículas e antipartículas.

Usamos o ansatz que soluções da equação de Klein-Gordon para partículas livres podem ser escritas na forma

$$\psi = A \exp\left(-\frac{i}{\hbar} p_\mu x^\mu\right) = A \exp\left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)\right]. \quad (2.23)$$

Substituindo esse ansatz em (2.6), obtemos

$$\hat{p}^\mu \hat{p}_\mu \psi = m^2 c^2 \psi \Rightarrow p^\mu p_\mu = m^2 c^2 \quad \text{ou} \quad E^2/c^2 - \mathbf{p}^2 = m^2 c^2$$

o que resulta em

$$E = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4} = \pm \varepsilon_p, \quad \psi_{(\pm)} = A_{(\pm)} \exp\left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} \mp \varepsilon_p t)\right], \quad (2.24)$$

onde $\varepsilon_p = |E|$ e $A_{(\pm)}$ são as constantes de normalização. Aqui chamamos de $\psi^{(+)}$ a função de onda com o fator evolução temporal $E = \varepsilon_p$ e $\psi^{(-)}$ a função de onda com o fator evolução temporal $E = -\varepsilon_p$. Assim, para um dado momento existem duas soluções possíveis. Veremos que as soluções com $E = -\varepsilon_p$, estão conectadas com as antipartículas, mas mostramos¹ que $E = -\varepsilon_p$ não é a energia da antipartícula. Deixamos claro que tanto a energia da partícula quanto da antipartícula são dadas por ε_p .

Substituindo (2.24) em (2.21) encontramos

$$\rho_{(\pm)} = \pm \frac{e\varepsilon_p}{mc^2} |\psi^{(\pm)}|^2. \quad (2.25)$$

Isto sugere a seguinte interpretação: $\psi^{(+)}$ especifica partículas com carga $+e$ e $\psi^{(-)}$ especifica partículas com a mesma massa, mas com carga $-e$. Aqui e pode ser tanto positivo

¹Vide apêndice 6.7

como negativo. Por vezes, apenas para não sobrecarregar o texto, chamamos $\psi^{(+)}$ de solução positiva e $\psi^{(-)}$ solução negativa, conscientes do abuso de linguagem. Definimos aqui, o produto interno de duas funções ψ_1 e ψ_2 desse espaço vetorial como

$$(\psi_1, \psi_2) = \frac{i\hbar}{2mc^2} \int \psi_1^* \overleftrightarrow{\partial}_t \psi_2 d^3r, \quad (2.26)$$

com base no modelo de (2.21). Chamamos atenção para fato que nem sempre temos $(\psi, \psi) \geq 0$ para esse espaço vetorial, como podemos concluir de (2.25), pois como veremos na próxima seção, com uma escolha conveniente para as amplitudes $A_{(p_n, \pm)}$ teremos

$$(\psi^{(\pm)}, \psi^{(\pm)}) = \pm 1. \quad (2.27)$$

2.1 Carga do campo de Klein-Gordon

Vimos em (2.19) que Q é constante. Visto que ρ é uma densidade de carga, a quantidade Q só pode ser a carga da partícula. Explicitamente, usando (2.21) temos

$$Q = \frac{ie\hbar}{2mc^2} \int \psi^* \overleftrightarrow{\partial}_t \psi d^3r = e(\psi, \psi). \quad (2.28)$$

Podemos decompor a função de onda em uma parte real e imaginária como

$$\psi = \psi_1 + i\psi_2 \quad (2.29)$$

onde ψ_1 e ψ_2 são reais. Se ψ satisfaz à equação de Klein-Gordon

$$\left[\square + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \psi = 0, \quad (2.30)$$

então segue-se imediatamente que ψ_1 e ψ_2 também satisfazem à equação de Klein-Gordon

$$\left[\square + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \psi_1 = 0, \quad \left[\square + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \psi_2 = 0. \quad (2.31)$$

O inverso também é verdadeiro: se duas funções ψ_1 e ψ_2 satisfazem separadamente a equação de Klein-Gordon com a mesma massa $m = m_1 = m_2$, então a função de onda ψ e também sua função complexo conjugado ψ^* dados por

$$\psi = \psi_1 + i\psi_2 \quad \text{e} \quad \psi^* = \psi_1 - i\psi_2 \quad (2.32)$$

satisfazem separadamente a equação de Klein-Gordon

$$\left[\square + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \psi = 0, \quad \left[\square + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \psi^* = 0. \quad (2.33)$$

Pela mudança $\psi \rightarrow \psi_c = \psi^*$ em (2.28)

$$Q_c = e(\psi_c, \psi_c) = -e(\psi, \psi) = -Q \quad (2.34)$$

obtemos uma carga de sinal contrário. Portanto, ψ e $\psi_c = \psi^*$ caracterizam partículas de cargas opostas. Vimos que em (2.25) $\psi^{(\pm)}$ representa uma partícula com carga $\pm e$, fator evolução temporal $E = \pm \varepsilon_p$ e momento \mathbf{p} , por outro lado $\psi_{(\pm)}^*$ representa uma partícula

com carga $\mp e$, fator evolução temporal $E = \mp \varepsilon_p$ e momento $-\mathbf{p}$. Vamos clarificar isto. Para a partícula representada por $\psi_{(+)}$ temos

$$\psi_{(+)} \rightarrow \text{carga} = e, \quad E = \varepsilon_p, \quad \text{momento} = \mathbf{p}$$

e $\psi_{(+)}^*$ representa a antipartícula de $\psi_{(+)}$ com o momento invertido

$$\psi_{(+)}^* \rightarrow \text{carga} = -e, \quad E = -\varepsilon_p, \quad \text{momento} = -\mathbf{p}.$$

Já para a antipartícula $\psi_{(-)}$ temos

$$\psi_{(-)} \rightarrow \text{carga} = -e, \quad E = -\varepsilon_p, \quad \text{momento} = \mathbf{p}$$

e $\psi_{(-)}^*$ representa a antipartícula da antipartícula $\psi_{(-)}$ com o momento invertido

$$\psi_{(-)}^* \rightarrow \text{carga} = +e, \quad E = +\varepsilon_p, \quad \text{momento} = -\mathbf{p}.$$

Veja que com a condição de normalização

$$(\psi^{(\pm)}, \psi^{(\pm)}) = \pm 1 \quad (2.35)$$

com o sinal $+$ para partículas e o sinal $-$ para antipartículas, temos

$$Q^{(\pm)} = e (\psi^{(\pm)}, \psi^{(\pm)}) = \pm e. \quad (2.36)$$

Uma partícula neutra deve ser representada por uma função de onda real, i.e. $\psi^* = \psi$, dessa forma teremos

$$Q = 0. \quad (2.37)$$

Uma função de onda escalar real não pode experimentar uma interação vetorial (interação eletromagnética por exemplo) porque a densidade de corrente j^μ (2.20) é nula. Portanto, funções complexas são necessárias para descrever partículas carregadas sem spin.

Esses estudos podem, por exemplo, ser aplicados ao tripleto piônico (π^+ , π^- , π^0): O π^0 sendo uma partícula neutra, é caracterizado por uma função de onda real, enquanto π^+ e π^- , sendo campos carregados, devem ser representados por funções de ondas complexas. Na seção 2.4, que discorre sobre conjugação de carga, trataremos mais sobre esse assunto.

A solução geral da equação de onda é sempre uma combinação linear de ambos os tipos de funções positivas e negativas. Podemos tornar isso mais claro discretizando a onda plana contínua (2.24) confinando as ondas em uma caixa cúbica (normalização na caixa) de comprimento L . Para isso usamos as condições de contorno usuais nas paredes da caixa e dessa forma temos

$$\psi_{(\mathbf{p}_n, \pm)} = A_{(\mathbf{p}_n, \pm)} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}_n \cdot \mathbf{r} \mp \varepsilon_{p_n} t) \right] \quad (2.38)$$

onde

$$\mathbf{p}_n = \frac{2\pi\hbar}{L} \mathbf{n}, \quad \mathbf{n} = \{n_x, n_y, n_z\}; \quad n_i \in \mathbb{N} \quad (2.39)$$

e

$$\varepsilon_{p_n} = \sqrt{\mathbf{p}_n^2 c^2 + m^2 c^4}. \quad (2.40)$$

Usando (2.25) e (2.28) os fatores de normalização $A_{(\mathbf{p}_n, \pm)}$ são determinados pela exigência de

$$\pm e = \int_{L^3} d^3r \rho_{(\pm)}(\mathbf{r}) = \pm \frac{e\varepsilon_{p_n}}{mc^2} |A_{(\mathbf{p}_n, \pm)}|^2 L^3. \quad (2.41)$$

Escolhendo as fases de tal maneira que as amplitudes sejam reais e positivas, encontramos

$$A_{(\mathbf{p}_n, \pm)} = \frac{1}{L^{3/2}} \sqrt{\frac{mc^2}{\varepsilon_{p_n}}}, \quad (2.42)$$

e assim

$$\psi_{(\mathbf{p}_n, \lambda)} = \frac{1}{L^{3/2}} \sqrt{\frac{mc^2}{\varepsilon_{p_n}}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}_n \cdot \mathbf{r} - \lambda \varepsilon_{p_n} t) \right], \quad \lambda = \pm 1. \quad (2.43)$$

De agora em diante nessa seção, apenas para simplificar a notação, \mathbf{p} e $\sum_{\mathbf{p}}$ significam \mathbf{p}_n e $\sum_{\mathbf{p}_n}$ respectivamente. Os estados $\psi_{(\mathbf{p}, \lambda)}$ formam um sistema ortonormalizado. Portanto a relação²

$$(\psi_{(\mathbf{p}, \lambda)}, \psi_{(\mathbf{p}', \lambda')}) = \lambda \delta_{\lambda \lambda'} \delta_{\mathbf{p} \mathbf{p}'} \quad (2.44)$$

é válida. A solução mais geral da equação de Klein-Gordon é a mistura

$$\psi = \sum_{\mathbf{p}, \lambda} a_{(\mathbf{p}, \lambda)} \psi_{(\mathbf{p}, \lambda)} = \sum_{\mathbf{p}} (a_{(\mathbf{p}, +1)} \psi_{(\mathbf{p}, +1)} + a_{(\mathbf{p}, -1)} \psi_{(\mathbf{p}, -1)}) \quad (2.45)$$

onde os coeficientes da expansão são dados por

$$a_{(\mathbf{p}, \lambda)} = \lambda (\psi_{(\mathbf{p}, \lambda)}, \psi). \quad (2.46)$$

Note que para essa mistura, temos

$$(\psi, \psi) = \sum_{\mathbf{p}} (|a_{(\mathbf{p}, +1)}|^2 - |a_{(\mathbf{p}, -1)}|^2), \quad (2.47)$$

se definirmos

$$N_{\pm} = \sum_{\mathbf{p}} |a_{(\mathbf{p}, \pm 1)}|^2, \quad (2.48)$$

encontramos que a carga é dada por

$$Q = e (\psi, \psi) = Ne, \quad (2.49)$$

onde

$$N = N_+ - N_- = \sum_{\mathbf{p}} (|a_{(\mathbf{p}, +1)}|^2 - |a_{(\mathbf{p}, -1)}|^2) = \begin{cases} \pm 1 \\ 0 \end{cases}. \quad (2.50)$$

Aqui $\sum_{\mathbf{p}} |a_{(\mathbf{p}, +1)}|^2$ nos dá a quantidade relativa de carga $+e$ que é distribuída espacialmente de acordo com o autoestado $\psi_{(\mathbf{p}, +1)}$, enquanto $\sum_{\mathbf{p}} |a_{(\mathbf{p}, -1)}|^2$ nos dá a quantidade relativa de carga $-e$ distribuída espacialmente de acordo com o estado $\psi_{(\mathbf{p}, -1)}$. A quantidade total de carga é $\pm e$.

²Vide Apêndice 6.3

2.2 Zitterbewegung

Zitterbewegung³ é uma palavra alemã que significa “movimento agitado”. Esse fenômeno é o resultado da interferência entre estados de carga de sinais contrários no pacote de ondas. O centro do pacote de ondas representando o movimento livre se move em uma trajetória complicada a qual resulta da mistura de um movimento retílineo uniforme e um movimento oscilatório extremamente rápido. O movimento oscilatório é chamado Zitterbewegung e desaparece se o pacote de ondas contém ondas de apenas um sinal de carga. Vamos ilustrar esse fenômeno calculando a corrente de carga, que é dada por

$$\mathbf{J} = \int_{L^3} \mathbf{j} d^3r, \quad (2.51)$$

onde \mathbf{j} é a densidade de corrente de carga dada por (2.22)

$$\mathbf{j} = \frac{e\hbar}{2mi} \psi^* \overleftrightarrow{\nabla} \psi. \quad (2.52)$$

Para uma partícula na caixa, temos

$$\psi = \sum_{\mathbf{p}, \lambda} a_{(\mathbf{p}, \lambda)} \psi_{(\mathbf{p}, \lambda)}, \quad (2.53)$$

e dessa forma

$$\psi^* \overleftrightarrow{\nabla} \psi = \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{p}', \lambda', \mathbf{p}, \lambda} a_{(\mathbf{p}', \lambda')}^* a_{(\mathbf{p}, \lambda)} \psi_{(\mathbf{p}', \lambda')}^* \psi_{(\mathbf{p}, \lambda)} (\mathbf{p} + \mathbf{p}'), \quad (2.54)$$

com

$$\psi_{(\mathbf{p}', \lambda')}^* \psi_{(\mathbf{p}, \lambda)} = \frac{mc^2}{L^3} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_p \varepsilon_{p'}}} \exp \frac{i}{\hbar} [(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \cdot \mathbf{r} - (\lambda \varepsilon_p - \lambda' \varepsilon_{p'}) t]. \quad (2.55)$$

Assim, a densidade de corrente de carga é dada por

$$\mathbf{j} = \frac{e}{L^3} \sum_{\mathbf{p}', \lambda', \mathbf{p}, \lambda} a_{(\mathbf{p}', \lambda')}^* a_{(\mathbf{p}, \lambda)} \frac{c^2 (\mathbf{p} + \mathbf{p}')}{2\sqrt{\varepsilon_p \varepsilon_{p'}}} \exp \frac{i}{\hbar} [(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \cdot \mathbf{r} - (\lambda \varepsilon_p - \lambda' \varepsilon_{p'}) t]. \quad (2.56)$$

De acordo com (2.51) temos

$$\mathbf{J} = \frac{e}{L^3} \sum_{\mathbf{p}', \lambda', \mathbf{p}, \lambda} a_{(\mathbf{p}', \lambda')}^* a_{(\mathbf{p}, \lambda)} \frac{c^2 (\mathbf{p} + \mathbf{p}')}{2\sqrt{\varepsilon_p \varepsilon_{p'}}} e^{-\frac{i}{\hbar} (\lambda \varepsilon_p - \lambda' \varepsilon_{p'}) t} \int_{L^3} e^{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} - \mathbf{p}') \cdot \mathbf{r}} d^3r, \quad (2.57)$$

notando que⁴

$$\int_{L^3} e^{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} - \mathbf{p}') \cdot \mathbf{r}} d^3r = L^3 \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}, \quad (2.58)$$

encontramos

$$\mathbf{J} = \sum_{\lambda', \mathbf{p}, \lambda} a_{(\mathbf{p}', \lambda')}^* a_{(\mathbf{p}, \lambda)} e^{\frac{c^2 \mathbf{p}}{\varepsilon_p}} e^{-\frac{i}{\hbar} (\lambda - \lambda') \varepsilon_p t} \quad (2.59)$$

³Vide referência [6].

⁴Vide Apêndice 6.3

ou ainda

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= \sum_{\mathbf{p}} e \frac{c^2 \mathbf{p}}{\varepsilon_p} \left(|a_{(\mathbf{p},+1)}|^2 + |a_{(\mathbf{p},-1)}|^2 \right) \\ &\quad + 2\text{Re} \sum_{\mathbf{p}} e \frac{c^2 \mathbf{p}}{\varepsilon_p} e^{-\frac{2i}{\hbar} \varepsilon_p t} a_{(\mathbf{p},+1)}^* a_{(\mathbf{p},-1)}. \end{aligned} \quad (2.60)$$

Fica claro, a partir do resultado acima, que o Zitterbewegung aparece como o resultado da interferência entre estados de carga diferentes. O efeito Zitterbewegung tem sido muito estudado recentemente e é assunto de muita discussão, muitos autores deram interpretações diferentes sobre o efeito. Para um estudo aprofundado sobre o assunto, indicamos a referência [27], onde o autor nos mostra algumas dessas interpretações.

2.3 Interação com um campo externo

Quando uma partícula está sujeita a um campo vetorial externo usamos o acoplamento mínimo (1.27) nas equações de movimento e dessa forma, a equação de Klein-Gordon (2.6) transforma-se para

$$\left(\hat{p}_\mu - \frac{e}{c} A_\mu \right) \left(\hat{p}^\mu - \frac{e}{c} A^\mu \right) \psi = m^2 c^2 \psi. \quad (2.61)$$

Quando a partícula também está sujeita a um campo escalar usamos a prescrição

$$m \rightarrow M = m + V_s/c^2 \quad (2.62)$$

e a equação de Klein-Gordon torna-se

$$\left(\hat{p}_\mu - \frac{e}{c} A_\mu \right) \left(\hat{p}^\mu - \frac{e}{c} A^\mu \right) \psi = M^2 c^2 \psi. \quad (2.63)$$

Vamos escrever a equação acima explicitamente

$$g_{\mu\nu} \left(i\hbar \partial^\nu - \frac{e}{c} A^\nu \right) \left(i\hbar \partial^\mu - \frac{e}{c} A^\mu \right) \psi = M^2 c^2 \psi, \quad (2.64)$$

ou ainda

$$\begin{aligned} &g_{00} \left(i\hbar \partial^0 - \frac{e}{c} A^0 \right)^2 \psi + g_{0i} \left(i\hbar \partial^i - \frac{e}{c} A^i \right) \left(i\hbar \partial^0 - \frac{e}{c} A^0 \right) \psi \\ &+ g_{i0} \left(i\hbar \partial^0 - \frac{e}{c} A^0 \right) \left(i\hbar \partial^i - \frac{e}{c} A^i \right) + g_{ii} \left(i\hbar \partial^i - \frac{e}{c} A^i \right)^2 \psi = M^2 c^2 \psi, \end{aligned} \quad (2.65)$$

levando em conta que $g_{00} = 1$, $g_{0i} = g_{i0} = 0$ e $g_{ii} = -1$ temos

$$\left(\hat{E} - V_t \right)^2 \psi = c^2 \left(\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{V}_e/c \right)^2 \psi + M^2 c^4 \psi, \quad (2.66)$$

que é a forma mais usual da equação de Klein-Gordon na presença de um campo externo.

Para examinar as densidades de carga e de corrente de carga, podemos usar o mesmo método do caso de uma partícula livre. Tomando complexo conjugado de (2.64)

$$g_{\mu\nu} \left(-i\hbar \partial^\nu - \frac{e}{c} A^\nu \right) \left(-i\hbar \partial^\mu - \frac{e}{c} A^\mu \right) \psi^* = M^2 c^2 \psi^* \quad (2.67)$$

multiplicando (2.64) e (2.67) pela esquerda por ψ^* e ψ respectivamente, e além disso subtraindo uma da outra obtemos

$$g_{\mu\nu} \left[\psi^* \left(i\hbar\partial^\nu - \frac{e}{c}A^\nu \right) \left(i\hbar\partial^\mu - \frac{e}{c}A^\mu \right) \psi - \psi \left(-i\hbar\partial^\nu - \frac{e}{c}A^\nu \right) \left(-i\hbar\partial^\mu - \frac{e}{c}A^\mu \right) \psi^* \right] = 0 \quad (2.68)$$

que através de algumas manipulações fica

$$g_{\mu\nu} \left\{ \psi^* \partial^\nu \partial^\mu \psi - \psi \partial^\nu \partial^\mu \psi^* + \frac{ie}{\hbar c} [\psi \partial^\nu A^\mu \psi^* + \psi^* \partial^\nu A^\mu \psi + A^\nu \partial^\mu (\psi \psi^*)] \right\} = 0. \quad (2.69)$$

Notando que

$$\begin{aligned} \partial^\nu (\psi A^\mu \psi^* + \psi^* A^\mu \psi) &= \psi \partial^\nu A^\mu \psi^* + \psi^* \partial^\nu A^\mu \psi + A^\mu \partial^\nu (\psi \psi^*) \\ &= 2\partial^\nu (A^\mu \psi \psi^*) \end{aligned} \quad (2.70)$$

e usando (2.11), encontramos

$$g_{\mu\nu} \partial^\nu \left[(\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*) + \frac{ie}{\hbar c} 2A^\mu \psi \psi^* \right] = 0. \quad (2.71)$$

Finalmente, multiplicando toda a equação por $ie\hbar/(2m)$ obtemos

$$\partial_\mu \left[\frac{i\hbar e}{2m} (\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*) - \frac{e^2}{mc} A^\mu \psi \psi^* \right] = \partial_\mu j^\mu = \partial_t \rho + \vec{\nabla} \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (2.72)$$

que é a equação da continuidade, implicando uma conservação do *quadrivetor densidade de carga-corrente* na presença de potenciais externos, com j^μ dado por

$$j^\mu = \frac{ie\hbar}{2m} \psi^* \overleftrightarrow{\partial}^\mu \psi - \frac{eV^\mu}{mc} \psi \psi^* = \{c\rho, \mathbf{j}\}, \quad (2.73)$$

onde a densidade de carga e a densidade de corrente de carga na presença de potenciais externos são dados por

$$\rho = \frac{ie\hbar}{2mc^2} \psi^* \overleftrightarrow{\partial}_t \psi - \frac{eV_t}{mc^2} \psi \psi^*, \quad (2.74)$$

$$\mathbf{j} = \frac{e\hbar}{2mi} \psi^* \overleftrightarrow{\nabla} \psi - \frac{e\mathbf{V}_e}{mc} \psi \psi^*. \quad (2.75)$$

Perceba que se fizermos $V^\mu = 0$ em (2.73) obtemos (2.20) como deve ser. Note também que o campo escalar não aparece explicitamente em j^μ .

2.4 Conjugação de carga

Existe uma operação denominada conjugação de carga que mapeia estados de cargas de sinais contrários. Vimos na seção 2.1 que ψ e $\psi_c = \psi^*$ representam partículas de cargas, fatores de evolução temporal e momentos opostos, então chamamos ψ_c de função conjugada de carga de ψ . Se ψ satisfaz a equação

$$\left(\hat{E} - eA_0 \right)^2 \psi = c^2 \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 \psi + M^2 c^4 \psi, \quad (2.76)$$

então ψ_c deve satisfazer a equação

$$\left(\hat{E} + eA_0 \right)^2 \psi_c = c^2 \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 \psi_c + M^2 c^4 \psi_c, \quad (2.77)$$

com a carga de sinal contrário. De fato, essa equação é obtida tomando o complexo conjugado da equação de Klein-Gordon (2.76)

$$\left(\hat{E}^* - V_t\right)^2 \psi^* = c^2 (\hat{\mathbf{p}}^* - \mathbf{V}_e/c)^2 \psi^* + M^2 c^4 \psi^*, \quad (2.78)$$

e lembrando que

$$(\hat{p}^\mu)^* = -i\hbar\partial^\mu = -\hat{p}^\mu, \quad (2.79)$$

assim, obtemos (2.77)

$$\left(\hat{E} + V_t\right)^2 \psi_c = c^2 (\hat{\mathbf{p}} + \mathbf{V}_e/c)^2 \psi_c + M^2 c^4 \psi_c. \quad (2.80)$$

Percebe-se que para encontrar a equação (2.80) para ψ_c , podemos usar em (2.78) a prescrição

$$\psi \rightarrow \psi_c \text{ e } V^\mu \rightarrow -V^\mu. \quad (2.81)$$

Isso não quer dizer que sob conjugação de carga estamos mudando o campo externo. As únicas quantidades que mudam são, a carga, o momento e o fator evolução temporal da função de onda. Porém para encontrar a forma correta da equação resultante podemos usar a prescrição (2.81). Precisamos saber como ficaria a expressão para o quadrivetor densidade de corrente de carga (2.73) para a função de onda complexo conjugado de ψ . Podemos usar a prescrição (2.81) para encontrar

$$j_c^\mu = \frac{ie\hbar}{2m} \psi_c^* \overleftrightarrow{\partial}^\mu \psi_c + \frac{eV^\mu}{mc} \psi_c \psi_c^* = (c\rho_c, \mathbf{j}_c), \quad (2.82)$$

com

$$\rho_c = \frac{ie\hbar}{2mc^2} \psi_c^* \overleftrightarrow{\partial}_t \psi_c + \frac{eV_t}{mc^2} \psi_c \psi_c^*, \quad (2.83)$$

$$\mathbf{j}_c = \frac{e\hbar}{2mi} \psi_c^* \overleftrightarrow{\nabla} \psi_c + \frac{e\mathbf{V}_e}{mc} \psi_c \psi_c^*. \quad (2.84)$$

Uma outra maneira de encontrar (2.83) e (2.84) seria usar o mesmo procedimento usado para encontrar a quadricorrente (2.73), obtendo assim

$$\psi_c^* (\hat{p}^\mu + V^\mu/c) (\hat{p}_\mu + V_\mu/c) \psi_c - \psi_c (-\hat{p}^\mu + V^\mu/c) (-\hat{p}_\mu + V_\mu/c) \psi_c^* = 0. \quad (2.85)$$

Fazendo uso dos mesmos cálculos da seção anterior, pode-se chegar facilmente em (2.82). Sob conjugação de carga, a carga da partícula e , conseqüentemente, a densidade de carga da partícula trocam de sinal, mas o que dizer sobre a densidade de corrente de carga? Como ρ e \mathbf{j} satisfazem a equação da continuidade, espera-se que \mathbf{j} também troque de sinal sob conjugação de carga, podemos observar isso fazendo $\psi_c = \psi^*$ em (2.82) para encontrar

$$j_c^\mu = \frac{e\hbar}{2mi} \psi^* \overleftrightarrow{\partial}^\mu \psi + \frac{eV^\mu}{mc} \psi \psi^* = -j^\mu, \quad (2.86)$$

ou seja, sob conjugação de carga teremos

$$j^\mu \rightarrow j_c^\mu = -j^\mu \quad (2.87)$$

ou ainda

$$\rho \rightarrow \rho_c = -\rho \quad (2.88)$$

$$\mathbf{j} \rightarrow \mathbf{j}_c = -\mathbf{j}.$$

Apesar desse resultado, veremos adiante⁵ que muitos trabalhos e livros-texto nos dão uma conclusão diferente de (2.88).

⁵Ver seção 3.6 sobre a conjugação de carga na representação de Schrödinger da equação de Klein-Gordon.

Capítulo 3

Equação de Klein-Gordon no formalismo de Schrödinger

Como foi dito em seções anteriores, a equação de Klein-Gordon é uma equação de segunda ordem na derivada temporal. É possível, através de uma transformação, obter uma equação de primeira ordem na derivada temporal, deixando assim a equação de Klein-Gordon em uma forma similar à equação de Schrödinger. Realmente, essa equação de primeira ordem envolve um vetor coluna de dois componentes, de tal forma que trocamos uma equação de segunda ordem na derivada temporal por duas equações de primeira ordem na derivada temporal. Mostraremos agora uma maneira de se obter essa equação.

Escrevemos o ansatz para a função de onda $\psi(\mathbf{r}, t)$ como

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}, t) + \chi(\mathbf{r}, t), \quad (3.1)$$

onde as parcelas φ e χ são dadas por

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{2}\psi(\mathbf{r}, t) + \beta(\mathbf{r}, t)\partial_t\psi(\mathbf{r}, t), \\ \chi(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{2}\psi(\mathbf{r}, t) - \beta(\mathbf{r}, t)\partial_t\psi(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (3.2)$$

Aqui, β é um coeficiente arbitrário. A dependência em $\partial_t\psi$ é o que nos possibilitará escrever uma equação de primeira ordem na derivada temporal, como veremos adiante. Subtraindo as duas equações em (3.2) obtemos

$$\partial_t\psi = \frac{\varphi - \chi}{2\beta}. \quad (3.3)$$

Derivando em relação ao tempo as duas equações em (3.2) encontramos

$$\begin{aligned} \partial_t\varphi &= \left(\frac{1}{2} + \dot{\beta}\right)\partial_t\psi + \beta\partial_t^2\psi, \\ \partial_t\chi &= \left(\frac{1}{2} - \dot{\beta}\right)\partial_t\psi - \beta\partial_t^2\psi. \end{aligned} \quad (3.4)$$

A equação de Klein-Gordon para a partícula livre (2.6) pode ser escrita como

$$-\hbar^2\partial_t^2\psi = (\hat{\mathbf{p}}^2c^2 + m^2c^4)\psi, \quad (3.5)$$

substituindo (3.3) e (3.5) em (3.4), encontramos

$$\partial_t \varphi = \frac{1}{2\beta} \left(\frac{1}{2} + \dot{\beta} \right) (\varphi - \chi) - \frac{\beta}{\hbar^2} (\hat{\mathbf{p}}^2 c^2 + m^2 c^4) (\varphi + \chi), \quad (3.6)$$

$$\partial_t \chi = \frac{1}{2\beta} \left(\frac{1}{2} - \dot{\beta} \right) (\varphi - \chi) + \frac{\beta}{\hbar^2} (\hat{\mathbf{p}}^2 c^2 + m^2 c^4) (\varphi + \chi),$$

ou ainda

$$\partial_t \varphi = -\frac{\beta c^2}{\hbar^2} \hat{\mathbf{p}}^2 (\varphi + \chi) + \frac{1}{4\beta} [(1 - \gamma) \varphi - (1 + \gamma) \chi] + \frac{\kappa}{2\beta} (\varphi - \chi) \quad (3.7)$$

$$\partial_t \chi = +\frac{\beta c^2}{\hbar^2} \hat{\mathbf{p}}^2 (\varphi + \chi) + \frac{1}{4\beta} [(1 + \gamma) \varphi - (1 - \gamma) \chi] - \frac{\kappa}{2\beta} (\varphi - \chi),$$

onde fizemos

$$\kappa = \dot{\beta}, \quad \gamma = \left(\frac{2\beta m c^2}{\hbar} \right)^2. \quad (3.8)$$

Podemos escrever as duas equações em (3.7) como uma única equação da forma

$$i\hbar \partial_t \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = -\frac{i\beta c^2}{\hbar} \hat{\mathbf{p}}^2 \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} + \frac{i\hbar}{4\beta} \begin{pmatrix} 1 + 2\kappa - \gamma & -(1 + 2\kappa + \gamma) \\ 1 - 2\kappa + \gamma & -(1 - 2\kappa - \gamma) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

Escolhendo uma representação particular com

$$\beta = \frac{i\hbar}{2m c^2}, \quad (3.10)$$

temos $\kappa = 0$ e $\gamma = -1$, com isso (3.9) pode ser escrita como

$$i\hbar \partial_t \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} + m c^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Definimos o vetor coluna de dois componentes

$$\Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}, \quad (3.12)$$

onde φ é o componente superior e χ o componente inferior. Definimos também as matrizes

$$\hat{\tau}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\tau}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\tau}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.13)$$

note que $\hat{\tau}_i$ são as matrizes de Pauli, as quais satisfazem às relações

$$\hat{\tau}_k^2 = \hat{1}, \quad \hat{\tau}_k \hat{\tau}_l = -\hat{\tau}_l \hat{\tau}_k = i \hat{\tau}_m, \quad (3.14)$$

onde os índices k, l e m tomam os valores 1, 2 e 3 em ordem cíclica. Assim, podemos escrever a equação de movimento

$$i\hbar \partial_t \Psi = \hat{H}^0 \Psi \quad (3.15)$$

com

$$\hat{H}^0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} (\hat{\tau}_3 + i\hat{\tau}_2) + \hat{\tau}_3 mc^2, \quad (3.16)$$

sendo o operador hamiltoniano para partícula livre nesse formalismo. Com β dado por (3.10) as equações em (3.2) e em (3.3) podem ser escritas como

$$\begin{aligned} \varphi &= \frac{1}{2mc^2} (mc^2 + i\hbar\partial_t) \psi, \\ \chi &= \frac{1}{2mc^2} (mc^2 - i\hbar\partial_t) \psi, \end{aligned} \quad (3.17)$$

e

$$\partial_t \psi = \frac{mc^2}{i\hbar} (\varphi - \chi). \quad (3.18)$$

É interessante observar como ficam a densidade de carga e a densidade de corrente de carga nesse formalismo. Sabemos de (2.21) que a densidade de carga para a partícula livre é

$$\rho = \frac{ie\hbar}{2mc^2} \psi^* \overleftrightarrow{\partial}_t \psi. \quad (3.19)$$

Nessa nova representação, para encontrar ρ substituímos (3.1) e (3.18) em (3.19) e encontramos

$$\rho = e (|\varphi|^2 - |\chi|^2), \quad (3.20)$$

que agora é escrito como a diferença entre duas quantidades positivas. Com a ajuda do vetor coluna (3.12), ρ pode ser escrito como

$$\rho = e \bar{\Psi} \Psi, \quad \bar{\Psi} \equiv \Psi^\dagger \hat{\tau}_3. \quad (3.21)$$

O símbolo dagger (\dagger) representa o conjugado hermitiano, isto é, ele atua numa matriz pegando a transposta e o complexo conjugado de seus elementos.

Por outro lado, a densidade de corrente de carga (2.22) é

$$\mathbf{j} = \frac{e\hbar}{2mi} \psi^* \overleftrightarrow{\nabla} \psi, \quad (3.22)$$

que pode ser escrita da seguinte forma

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= \frac{e\hbar}{2mi} \left[(\varphi + \chi)^* \overleftrightarrow{\nabla} (\varphi + \chi) - (\varphi + \chi) \overleftrightarrow{\nabla} (\varphi + \chi)^* \right] \\ &= \frac{e\hbar}{2mi} \left[\begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}^\dagger \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \overleftrightarrow{\nabla} \varphi \\ \overleftrightarrow{\nabla} \chi \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \overleftrightarrow{\nabla} \varphi \\ \overleftrightarrow{\nabla} \chi \end{pmatrix}^\dagger \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \right] \end{aligned} \quad (3.23)$$

e finalmente

$$\mathbf{j} = \frac{e\hbar}{2mi} \bar{\Psi} \hat{\alpha} \overleftrightarrow{\nabla} \Psi, \quad (3.24)$$

onde $\hat{\alpha}$ é definido como

$$\hat{\alpha} = \hat{\tau}_3 + i\hat{\tau}_2. \quad (3.25)$$

3.1 Soluções de partícula livre e produto interno

Vamos considerar o ansatz que para partículas livres o vetor coluna é da forma

$$\Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et) \right], \quad (3.26)$$

substituindo a relação acima em (3.15) obtemos

$$E \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} + mc^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

ou ainda

$$E\varphi_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} (\varphi_0 + \chi_0) + mc^2\varphi_0, \quad E\chi_0 = -\frac{\mathbf{p}^2}{2m} (\varphi_0 + \chi_0) - mc^2\chi_0. \quad (3.28)$$

Escrevemos as equações de (3.28) como

$$\left(E - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - mc^2 \right) \varphi_0 - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \chi_0 = 0 \quad (3.29)$$

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2m} \varphi_0 + \left(E + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + mc^2 \right) \chi_0 = 0$$

que também pode ser escrito na forma matricial

$$\begin{pmatrix} E - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - mc^2 & -\frac{\mathbf{p}^2}{2m} \\ \frac{\mathbf{p}^2}{2m} & E + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.30)$$

Para que esse sistema admita soluções não-triviais é preciso que o determinante da matriz dos coeficientes seja nulo, isto é

$$\begin{vmatrix} E - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - mc^2 & -\frac{\mathbf{p}^2}{2m} \\ \frac{\mathbf{p}^2}{2m} & E + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + mc^2 \end{vmatrix} = 0, \quad (3.31)$$

o que implica na seguinte relação

$$E = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4} = \pm \varepsilon_p. \quad (3.32)$$

Assim, duas soluções são possíveis, uma que chamamos de $\Psi^{(+)}$ com o fator evolução temporal $E = +\varepsilon_p$, e outra que chamamos $\Psi^{(-)}$ com $E = -\varepsilon_p$. Aproveitamos para definir aqui, o produto interno nesse espaço vetorial, entre dois vetores Ψ_1 e Ψ_2 como

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle \equiv \int \Psi_1^\dagger \hat{\tau}_3 \Psi_2 d^3r = \int \bar{\Psi}_1 \Psi_2 d^3r, \quad (3.33)$$

este é chamado também de produto interno generalizado ou produto Φ . Se normalizamos

$$\langle \Psi_{(\mathbf{p}, \pm)} | \Psi_{(\mathbf{p}, \pm)} \rangle = \pm 1, \quad (3.34)$$

então, estados de cargas $\pm e$ terão norma ao quadrado¹ igual a ± 1 . Aproveitamos para chamar atenção para as referências [13] e [19] em que a normalização é definida erradamente como sempre positiva. Para a carga de cada um dos estados teremos

$$Q_{(\pm)} = \int \rho_{(\pm)} d^3\mathbf{r} = e \langle \Psi_{(\mathbf{p},\pm)} | \Psi_{(\mathbf{p},\pm)} \rangle = \pm e. \quad (3.35)$$

Discutiremos agora em detalhes cada uma das soluções. A primeira solução corresponde a $E = +\varepsilon_p$ e com isso temos

$$\Psi_{(\mathbf{p},+)} = \begin{pmatrix} \varphi_{(\mathbf{p},+)} \\ \chi_{(\mathbf{p},+)} \end{pmatrix} = A_{(\mathbf{p},+)} \begin{pmatrix} \varphi_{0(\mathbf{p},+)} \\ \chi_{0(\mathbf{p},+)} \end{pmatrix} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \varepsilon_p t) \right], \quad (3.36)$$

fazendo $E = \varepsilon_p$, $\varphi_0 = \varphi_{0(\mathbf{p},+)}$ e $\chi_0 = \chi_{0(\mathbf{p},+)}$ em (3.28) concluímos que

$$(\varepsilon_p - mc^2) \varphi_{0(\mathbf{p},+)} = -(\varepsilon_p + mc^2) \chi_{0(\mathbf{p},+)}. \quad (3.37)$$

Escolhendo

$$\chi_{0(\mathbf{p},+)} = -(\varepsilon_p - mc^2) \implies \varphi_{0(\mathbf{p},+)} = \varepsilon_p + mc^2, \quad (3.38)$$

temos

$$\begin{pmatrix} \varphi_{0(\mathbf{p},+)} \\ \chi_{0(\mathbf{p},+)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} mc^2 + \varepsilon_p \\ mc^2 - \varepsilon_p \end{pmatrix}. \quad (3.39)$$

Da mesma maneira que no formalismo de segunda ordem, podemos encontrar a constante de normalização através da normalização na caixa obedecendo as seguintes relações

$$\Psi_{(\mathbf{p}_n,+)} = A_{(\mathbf{p}_n,+)} \begin{pmatrix} mc^2 + \varepsilon_{p_n} \\ mc^2 - \varepsilon_{p_n} \end{pmatrix} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}_n \cdot \mathbf{r} - \varepsilon_{p_n} t) \right], \quad (3.40)$$

onde

$$\mathbf{p}_n = \frac{2\pi\hbar}{L} \mathbf{n}, \quad \mathbf{n} = \{n_x, n_y, n_z\}; \quad n_i \in \mathbb{N} \quad (3.41)$$

e

$$\varepsilon_{p_n} = \sqrt{\mathbf{p}_n^2 c^2 + m^2 c^4}. \quad (3.42)$$

Fazendo uso de (3.34), temos

$$|A_{(\mathbf{p}_n,+)}|^2 \int \left(|\varphi_{0(\mathbf{p}_n,+)}|^2 - |\chi_{0(\mathbf{p}_n,+)}|^2 \right) d^3r = +1 \implies A_{(\mathbf{p}_n,+)} = \frac{1}{\sqrt{4L^3 mc^2 \varepsilon_{p_n}}}, \quad (3.43)$$

obtendo dessa maneira

$$\Psi_{(\mathbf{p}_n,+)} = \begin{pmatrix} \varphi_{(\mathbf{p}_n,+)} \\ \chi_{(\mathbf{p}_n,+)} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{4L^3 mc^2 \varepsilon_{p_n}}} \begin{pmatrix} mc^2 + \varepsilon_{p_n} \\ mc^2 - \varepsilon_{p_n} \end{pmatrix} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}_n \cdot \mathbf{r} - \varepsilon_{p_n} t) \right], \quad (3.44)$$

¹Conscientes do abuso de linguagem, daqui por diante nos referiremos à norma ao quadrado simplesmente como norma.

que é a solução para o estado de carga $Q = +e$. Pelo mesmo procedimento, mas escolhendo $E = -\varepsilon_p$, obtemos

$$\Psi_{(\mathbf{p}_n, -)} = \begin{pmatrix} \varphi_{(\mathbf{p}_n, -)} \\ \chi_{(\mathbf{p}_n, -)} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{4L^3 mc^2 \varepsilon_{p_n}}} \begin{pmatrix} mc^2 - \varepsilon_{p_n} \\ mc^2 + \varepsilon_{p_n} \end{pmatrix} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}_n \cdot \mathbf{r} + \varepsilon_{p_n} t) \right] \quad (3.45)$$

que é a solução para o estado de carga $Q = -e$. Repare que $A_{(\mathbf{p}_n, -)} = A_{(\mathbf{p}_n, +)} = \frac{1}{\sqrt{4L^3 mc^2 \varepsilon_{p_n}}}$ pois neste caso escolhemos

$$|A_{(\mathbf{p}_n, -)}|^2 \int \left(|\varphi_{0(\mathbf{p}_n, -)}|^2 - |\chi_{0(\mathbf{p}_n, -)}|^2 \right) d^3 \mathbf{r} = -1. \quad (3.46)$$

Daqui por diante, usaremos \mathbf{p} e $\sum_{\mathbf{p}}$ ao invés de \mathbf{p}_n e $\sum_{\mathbf{p}_n}$ para facilitar a notação. Podemos escrever então de uma forma geral

$$\Psi_{(\mathbf{p}, \lambda)} = \frac{1}{\sqrt{4L^3 mc^2 \varepsilon_p}} \begin{pmatrix} mc^2 + \lambda \varepsilon_p \\ mc^2 - \lambda \varepsilon_p \end{pmatrix} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \lambda \varepsilon_p t) \right], \quad (3.47)$$

e assim é fácil mostrar a condição de ortonormalidade²

$$\langle \Psi_{(\mathbf{p}', \lambda')} | \Psi_{(\mathbf{p}, \lambda)} \rangle = \lambda \delta_{\lambda' \lambda} \delta_{\mathbf{p}' \mathbf{p}}. \quad (3.48)$$

A solução mais geral é uma mistura de ambos os tipos de soluções, ou seja

$$\Psi = \sum_{\mathbf{p}, \lambda} a_{(\mathbf{p}, \lambda)} \Psi_{(\mathbf{p}, \lambda)} = \sum_{\mathbf{p}} \left(a_{(\mathbf{p}, +1)} \Psi_{(\mathbf{p}, +1)} + a_{(\mathbf{p}, -1)} \Psi_{(\mathbf{p}, -1)} \right), \quad (3.49)$$

onde os coeficientes da expansão são dados por

$$a_{(\mathbf{p}, \lambda)} = \lambda \langle \Psi_{(\mathbf{p}, \lambda)} | \Psi \rangle. \quad (3.50)$$

Dessa forma temos que

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \Psi \rangle &= \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \lambda, \lambda'} a_{(\mathbf{p}', \lambda')}^* a_{(\mathbf{p}, \lambda)} \langle \Psi_{(\mathbf{p}', \lambda')} | \Psi_{(\mathbf{p}, \lambda)} \rangle \\ &= \sum_{\mathbf{p}} \left(|a_{(\mathbf{p}, +1)}|^2 - |a_{(\mathbf{p}, -1)}|^2 \right). \end{aligned} \quad (3.51)$$

Definindo

$$N_{\pm} = \sum_{\mathbf{p}} |a_{(\mathbf{p}, \pm 1)}|^2, \quad (3.52)$$

podemos escrever

$$Q = e \langle \Psi | \Psi \rangle = N e \quad (3.53)$$

onde

$$N = N_+ - N_- = \sum_{\mathbf{p}} \left(|a_{(\mathbf{p}, +1)}|^2 - |a_{(\mathbf{p}, -1)}|^2 \right) = \begin{cases} \pm 1 \\ 0 \end{cases}. \quad (3.54)$$

Aqui $\sum_{\mathbf{p}} |a_{(\mathbf{p}, +1)}|^2$ nos dá a quantidade relativa de carga $+e$ que é distribuída espacialmente de acordo com o autoestado $\Psi_{(\mathbf{p}, +1)}$, enquanto $\sum_{\mathbf{p}} |a_{(\mathbf{p}, -1)}|^2$ nos dá a quantidade relativa de carga $-e$ distribuída espacialmente de acordo com o estado $\Psi_{(\mathbf{p}, -1)}$. A quantidade total de carga é $\pm e$.

²Vide Apêndice 6.4

3.2 Valor esperado

A equação de Klein-Gordon no formalismo de Schrödinger para uma partícula livre é escrita na forma

$$i\hbar\partial_t |\Psi\rangle = \hat{H}^0 |\Psi\rangle = \left[(\hat{\tau}_3 + i\hat{\tau}_2) \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + mc^2\hat{\tau}_3 \right] |\Psi\rangle. \quad (3.55)$$

Vimos que estados estacionários podem ser encontrados com o ansatz

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle = |\Psi(\mathbf{r})\rangle e^{\frac{i}{\hbar}Et} \quad (3.56)$$

que transforma (3.55) em

$$\hat{H}^0 |\Psi(\mathbf{r})\rangle = E |\Psi(\mathbf{r})\rangle. \quad (3.57)$$

O fator E descreve a evolução temporal do estado estacionário $|\Psi(\mathbf{r})\rangle$. Já vimos que os autovalores E são dados por

$$E = \lambda\sqrt{\mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4} = \lambda\varepsilon_p, \quad \lambda = \pm 1. \quad (3.58)$$

Na mecânica quântica não-relativística os autovalores do operador hamiltoniano descrevem tanto a evolução temporal da função de onda como a energia de um estado estacionário. Como se pode ver, na teoria relativística os autovalores $E = \pm\varepsilon_p$ de \hat{H}^0 também representam a evolução temporal da função de onda, mas nem sempre representam a energia do estado estacionário. A energia de uma partícula em um determinado estado é dada pela integral do componente T_{00} do tensor energia-momento³, a qual é encontrada como sendo sempre positiva e igual à ε_p , tanto para partículas como para antipartículas. Assim o autovalor $E = +\varepsilon_p$ do operador hamiltoniano \hat{H}^0 no estado $|\Psi^{(+)}(\mathbf{r})\rangle$ representa tanto o fator evolução temporal do estado estacionário como a energia da partícula nesse estado, assim como na mecânica quântica não-relativística. Porém para a antipartícula, o autovalor $E = -\varepsilon_p$ do operador hamiltoniano \hat{H}^0 no estado $|\Psi^{(-)}(\mathbf{r})\rangle$ não pode ser interpretado como a energia do estado estacionário, mas somente como o fator evolução temporal desse estado.

Os autores [1]-[4], [6]-[7], [16], [19] e [20], propuseram a definição do valor esperado de um operador $\hat{\mathcal{O}}$ como

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle = \langle \Psi | \hat{\mathcal{O}} \Psi \rangle = \int \bar{\Psi} \hat{\mathcal{O}} \Psi d^3r, \quad (3.59)$$

mas como pode-se perceber, isso não é válido nem para o caso mais trivial que é o operador identidade. Fazendo $\hat{\mathcal{O}} = \hat{1}$ temos

$$\langle \hat{1} \rangle_{\pm} = \langle \Psi_{(\mathbf{p}, \pm)} | \hat{1} \Psi_{(\mathbf{p}, \pm)} \rangle = \pm 1, \quad (3.60)$$

o que obviamente não está correto. Uma equação de autovalor em um espaço vetorial arbitrário é dada por

$$\hat{\mathcal{O}} |\Psi\rangle = \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle |\Psi\rangle \quad (3.61)$$

onde $\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle$ é o autovalor do operador $\hat{\mathcal{O}}$ no estado $|\Psi\rangle$. Temos ainda que

$$\langle \Psi | \hat{\mathcal{O}} \Psi \rangle = \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle \langle \Psi | \Psi \rangle, \quad (3.62)$$

³Vide apêndice 6.7

onde $\langle \Psi | \Psi \rangle$ é a norma de $|\Psi\rangle$. Se a norma for diferente de zero podemos escrever a equação acima como

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\langle \Psi | \hat{O} \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \quad (3.63)$$

Logo, a definição do valor esperado depende da definição do produto interno. Poderíamos usar a definição (3.59) somente se $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$. Veja que isto não ocorre sempre nesse formalismo, em (3.34) temos

$$\langle \Psi_{(\mathbf{p}, \pm)} | \Psi_{(\mathbf{p}, \pm)} \rangle = \pm 1, \quad (3.64)$$

que só é igual a 1 para os estados de carga $+e$.

Assim, concluímos que nesse formalismo, a forma correta do valor esperado de um operador \hat{O} no estado $|\Psi\rangle$ é dada por (3.63)

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\int \bar{\Psi} \hat{O} \Psi d^3r}{\int \bar{\Psi} \Psi d^3r}.$$

Dessa forma, temos para o operador identidade o seguinte

$$\langle \hat{1} \rangle_{\pm} = \frac{\langle \Psi_{(\mathbf{p}, \pm)} | \hat{1} \Psi_{(\mathbf{p}, \pm)} \rangle}{\langle \Psi_{(\mathbf{p}, \pm)} | \Psi_{(\mathbf{p}, \pm)} \rangle} = 1, \quad (3.65)$$

como deve ser. Para o operador momento temos que

$$\hat{\mathbf{p}} \Psi_{(\mathbf{p}, \pm)} = \mathbf{p} \Psi_{(\mathbf{p}, \pm)} \quad (3.66)$$

e assim o valor esperado do operador momento é dado por

$$\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle_{\pm} = \frac{\langle \Psi_{(\mathbf{p}, \pm)} | \hat{\mathbf{p}} \Psi_{(\mathbf{p}, \pm)} \rangle}{\langle \Psi_{(\mathbf{p}, \pm)} | \Psi_{(\mathbf{p}, \pm)} \rangle} = \mathbf{p}. \quad (3.67)$$

A exigência de que $\langle \hat{O} \rangle$ deve ser real nos dá

$$\left(\int \Psi^\dagger \hat{\tau}_3 \hat{O} \Psi d^3r \right)^\dagger = \int \Psi^\dagger \hat{O}^\dagger \hat{\tau}_3 \Psi d^3r = \int \Psi^\dagger \hat{\tau}_3 \hat{O} \Psi d^3r \quad (3.68)$$

ou seja, a condição

$$\hat{O}^\dagger \hat{\tau}_3 = \hat{\tau}_3 \hat{O} \quad \text{ou} \quad \hat{O}^\ddagger \equiv \hat{\tau}_3 \hat{O}^\dagger \hat{\tau}_3 = \hat{O} \quad (3.69)$$

deve ser satisfeita. Chamamos esta última condição de *hermiticidade generalizada* de um operador \hat{O} . Note que o operador hamiltoniano não é *hermitiano ordinário* (hermitiano no sentido usual), isto é, não satisfaz $\hat{H}^{0\dagger} = \hat{H}^0$, mas ele é *hermitiano generalizado*, pois

$$\begin{aligned} \hat{H}^{0\dagger} &= \hat{\tau}_3 \hat{H}^{0\dagger} \hat{\tau}_3 = \hat{\tau}_3 \left[(\hat{\tau}_3 - i\hat{\tau}_2) \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{\tau}_3 mc^2 \right] \hat{\tau}_3 \\ &= \left[(\hat{\tau}_3 + i\hat{\tau}_2) \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{\tau}_3 mc^2 \right] \hat{\tau}_3 \hat{\tau}_3 = \hat{H}^0, \end{aligned} \quad (3.70)$$

isso garante que $\langle \hat{H}^0 \rangle$ seja real.

3.3 Zitterbewegung

Assim como no formalismo de segunda ordem podemos estender os cálculos na representação de Schrödinger para mostrar o efeito Zitterbewegung, calculando a corrente de carga dada por

$$\mathbf{J} = \int_{L^3} \mathbf{j} d^3r, \quad (3.71)$$

com \mathbf{j} dado por

$$\mathbf{j} = \frac{e\hbar}{2mi} \bar{\Psi} \hat{\alpha} \overleftrightarrow{\nabla} \Psi. \quad (3.72)$$

Para um pacote de ondas temos

$$\Psi = \sum_{\mathbf{p}, \lambda} a_{(\mathbf{p}, \lambda)} \Psi_{(\mathbf{p}, \lambda)} = \sum_{\mathbf{p}} (a_{(\mathbf{p}, +1)} \Psi_{(\mathbf{p}, +1)} + a_{(\mathbf{p}, -1)} \Psi_{(\mathbf{p}, -1)}), \quad (3.73)$$

com

$$\Psi_{(\mathbf{p}, \lambda)} = \frac{1}{\sqrt{4L^3 mc^2 \varepsilon_p}} \begin{pmatrix} mc^2 + \lambda \varepsilon_p \\ mc^2 - \lambda \varepsilon_p \end{pmatrix} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \lambda \varepsilon_p t) \right]. \quad (3.74)$$

Dessa forma, temos

$$\bar{\Psi} \hat{\alpha} \overleftrightarrow{\nabla} \Psi = \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \lambda, \lambda'} a_{(\mathbf{p}', \lambda')}^* a_{(\mathbf{p}, \lambda)} \bar{\Psi}_{(\mathbf{p}', \lambda')} \hat{\alpha} \overleftrightarrow{\nabla} \Psi_{(\mathbf{p}, \lambda)}, \quad (3.75)$$

e ainda

$$\bar{\Psi} \hat{\alpha} \overleftrightarrow{\nabla} \Psi = \frac{2im}{L^3 \hbar} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \lambda, \lambda'} a_{(\mathbf{p}', \lambda')}^* a_{(\mathbf{p}, \lambda)} \frac{c^2 \mathbf{p}}{\varepsilon_p} e^{\frac{i}{\hbar} [(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \cdot \mathbf{r} - (\lambda \varepsilon_p - \lambda' \varepsilon_{p'}) t]}. \quad (3.76)$$

Assim, a corrente de carga é dada por

$$\mathbf{J} = \frac{e}{L^3} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \lambda, \lambda'} a_{(\mathbf{p}', \lambda')}^* a_{(\mathbf{p}, \lambda)} \frac{c^2 \mathbf{p}}{\varepsilon_p} e^{-\frac{i}{\hbar} (\lambda \varepsilon_p - \lambda' \varepsilon_{p'}) t} \int_{L^3} e^{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} - \mathbf{p}') \cdot \mathbf{r}} d^3r. \quad (3.77)$$

Notando que

$$\int_{L^3} e^{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} - \mathbf{p}') \cdot \mathbf{r}} d^3r = L^3 \delta_{\mathbf{p}' \mathbf{p}}, \quad (3.78)$$

encontramos finalmente

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= \sum_{\mathbf{p}} \frac{ec^2 \mathbf{p}}{\varepsilon_p} (|a_{\mathbf{p}, +1}|^2 + |a_{\mathbf{p}, -1}|^2) \\ &\quad + 2\text{Re} \sum_{\mathbf{p}} \frac{ec^2 \mathbf{p}}{\varepsilon_p} \left[a_{\mathbf{p}, -1}^* a_{\mathbf{p}, +1} \exp \left(-\frac{2i}{\hbar} \varepsilon_p t \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.79)$$

3.4 Limite não-relativístico

Para estudar o limite não-relativístico escrevemos

$$\varepsilon_p = mc^2 \sqrt{1 + \frac{\mathbf{p}^2}{m^2 c^2}}, \quad (3.80)$$

como para esse caso $|\mathbf{p}| \ll mc^2$, uma aproximação em primeira ordem nos dá

$$\varepsilon_p \approx mc^2 + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \quad (3.81)$$

e com isso escrevemos para a solução de carga $+e$

$$\begin{pmatrix} \varphi_{(\mathbf{p},+)} \\ \chi_{(\mathbf{p},+)} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{4L^3 mc^2 \varepsilon_p}} \begin{pmatrix} mc^2 + \varepsilon_p \\ mc^2 - \varepsilon_p \end{pmatrix} \approx \frac{1}{\sqrt{L^3}} \begin{pmatrix} \frac{2mc^2 + \mathbf{p}^2/2m}{\sqrt{4mc^2 \varepsilon_p}} \\ \frac{-\mathbf{p}^2/2m}{\sqrt{4mc^2 \varepsilon_p}} \end{pmatrix}. \quad (3.82)$$

Notando que

$$\sqrt{mc^2 \varepsilon_p} = mc^2 \sqrt{1 + \frac{\mathbf{p}^2}{2m^2 c^2}} \approx mc^2 \quad (3.83)$$

e ainda

$$2mc^2 + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \approx 2mc^2, \quad (3.84)$$

temos

$$\begin{pmatrix} \varphi_{(\mathbf{p},+)} \\ \chi_{(\mathbf{p},+)} \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{1}{\sqrt{16L^3}} \left(\frac{v}{c}\right)^2 \end{pmatrix} \Rightarrow \lim_{v/c \rightarrow 0} \begin{pmatrix} \varphi_{(\mathbf{p},+)} \\ \chi_{(\mathbf{p},+)} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.85)$$

onde v é a velocidade da partícula. Dessa forma, podemos escrever a autofunção de carga $+e$ para o limite não-relativístico como

$$\Psi_{(\mathbf{p},+)}^{NR} \approx \frac{1}{\sqrt{L^3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - mc^2 t) \right]. \quad (3.86)$$

Desenvolvendo cálculos semelhantes para a autofunção de carga $-e$ encontramos

$$\Psi_{(\mathbf{p},-)}^{NR} \approx \frac{1}{\sqrt{L^3}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} + mc^2 t) \right]. \quad (3.87)$$

3.5 Interação com um campo externo

A equação de Klein-Gordon com acoplamento mínimo é dada por

$$(i\hbar\partial_t - V_t)^2 \psi = [c^2 (\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{V}_e/c)^2 + m^2 c^4] \psi. \quad (3.88)$$

Na presença de um potencial escalar, a equação (3.88) passa a ser escrita como

$$(i\hbar\partial_t - V_t)^2 \psi = [c^2 (\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{V}_e/c)^2 + M^2 c^4] \psi, \quad (3.89)$$

onde

$$M = m + V_s/c^2. \quad (3.90)$$

Para construir a equação de primeira ordem na derivada temporal, começamos com o *ansatz*

$$\psi = \varphi + \chi, \quad (3.91)$$

onde as parcelas φ e χ tem a forma

$$\begin{aligned}\varphi &= \frac{1}{2}\psi + \beta\partial_t\psi + \delta\psi, \\ \chi &= \frac{1}{2}\psi - \beta\partial_t\psi - \delta\psi.\end{aligned}\tag{3.92}$$

Aqui, os coeficientes β e δ são funções arbitrárias dependentes de \mathbf{r} e t . Veja que em relação à (3.2) acrescentamos mais um termo em (3.92). Subtraindo φ e χ em (3.92) encontramos

$$\partial_t\psi = \frac{\varphi - \chi}{2\beta} - \frac{\delta}{\beta}\psi.\tag{3.93}$$

Derivando em relação ao tempo as duas equações de (3.92) obtemos

$$\begin{aligned}\partial_t\varphi &= \left(\frac{1}{2} + \dot{\beta} + \delta\right)\partial_t\psi + \beta\partial_t^2\psi + \dot{\delta}\psi \\ \partial_t\chi &= \left(\frac{1}{2} - \dot{\beta} - \delta\right)\partial_t\psi - \beta\partial_t^2\psi - \dot{\delta}\psi.\end{aligned}\tag{3.94}$$

Definindo

$$\hat{\Pi} \equiv \hat{\mathbf{p}} - \mathbf{V}_e/c,\tag{3.95}$$

rearranjamos (3.89) como

$$\partial_t^2\psi = -\frac{2i}{\hbar}V_t\partial_t\psi + \left[\left(\frac{V_t}{\hbar}\right)^2 - \frac{i}{\hbar}\dot{V}_t - \left(\frac{c\hat{\Pi}}{\hbar}\right)^2 - \left(\frac{Mc^2}{\hbar}\right)^2\right]\psi,\tag{3.96}$$

substituímos (3.93) e (3.96) em (3.94) para encontrar

$$\begin{aligned}\partial_t\varphi &= -\frac{c^2\hat{\Pi}^2\beta}{\hbar^2}(\varphi + \chi) + \frac{1}{4\beta}[(1 - \gamma)\varphi - (1 + \gamma)\chi] + \frac{\kappa}{2\beta}[(1 - \eta)\varphi - (1 + \eta)\chi] \\ \partial_t\chi &= +\frac{c^2\hat{\Pi}^2\beta}{\hbar^2}(\varphi + \chi) + \frac{1}{4\beta}[(1 + \gamma)\varphi - (1 - \gamma)\chi] - \frac{\kappa}{2\beta}[(1 + \eta)\varphi - (1 - \eta)\chi],\end{aligned}\tag{3.97}$$

onde

$$\kappa = \dot{\beta} + \delta - \frac{2i\beta}{\hbar}V_t, \quad \eta = \frac{\delta}{\kappa}, \quad \gamma = \frac{4\beta^2}{\hbar^2} \left(M^2c^4 + i\hbar\dot{V}_t - V_t^2 - \frac{\delta\hbar^2}{\beta} + \frac{\delta\hbar^2\kappa}{\beta^2} \right).\tag{3.98}$$

Podemos deixar as duas equações em (3.97) como uma única equação da forma

$$\begin{aligned}i\hbar\partial_t \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} &= -\frac{i}{\hbar}\beta c^2\hat{\Pi}^2 \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} + \frac{i\hbar}{4\beta} \begin{pmatrix} 1 - \gamma & -(1 + \gamma) \\ 1 + \gamma & -(1 - \gamma) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \\ &+ \frac{i\hbar\kappa}{2\beta} \begin{pmatrix} 1 - \eta & -(1 + \eta) \\ -(1 + \eta) & 1 - \eta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}.\end{aligned}\tag{3.99}$$

Os coeficientes β e δ são arbitrários (exceto por $\beta \neq 0$) e podemos escolher qualquer forma para eles. Escolhemos então uma representação tal que

$$\beta = \frac{i\hbar}{2Mc^2}, \quad \delta = -\frac{V_t}{2Mc^2},\tag{3.100}$$

onde escolhemos também o potencial escalar sendo independente do tempo. Com essas escolhas temos que

$$\kappa = -\delta, \quad \eta = -1, \quad \Delta = -1. \quad (3.101)$$

Substituindo (3.100), (3.101) e (3.12) em (3.99) encontramos

$$i\hbar\partial_t\Psi = \hat{H}\Psi, \quad (3.102)$$

com

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{V}_e/c)^2}{2M} (\hat{\tau}_3 + i\hat{\tau}_2) + Mc^2\hat{\tau}_3 + V_t, \quad (3.103)$$

sendo o operador hamiltoniano para uma partícula sujeita a um campo externo em sua forma geral. Assim, a equação (3.92) torna-se

$$\varphi = \frac{1}{2Mc^2} \left[Mc^2\psi + i\hbar \left(\partial_t + \frac{i}{\hbar} V_t \right) \psi \right] \quad (3.104)$$

$$\chi = \frac{1}{2Mc^2} \left[Mc^2\psi - i\hbar \left(\partial_t + \frac{i}{\hbar} V_t \right) \psi \right]$$

e a equação (3.93)

$$i\hbar\partial_t\psi = Mc^2(\varphi - \chi) + V_t\psi. \quad (3.105)$$

Veremos agora como ficam a densidade de carga e a densidade de corrente de carga nesse formalismo. A densidade de carga para uma partícula sujeita a um campo externo é dada por (2.74)

$$\rho = \frac{i\hbar e}{2mc^2} \psi^* \overleftrightarrow{\partial}_t \psi - \frac{eV_t}{mc^2} \psi^* \psi. \quad (3.106)$$

Substituindo (3.91) e (3.105) em (3.106) obtemos

$$\rho = \frac{M}{m} e \bar{\Psi} \Psi. \quad (3.107)$$

Da mesma forma, a densidade de corrente de carga na presença de potenciais externos é dada por (2.75)

$$\mathbf{j} = \frac{e\hbar}{2mi} \psi^* \overleftrightarrow{\nabla} \psi - \frac{e\mathbf{V}_e}{mc} \psi^* \psi, \quad (3.108)$$

substituindo (3.91) em (3.108) obtemos

$$\mathbf{j} = \frac{e\hbar}{2mi} \bar{\Psi} \hat{\alpha} \overleftrightarrow{\nabla} \Psi - \frac{e\mathbf{V}_e}{mc} \bar{\Psi} \hat{\alpha} \Psi. \quad (3.109)$$

Será muito útil na seção posterior notar que

$$\rho^* = \left(\frac{M}{m} e \bar{\Psi} \Psi \right)^* = e \frac{M}{m} (|\varphi|^2 - |\chi|^2)^* = \rho, \quad (3.110)$$

ou seja, ρ é real e

$$\mathbf{j}^* = \left(\frac{e\hbar}{2mi} \psi^* \overleftrightarrow{\nabla} \psi - \frac{e\mathbf{V}_e}{mc} \psi^* \psi \right)^* = \frac{e\hbar}{2mi} \psi \overleftrightarrow{\nabla} \psi^* - \frac{e\mathbf{V}_e}{mc} \psi \psi^* = \mathbf{j}, \quad (3.111)$$

também.

3.6 Conjugação de carga

Comparando (3.44) com (3.45), podemos escrever a relação

$$\Psi_{(-\mathbf{p},-)} = \begin{pmatrix} \varphi_{(-\mathbf{p},-)} \\ \chi_{(-\mathbf{p},-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi_{(\mathbf{p},+)}^* \\ \varphi_{(\mathbf{p},+)}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_{(\mathbf{p},+)} \\ \chi_{(\mathbf{p},+)} \end{pmatrix}^* = \hat{\tau}_1 \Psi_{(\mathbf{p},+)}^*. \quad (3.112)$$

Isto pode ser interpretado da seguinte maneira: Se o estado

$$\Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \quad (3.113)$$

representa uma partícula de carga e , fator evolução temporal E e momento \mathbf{p} , então o estado

$$\Psi_c = \hat{\tau}_1 \Psi^* \quad (3.114)$$

descreve uma partícula de carga $-e$, fator evolução temporal $-E$ e momento $-\mathbf{p}$. Chamamos Ψ_c de estado conjugado de carga de Ψ . Logicamente Ψ é o estado conjugado de carga de Ψ_c e obedece

$$(\Psi_c)_c = \hat{\tau}_1 \Psi_c^* = \hat{\tau}_1 (\hat{\tau}_1 \Psi^*)^* = \Psi. \quad (3.115)$$

A transformação $\Psi \rightarrow \Psi_c$ é acompanhada pelas transformações

$$\varphi_0 \rightarrow \chi_0, \quad \chi_0 \rightarrow \varphi_0, \quad \mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}, \quad E \rightarrow -E. \quad (3.116)$$

Se chamamos (arbitrariamente) os objetos descritos por Ψ como *partículas*, então os objetos correspondentes à função conjugado de carga Ψ_c são chamados *antipartículas*. Se uma partícula é idêntica a sua antipartícula, esta é chamada *partícula neutra*. Partículas e antipartículas podem diferir não só no sinal da carga, mas também em outras propriedades, como por exemplo o momento magnético. Partículas que não têm carga elétrica não são sempre *verdadeiramente neutras*. Por exemplo, o méson π^0 e o fóton são partículas verdadeiramente neutras, mas não os mésons K^0 e \bar{K}^0 que diferem pela estranheza. As funções de ondas de partículas verdadeiramente neutras devem satisfazer a equação

$$\Psi_c = \hat{\tau}_1 \Psi^* = \alpha \Psi, \quad \text{com } |\alpha| = 1$$

uma dupla aplicação da conjugação de carga nos dá o mesmo estado e ficamos com $\alpha^2 = 1$, ou $\alpha = \pm 1$. Existem duas possibilidades de partículas neutras: partículas neutras com *paridade de carga positiva* (com $\alpha = 1$) e partículas neutras com *paridade de carga negativa* (com $\alpha = -1$).

A equação de movimento para uma partícula sujeita a um campo vetorial e escalar externo é dada por

$$(i\hbar\partial_t - eA_0) \Psi = \left[\frac{(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2}{2M} (\hat{\tau}_3 + i\hat{\tau}_2) + Mc^2\hat{\tau}_3 \right] \Psi \quad (3.117)$$

e a equação de movimento para uma partícula descrita por Ψ_c deve ser

$$(i\hbar\partial_t + eA_0) \Psi_c = \left[\frac{(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A})^2}{2M} (\hat{\tau}_3 + i\hat{\tau}_2) + Mc^2\hat{\tau}_3 \right] \Psi_c, \quad (3.118)$$

com a carga de sinal contrário. Pegando o complexo conjugado da equação (3.117) e multiplicando-a por $-\hat{\tau}_1$ pela esquerda encontramos a equação de movimento (3.118) pois

$\hat{\tau}_1(\hat{\tau}_3 + i\hat{\tau}_2) = -(\hat{\tau}_3 + i\hat{\tau}_2)\hat{\tau}_1$ e $\hat{\tau}_1\hat{\tau}_3 = -\hat{\tau}_3\hat{\tau}_1$. Perceba que Ψ_c satisfaz a mesma equação que Ψ exceto pela troca nos sinais de V_t e \mathbf{V}_e , logo, para encontrar (3.118) podemos usar a prescrição

$$\bar{\Psi} \rightarrow \bar{\Psi}_c \text{ e } V^\mu \rightarrow -V^\mu \quad (3.119)$$

em (3.117) assim como acontece em Klein-Gordon⁴. Da mesma maneira, se a densidade de corrente ρ e a densidade de corrente de carga \mathbf{j} são dados por

$$\rho = e \frac{M}{m} \bar{\Psi} \Psi, \quad (3.120)$$

$$\mathbf{j} = \frac{e\hbar}{2mi} \bar{\Psi} \hat{\alpha} \overleftrightarrow{\nabla} \Psi - \frac{e\mathbf{V}_e}{mc} \bar{\Psi} \hat{\alpha} \Psi, \quad (3.121)$$

usando a prescrição (3.119) em (3.120) e (3.121) encontramos

$$\rho_c = e \frac{M}{m} \bar{\Psi}_c \Psi_c, \quad (3.122)$$

$$\mathbf{j}_c = \frac{e\hbar}{2mi} \bar{\Psi}_c \hat{\alpha} \overleftrightarrow{\nabla} \Psi_c + \frac{e\mathbf{V}_e}{mc} \bar{\Psi}_c \hat{\alpha} \Psi_c. \quad (3.123)$$

Uma outra maneira de se obter essas relações é encontrada no apêndice 6.6. Como já vimos, sob conjugação de carga $\rho \rightarrow \rho_c = -\rho$ e $\mathbf{j} \rightarrow \mathbf{j}_c = -\mathbf{j}$ na teoria de Klein-Gordon, logicamente devemos encontrar esse mesmo resultado aqui, visto que ρ e \mathbf{j} são os mesmos de Klein-Gordon. Para isso, serão úteis as seguintes verificações

$$\Psi_c = \hat{\tau}_1 \Psi^*, \quad \bar{\Psi} = \Psi^\dagger \hat{\tau}_3 \quad (3.124)$$

$$\bar{\Psi}_c = \Psi_c^\dagger \hat{\tau}_3 = (\hat{\tau}_1 \Psi^*)^\dagger \hat{\tau}_3 = -(\Psi^*)^\dagger \hat{\tau}_3 \hat{\tau}_1 = -\bar{\Psi}^* \hat{\tau}_1 \quad (3.125)$$

$$\hat{\tau}_1 \hat{\alpha} \hat{\tau}_1 = -\hat{\alpha}, \quad \bar{\Psi}_c \hat{\alpha} \Psi_c = (\bar{\Psi} \hat{\alpha} \Psi)^*. \quad (3.126)$$

Dessa forma, ficamos com

$$\rho_c = e \frac{M}{m} \bar{\Psi}_c \Psi_c = -e \frac{M}{m} \bar{\Psi}^* \Psi^* = -\rho^* = -\rho \quad (3.127)$$

onde usamos (3.110). Analogamente

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_c &= \frac{e\hbar}{2mi} \left\{ (\bar{\Psi}_c \hat{\alpha} \overleftrightarrow{\nabla} \Psi_c)^* - \left[(\overleftrightarrow{\nabla} \bar{\Psi}) \hat{\alpha} \Psi \right]^* \right\} + \frac{e\mathbf{V}_e}{mc} (\bar{\Psi}_c \hat{\alpha} \Psi_c)^* \\ &= \left(-\frac{e\hbar}{2mi} \bar{\Psi} \hat{\alpha} \overleftrightarrow{\nabla} \Psi + \frac{e\mathbf{V}_e}{mc} \bar{\Psi} \hat{\alpha} \Psi \right)^* = -\mathbf{j}^* = -\mathbf{j} \end{aligned} \quad (3.128)$$

onde usamos (3.111). Apesar desse resultado, os autores das referências⁵ [2], [10]-[12] e [16] por exemplo, afirmam erradamente que $\mathbf{j}_c = \mathbf{j}$ porque Ψ_c difere de Ψ por uma mudança no sinal da carga ($e \rightarrow -e$) e uma mudança no sentido do vetor momento ($\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$). É verdade que sob a conjugação de carga, o momento troca de sentido, porém a relação

$$\mathbf{j} = \rho \mathbf{v}, \quad \mathbf{j}_c = \rho_c \mathbf{v}_c, \quad (3.129)$$

⁴Ver equações (2.76) e (2.77)

⁵Nos trabalhos citados os autores tratam apenas do acoplamento vetorial. No nosso trabalho podemos fazer $V_s = 0$ para obter apenas o acoplamento vetorial nas equações.

depende diretamente da velocidade de grupo \mathbf{v} da partícula, e não do momento. Como veremos no último capítulo, essa velocidade não muda sob conjugação de carga, isto é, uma antipartícula move-se em sentido contrário ao seu momento, em outras palavras, se uma partícula têm um momento \mathbf{p} e velocidade \mathbf{v} , sob conjugação de carga a antipartícula terá um momento $\mathbf{p}_c = -\mathbf{p}$ e velocidade $\mathbf{v}_c = \mathbf{v}$. Isso faz com que a corrente troque de sinal sob conjugação de carga. Além disso, a equação da continuidade deve ser satisfeita para partículas e antipartículas

$$\partial_t \rho + \vec{\nabla} \cdot \mathbf{j} = 0,$$

se $\rho \rightarrow \rho_c = -\rho$ sob conjugação de carga, devemos ter que $\mathbf{j} \rightarrow \mathbf{j}_c = -\mathbf{j}$ para que a equação continue válida.

Capítulo 4

A representação de Feshbach-Villars

É bem conhecido que a equação de Klein-Gordon apresenta propriedades peculiares. Por exemplo, para uma partícula de spin zero os autovalores do operador velocidade são nulos¹, enquanto que os autovalores do quadrado do operador velocidade podem ser nulos ou negativos. Para resolver esse e outros problemas é mais conveniente tratar a equação de onda em uma representação na qual o operador hamiltoniano para uma partícula livre é diagonal. Nesse capítulo apresentaremos uma representação na qual isso ocorre, essa representação é conhecida como representação de Feshbach-Villars ou ainda, representação Φ . Vimos no capítulo 3 que estados de carga com sinal bem definidos são descritos por dois componentes φ e χ satisfazendo as equações de (3.11) para a partícula livre, que são de primeira ordem na derivada temporal. Numa aproximação não-relativística, para cada estado de carga, um desses componentes é apreciavelmente maior do que o outro como pode-se ver nas equações (3.86) e (3.87) e a função de onda reduz-se aproximadamente para um único componente. Poderíamos pensar em uma representação onde a função de onda tivesse a mesma forma que as relações (3.86) e (3.87) ainda que fora do limite não-relativístico. Seguindo esse modelo as funções seriam da forma (normalização na caixa)

$$\begin{aligned}\Phi_{(\mathbf{p},+)} &= \frac{1}{\sqrt{L^3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \varepsilon_p t) \right], \\ \Phi_{(\mathbf{p},-)} &= \frac{1}{\sqrt{L^3}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} + \varepsilon_p t) \right].\end{aligned}\tag{4.1}$$

É muito útil escrever as duas funções de (4.1) em uma única forma

$$\Phi_{(\mathbf{p},\lambda)} = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \begin{pmatrix} \frac{1+\lambda}{2} \\ \frac{1-\lambda}{2} \end{pmatrix} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \lambda \varepsilon_p t) \right], \quad \lambda = \pm 1.\tag{4.2}$$

Utilizando essa notação escrevemos os vetores (3.44) e (3.45) como

$$\Psi_{(\mathbf{p},\lambda)} = \frac{1}{\sqrt{4L^3 m c^2 \varepsilon_p}} \begin{pmatrix} m c^2 + \lambda \varepsilon_p \\ m c^2 - \lambda \varepsilon_p \end{pmatrix} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \lambda \varepsilon_p t) \right]\tag{4.3}$$

e relacionamos com (4.2), para achar uma matriz de transformação que possa levar uma representação na outra, ou seja uma transformação de similaridade. A transformação é

¹Vide capítulo 5.

do tipo

$$\Phi_{(\mathbf{p},\lambda)} = \hat{U}\Psi_{(\mathbf{p},\lambda)} \quad (4.4)$$

onde \hat{U} obrigatoriamente deve ser uma matriz 2×2

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

Substituindo (4.2) e (4.3) em (4.4) chegamos ao sistema

$$\begin{aligned} \frac{1+\lambda}{2}\sqrt{4mc^2\varepsilon_p} &= A(mc^2 + \lambda\varepsilon_p) + B(mc^2 - \lambda\varepsilon_p) \\ \frac{1-\lambda}{2}\sqrt{4mc^2\varepsilon_p} &= C(mc^2 + \lambda\varepsilon_p) + D(mc^2 - \lambda\varepsilon_p), \end{aligned} \quad (4.6)$$

com 4 equações e 4 incógnitas. Resolvendo o sistema acima encontramos para \hat{U}

$$\hat{U} = \frac{1}{\sqrt{4mc^2\varepsilon_p}} \begin{pmatrix} \varepsilon_p + mc^2 & \varepsilon_p - mc^2 \\ \varepsilon_p - mc^2 & \varepsilon_p + mc^2 \end{pmatrix}, \quad (4.7)$$

ou ainda

$$\hat{U} = \frac{\hat{1}(\varepsilon_p + mc^2) + \hat{\tau}_1(\varepsilon_p - mc^2)}{\sqrt{4mc^2\varepsilon_p}}. \quad (4.8)$$

Pode-se perceber, pelo mesmo procedimento que a transformação inversa

$$\Psi_{(\mathbf{p},\lambda)} = \hat{U}^{-1}\Phi_{(\mathbf{p},\lambda)}, \quad (4.9)$$

nos leva a seguinte forma para \hat{U}^{-1}

$$\hat{U}^{-1} = \hat{\tau}_3\hat{U}^\dagger\hat{\tau}_3 = \frac{\hat{1}(\varepsilon_p + mc^2) - \hat{\tau}_1(\varepsilon_p - mc^2)}{\sqrt{4mc^2\varepsilon_p}}, \quad (4.10)$$

mostrando que a matriz \hat{U} não é unitária no sentido usual, pois $\hat{U}^\dagger \neq \hat{U}^{-1}$. No entanto, mostraremos logo mais, que a matriz \hat{U} é unitária generalizada. A transformação das funções

$$\Phi = \hat{U}\Psi \quad \text{e} \quad \Phi^\dagger = \Psi^\dagger\hat{U}^\dagger, \quad (4.11)$$

mantém a ortonormalização invariante, isto é,

$$\langle \Psi_{(\mathbf{p}',\lambda')} | \Psi_{(\mathbf{p},\lambda)} \rangle = \langle \Phi_{(\mathbf{p}',\lambda')} | \Phi_{(\mathbf{p},\lambda)} \rangle = \lambda\delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}, \quad (4.12)$$

onde usamos (4.10)

$$\left(\hat{U}^{-1}\right)^\dagger \hat{\tau}_3 \hat{U}^{-1} = \left(\hat{\tau}_3 \hat{U}^\dagger \hat{\tau}_3\right)^\dagger \hat{\tau}_3 \hat{U}^{-1} = \hat{\tau}_3 \hat{U} \hat{\tau}_3 \hat{\tau}_3 \hat{U}^{-1} = \hat{\tau}_3 \quad (4.13)$$

e ainda

$$\bar{\Psi} = \Psi^\dagger \hat{\tau}_3, \quad \bar{\Phi} = \Phi^\dagger \hat{\tau}_3. \quad (4.14)$$

Como $\rho = e\bar{\Psi}\Psi = e\bar{\Phi}\Phi$, a carga da partícula para cada um dos estados é dada por

$$Q = e\langle \Phi_{(\mathbf{p},\lambda)} | \Phi_{(\mathbf{p},\lambda)} \rangle = \lambda e, \quad (4.15)$$

onde usamos (4.12). A solução geral é uma mistura de ambos os estados, ou seja

$$\Phi = \sum_{\mathbf{p}, \lambda} a_{(\mathbf{p}, \lambda)} \Phi_{(\mathbf{p}, \lambda)} = \sum_{\mathbf{p}} (a_{(\mathbf{p}, +1)} \Phi_{(\mathbf{p}, +1)} + a_{(\mathbf{p}, -1)} \Phi_{(\mathbf{p}, -1)}), \quad (4.16)$$

onde os coeficientes da expansão são dados por

$$a_{(\mathbf{p}, \lambda)} = \lambda \langle \Phi_{(\mathbf{p}, \lambda)} | \Phi \rangle. \quad (4.17)$$

Dessa forma temos que

$$\begin{aligned} \langle \Phi | \Phi \rangle &= \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \lambda, \lambda'} a_{(\mathbf{p}', \lambda')}^* a_{(\mathbf{p}, \lambda)} \langle \Phi_{(\mathbf{p}', \lambda')} | \Phi_{(\mathbf{p}, \lambda)} \rangle \\ &= \sum_{\mathbf{p}} (|a_{(\mathbf{p}, +1)}|^2 - |a_{(\mathbf{p}, -1)}|^2). \end{aligned} \quad (4.18)$$

Definindo

$$N_{\pm} = \sum_{\mathbf{p}} |a_{(\mathbf{p}, \pm 1)}|^2, \quad (4.19)$$

encontramos para a carga total

$$Q = e \langle \Phi | \Phi \rangle = Ne, \quad (4.20)$$

onde

$$N = N_+ - N_- = \sum_{\mathbf{p}} (|a_{(\mathbf{p}, +1)}|^2 - |a_{(\mathbf{p}, -1)}|^2) = \begin{cases} \pm 1 \\ 0 \end{cases}. \quad (4.21)$$

Aqui $\sum_{\mathbf{p}} |a_{(\mathbf{p}, +1)}|^2$ nos dá a quantidade relativa de carga $+e$ que é distribuída espacialmente de acordo com o autoestado $\Phi_{(\mathbf{p}, +1)}$, enquanto $\sum_{\mathbf{p}} |a_{(\mathbf{p}, -1)}|^2$ nos dá a quantidade relativa de carga $-e$ distribuída espacialmente de acordo com o estado $\Phi_{(\mathbf{p}, -1)}$. A quantidade total de carga é $\pm e$.

4.1 Unitariedade, valor esperado e lei de transformação de operadores

Chamamos o operador \hat{A} de unitário Φ se ele deixa o produto Φ invariante, isto é, se satisfaz a equação

$$\langle \Psi | \Psi' \rangle = \langle \hat{A} \Phi | \hat{A} \Phi' \rangle = \langle \Phi | \Phi' \rangle, \quad (4.22)$$

assim, um operador \hat{A} unitário Φ satisfaz

$$\hat{\tau}_3 \hat{A}^\dagger \hat{\tau}_3 = \hat{A}^{-1} \equiv \hat{A}^\ddagger, \quad (4.23)$$

visto que $\int \Psi^\dagger \hat{\tau}_3 \Psi' d^3r = \int \Phi^\dagger \hat{A}^\dagger \hat{\tau}_3 \hat{A} \Phi' d^3r$ e assim, $\hat{A}^\dagger \hat{\tau}_3 \hat{A} = \hat{\tau}_3$ ou, $\hat{\tau}_3 \hat{A}^\dagger \hat{\tau}_3 = \hat{A}^{-1}$. Se um operador \hat{A} é unitário Φ ($\hat{A}^\ddagger = \hat{A}^{-1}$) e comuta com $\hat{\tau}_3$, então ele também é unitário no sentido usual.

A definição do produto escalar generalizado expressa por (3.33), necessariamente leva à uma lei de transformação para os operadores $\hat{\mathcal{O}}$ quando ocorre a transformação das funções de acordo com (4.11). Calculamos

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle = \frac{\langle \Psi | \hat{\mathcal{O}} \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{\langle \Phi | \hat{\mathcal{O}}_{\Phi} \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle}, \quad (4.24)$$

onde usamos as propriedades $\Psi = \hat{U}^{-1}\Phi$, $(\hat{U}^{-1})^{\dagger} \hat{\tau}_3 = \hat{\tau}_3 \hat{U}$ e definimos

$$\hat{\mathcal{O}}_{\Phi} \equiv \hat{U} \hat{\mathcal{O}} \hat{U}^{-1}. \quad (4.25)$$

Assim, a relação (4.24) implica na lei de transformações de operadores (4.25). Como um outro exemplo de que a norma deve ser considerada na definição do valor esperado, temos que no formalismo de Feshbach e Villars, existe a seguinte definição² para o operador carga

$$\hat{Q}_{\Phi} = e \hat{\tau}_3, \quad (4.26)$$

de tal forma que

$$\hat{Q}_{\Phi} \Phi_{(\mathbf{p}, \pm)} = e \hat{\tau}_3 \Phi_{(\mathbf{p}, \pm)} = \pm e \Phi_{(\mathbf{p}, \pm)}. \quad (4.27)$$

Se calcularmos o valor esperado desse operador de acordo com (3.59) teremos

$$\left\langle \hat{Q}_{\Phi} \right\rangle_{\pm} = \langle \Phi_{(\mathbf{p}, \pm)} | \hat{Q}_{\Phi} \Phi_{(\mathbf{p}, \pm)} \rangle = \pm e \langle \Phi_{(\mathbf{p}, \pm)} | \Phi_{(\mathbf{p}, \pm)} \rangle = e \quad (4.28)$$

tanto para partícula como para a antipartícula. De acordo com a nossa definição (3.63) temos

$$\left\langle \hat{Q}_{\Phi} \right\rangle_{\pm} = \frac{\langle \Phi_{(\mathbf{p}, \pm)} | \hat{Q}_{\Phi} \Phi_{(\mathbf{p}, \pm)} \rangle}{\langle \Phi_{(\mathbf{p}, \pm)} | \Phi_{(\mathbf{p}, \pm)} \rangle} = \pm e, \quad (4.29)$$

ou seja, com valor esperado do operador carga igual a $+e$ para partícula e $-e$ para a antipartícula.

4.2 A hamiltoniana na representação Feshbach-Villars

Segundo a transformação (4.25) da seção anterior, a hamiltoniana nesse formalismo é dada por

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\Phi} &= \hat{U} \hat{H}^0 \hat{U}^{-1} = \left[\frac{\hat{1} (\varepsilon_p + mc^2) + \hat{\tau}_1 (\varepsilon_p - mc^2)}{\sqrt{4mc^2 \varepsilon_p}} \right] \\ &\times \left[(\hat{\tau}_3 + i \hat{\tau}_2) \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{\tau}_3 mc^2 \right] \left[\frac{\hat{1} (\varepsilon_p + mc^2) - \hat{\tau}_1 (\varepsilon_p - mc^2)}{\sqrt{4mc^2 \varepsilon_p}} \right]. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Para facilitar os cálculos usamos $\hat{a} = \hat{\tau}_3 + i \hat{\tau}_2$ e definimos

$$a_+ = mc^2 + \varepsilon_p, \quad a_- = mc^2 - \varepsilon_p, \quad a = mc^2, \quad (4.31)$$

e assim (4.30) torna-se

$$\hat{H}_{\Phi} = \frac{\hat{1} a_+ - \hat{\tau}_1 a_-}{\sqrt{4a \varepsilon_p}} \left(\hat{a} \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{\tau}_3 a \right) \frac{\hat{1} a_+ + \hat{\tau}_1 a_-}{\sqrt{4a \varepsilon_p}}. \quad (4.32)$$

²Veja referência [9].

Fazendo as multiplicações, chega-se facilmente em

$$\hat{H}_\Phi = \frac{1}{4a\varepsilon_p} \left[\hat{\alpha} (a_+ + a_-)^2 \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + a\hat{\tau}_3 (a_+^2 + a_-^2) + 2iaa_+a_-\hat{\tau}_2 \right], \quad (4.33)$$

observando que

$$(a_+ + a_-)^2 = (2a)^2, \quad (a_+^2 + a_-^2) = 2(a^2 + \varepsilon_p^2), \quad a_+a_- = a^2 - \varepsilon_p^2 \quad (4.34)$$

encontra-se

$$\begin{aligned} \hat{H}_\Phi &= \frac{1}{4a\varepsilon_p} \left[(\hat{\tau}_3 + i\hat{\tau}_2) (2a)^2 \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + 2a\hat{\tau}_3 (a^2 + \varepsilon_p^2) + 2ia (a^2 - \varepsilon_p^2) \hat{\tau}_2 \right] \\ &= \frac{1}{2\varepsilon_p} \left[\hat{\tau}_3 \left(\frac{a}{m} \hat{\mathbf{p}}^2 + a^2 + \varepsilon_p^2 \right) + i\hat{\tau}_2 \left(\frac{a}{m} \hat{\mathbf{p}}^2 + a^2 - \varepsilon_p^2 \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.35)$$

Como $\Phi_{(\mathbf{p},\lambda)}$ são autofunções do operador momento, temos

$$\hat{\mathbf{p}}\Phi_{(\mathbf{p},\lambda)} = \mathbf{p}\Phi_{(\mathbf{p},\lambda)} \quad (4.36)$$

e dessa forma

$$\hat{H}_\Phi\Phi_{(\mathbf{p},\lambda)} = \frac{1}{2\varepsilon_p} \left[\hat{\tau}_3 \left(\frac{a}{m} \mathbf{p}^2 + a^2 + \varepsilon_p^2 \right) + i\hat{\tau}_2 \left(\frac{a}{m} \mathbf{p}^2 + a^2 - \varepsilon_p^2 \right) \right] \Phi_{(\mathbf{p},\lambda)}, \quad (4.37)$$

substituindo $a = mc^2$ e usando $\varepsilon_p^2 = c^2\mathbf{p}^2 + m^2c^4$ obtemos finalmente

$$\hat{H}_\Phi\Phi = \hat{\tau}_3\varepsilon_p\Phi. \quad (4.38)$$

A equação de Klein-Gordon para uma partícula livre no formalismo de Schrödinger é dada por

$$i\hbar\partial_t\Psi = \hat{H}^0\Psi, \quad (4.39)$$

aplicando o operador \hat{U} pela esquerda temos

$$i\hbar\partial_t\hat{U}\Psi = \hat{U}\hat{H}^0\hat{U}^{-1}\hat{U}\Psi, \quad (4.40)$$

usando (4.11) e (4.30)

$$i\hbar\partial_t\Phi = \hat{H}_\Phi\Phi = \hat{\tau}_3\varepsilon_p\Phi, \quad (4.41)$$

obtemos a equação de Klein-Gordon para a partícula livre no formalismo Feshbach-Villars.

4.3 Densidade de carga-corrente

Veremos agora, como se transformam as quatidades ρ , \mathbf{j} no formalismo Feshbach-Villars. A densidade de carga dada por (3.21)

$$\rho = e\bar{\Psi}\Psi \quad (4.42)$$

é escrita na representação Φ como

$$\rho = e\bar{\Psi}\hat{U}^{-1}\hat{U}\Psi = e\Psi^\dagger\hat{\tau}_3\hat{U}^{-1}\Phi = e\Psi^\dagger\hat{U}^\dagger\hat{\tau}_3\Phi = e\bar{\Phi}\Phi, \quad (4.43)$$

onde usamos (4.10), assim

$$\rho = e\bar{\Psi}\Psi = e\bar{\Phi}\Phi. \quad (4.44)$$

Para a densidade de corrente de carga (3.24)

$$\mathbf{j} = \frac{e\hbar}{2mi}\bar{\Psi}\hat{\alpha}\overleftrightarrow{\nabla}\Psi, \quad (4.45)$$

os cálculos são um pouco mais trabalhosos. Vamos começar notando que

$$\begin{aligned} \bar{\Psi}\hat{\alpha}\Psi &= \Psi^\dagger\hat{\tau}_3(\hat{\tau}_3 + i\hat{\tau}_2)\Psi = \Psi^\dagger(\hat{1} + \hat{\tau}_1)\Psi \\ &= \Phi^\dagger(\hat{U}^{-1})^\dagger(\hat{1} + \hat{\tau}_1)\hat{U}^{-1}\Phi = \Phi^\dagger(\hat{1} + \hat{\tau}_1)(\hat{U}^{-1})^2\Phi, \end{aligned} \quad (4.46)$$

pois $(\hat{U}^{-1})^\dagger = \hat{U}^{-1}$ e $[\hat{U}^{-1}, \hat{\tau}_1] = 0$. Agora, observe que

$$\begin{aligned} (\hat{1} + \hat{\tau}_1)(\hat{U}^{-1})^2 &= \frac{\hat{1} + \hat{\tau}_1}{4mc^2\varepsilon_p} [\hat{1}(mc^2 + \varepsilon_p) + \hat{\tau}_1(mc^2 - \varepsilon_p)]^2 \\ &= \frac{\hat{1} + \hat{\tau}_1}{4mc^2\varepsilon_p} [2(m^2c^4 + \varepsilon_p^2)\hat{1} + 2\hat{\tau}_1(m^2c^4 - \varepsilon_p^2)] \\ &= \frac{m^2c^4(\hat{1} + \hat{\tau}_1)^2 + \varepsilon_p^2(\hat{1} + \hat{\tau}_1)(\hat{1} - \hat{\tau}_1)}{2mc^2\varepsilon_p} \\ &= \frac{mc^2}{\varepsilon_p}(\hat{1} + \hat{\tau}_1). \end{aligned} \quad (4.47)$$

Substituimos (4.47) em (4.46) para obter

$$\bar{\Psi}\hat{\alpha}\Psi = \frac{mc^2}{\varepsilon_p}\bar{\Phi}\hat{\alpha}\Phi, \quad (4.48)$$

e pelos mesmos cálculos

$$\bar{\Psi}\hat{\alpha}\overleftrightarrow{\nabla}\Psi = \frac{mc^2}{\varepsilon_p}\bar{\Phi}\hat{\alpha}\overleftrightarrow{\nabla}\Phi, \quad (\overleftrightarrow{\nabla}\bar{\Psi})\hat{\alpha}\Psi = \frac{mc^2}{\varepsilon_p}(\overleftrightarrow{\nabla}\bar{\Phi})\hat{\alpha}\Phi. \quad (4.49)$$

Logo, a densidade de corrente de carga na representação Φ é dada por

$$\mathbf{j} = \frac{e\hbar c^2}{2i\varepsilon_p}\bar{\Phi}\hat{\alpha}\overleftrightarrow{\nabla}\Phi. \quad (4.50)$$

4.4 Velocidade de grupo e a densidade de corrente de carga

Na representação de Feshbach e Villars temos que

$$\rho = e\bar{\Phi}\Phi. \quad (4.51)$$

Podemos obter

$$\rho_c = e\bar{\Phi}_c\Phi_c \quad (4.52)$$

a partir de (3.122), onde $\Phi_c = \hat{\tau}_1 \Phi^*$ é o estado conjugado de carga de Φ . Da mesma forma, a densidade de corrente de carga é dada por

$$\mathbf{j} = \frac{e\hbar c^2}{2i\varepsilon_p} \overleftarrow{\nabla} \hat{\alpha} \Phi, \quad (4.53)$$

e pode-se obter

$$\mathbf{j}_c = \frac{e\hbar c^2}{2i\varepsilon_p} \overleftarrow{\nabla} \hat{\alpha} \Phi_c, \quad (4.54)$$

a partir de (3.123).

Já vimos em seções anteriores que sob conjugação de carga $\mathbf{j} \rightarrow \mathbf{j}_c = -\mathbf{j}$. Como dissemos, alguns autores advogam que $\mathbf{j} \rightarrow \mathbf{j}_c = \mathbf{j}$ já que sob conjugação de carga, muda-se a densidade de carga e também o momento da partícula. O que não foi levado em conta é que para a antipartícula, velocidade e momento têm sentidos contrários. Mostraremos isso pelo menos para o caso de partícula livre. Se escolhemos $\Phi = \Phi_{(\mathbf{p},+)}$, onde

$$\Phi_{(\mathbf{p},+)} = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \varepsilon_p t) \right] \quad (4.55)$$

é o estado que descreve a partícula, teremos $\Phi_c = \tau_1 \Phi^* = \Phi_{(-\mathbf{p},-)}$, onde

$$\Phi_{(-\mathbf{p},-)} = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \varepsilon_p t) \right], \quad (4.56)$$

é o estado que descreve a antipartícula. Agora, podemos encontrar explicitamente \mathbf{j} e \mathbf{j}_c . Substituindo (4.55) em (4.53) teremos

$$\mathbf{j} = \frac{e\hbar c^2}{2i\varepsilon_p} \overleftarrow{\nabla} \hat{\alpha} \Phi_{(\mathbf{p},+)}, \quad (4.57)$$

como

$$\vec{\nabla} \Phi_{(\mathbf{p},+)} = \frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \Phi_{(\mathbf{p},+)}, \quad \vec{\nabla} \overline{\Phi}_{(\mathbf{p},+)} = -\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \overline{\Phi}_{(\mathbf{p},+)} \quad (4.58)$$

ficamos com

$$\mathbf{j} = \frac{e}{L^3} \frac{c^2 \mathbf{p}}{\varepsilon_p} = \rho \mathbf{v} \quad (4.59)$$

onde $\rho = e/L^3$ é a densidade de carga da partícula e $\mathbf{v} = \frac{c^2 \mathbf{p}}{\varepsilon_p}$ é sua velocidade de grupo. Agora, substituindo (4.56) em (4.54) teremos

$$\mathbf{j}_c = \frac{e\hbar c^2}{2i\varepsilon_p} \overleftarrow{\nabla} \hat{\alpha} \Phi_{(-\mathbf{p},-)}, \quad (4.60)$$

como

$$\vec{\nabla} \Phi_{(-\mathbf{p},-)} = -\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \Phi_{(-\mathbf{p},-)}, \quad \vec{\nabla} \overline{\Phi}_{(-\mathbf{p},-)} = +\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \overline{\Phi}_{(-\mathbf{p},-)} \quad (4.61)$$

obtemos

$$\mathbf{j}_c = -\frac{e}{L^3} \frac{c^2 \mathbf{p}}{\varepsilon_p} = \rho_c \mathbf{v}_c \quad (4.62)$$

onde $\rho_c = -e/L^3$ é a densidade de carga da antipartícula e $\mathbf{v}_c = \frac{c^2 \mathbf{p}}{\varepsilon_p}$ é sua velocidade de grupo. Como vimos, sob conjugação de carga

$$\rho \rightarrow \rho_c = -\rho \quad \text{e} \quad \mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v}_c = \mathbf{v}. \quad (4.63)$$

A velocidade de grupo não muda sob conjugação de carga. A partícula tem um momento \mathbf{p} e velocidade

$$\mathbf{v} = \frac{c^2 \mathbf{p}}{\varepsilon_p}, \quad (4.64)$$

sob conjugação de carga, a antipartícula tem momento $\mathbf{p}_c = -\mathbf{p}$ e velocidade

$$\mathbf{v}_c = \frac{c^2 \mathbf{p}}{\varepsilon_p} = -\frac{c^2 \mathbf{p}_c}{\varepsilon_p}, \quad (4.65)$$

ou seja, a antipartícula move-se em sentido contrário ao seu momento $\mathbf{p}_c = -\mathbf{p}$.

4.5 Interação com um campo externo

Veremos agora como fica a equação de movimento para uma partícula sujeita a apenas um acoplamento vetorial na representação Feshbach-Villars. A equação de movimento

$$i\hbar \partial_t \Psi = \hat{H} \Psi, \quad (4.66)$$

com o operador hamiltoniano sendo

$$\hat{H} = \frac{\hat{\alpha}}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + mc^2 \hat{\tau}_3 + eA_0, \quad \hat{\alpha} = \hat{\tau}_3 + i\hat{\tau}_2. \quad (4.67)$$

Definimos

$$\begin{aligned} A_0(\mathbf{r}) &= \int a_0(\mathbf{q}) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} d^3 \mathbf{q}, \\ \mathbf{A}(\mathbf{r}) &= \int \mathbf{a}(\mathbf{q}) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} d^3 \mathbf{q}, \\ \mathbf{A}^2(\mathbf{r}) &= \int \mathbf{a}^2(\mathbf{q}) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} d^3 \mathbf{q}. \end{aligned} \quad (4.68)$$

A transição da representação das coordenadas para a representação dos momentos pode ser feita pela substituição

$$\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \mathbf{p}, \quad \hat{\mathbf{r}} \rightarrow i\hbar \vec{\nabla}_p. \quad (4.69)$$

Dessa forma, podemos escrever (4.66) como

$$i\hbar \partial_t \Psi(\mathbf{p}, t) = \left[\hat{H}^0 + eA_0(i\hbar \vec{\nabla}_p) - \frac{e\hat{\alpha}}{mc} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(i\hbar \vec{\nabla}_p) + \frac{e^2 \hat{\alpha}}{2mc^2} \mathbf{A}^2(i\hbar \vec{\nabla}_p) \right] \Psi(\mathbf{p}, t) \quad (4.70)$$

onde \hat{H}^0 é o hamiltoniano da partícula livre e

$$A_0(i\hbar \vec{\nabla}_p) = \int a_0(\mathbf{q}) e^{-\mathbf{q} \cdot \vec{\nabla}_p} d^3 \mathbf{q}. \quad (4.71)$$

Usando o fato que

$$e^{-\mathbf{q} \cdot \vec{\nabla}_p} \Psi(\mathbf{p}, t) = \Psi(\mathbf{p} - \mathbf{q}, t) \quad (4.72)$$

podemos mostrar o resultado da ação do operador (4.71) sobre a função $\Psi(\mathbf{p}, t)$ por meio da relação

$$\begin{aligned} A_0(i\hbar \vec{\nabla}_p) \Psi(\mathbf{p}, t) &= \int a_0(\mathbf{q}) e^{-\mathbf{q} \cdot \vec{\nabla}_p} \Psi(\mathbf{p}, t) d^3 \mathbf{q} \\ &= \int a_0(\mathbf{q}) \Psi(\mathbf{p} - \mathbf{q}, t) d^3 \mathbf{q} \\ &= \int a_0(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \Psi(\mathbf{q}, t) d^3 \mathbf{q}. \end{aligned} \quad (4.73)$$

Através da mesma transformação encontramos

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \left(i\hbar \vec{\nabla}_p \right) \Psi(\mathbf{p}, t) &= \int \mathbf{a}(\mathbf{q}) e^{-\mathbf{q} \cdot \vec{\nabla}_p} \Psi(\mathbf{p}, t) d^3 \mathbf{q} \\ &= \int \mathbf{a}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \Psi(\mathbf{q}, t) d^3 \mathbf{q} \end{aligned} \quad (4.74)$$

e ainda

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^2 \left(i\hbar \vec{\nabla}_p \right) \Psi(\mathbf{p}, t) &= \int \mathbf{a}^2(\mathbf{q}) e^{-\mathbf{q} \cdot \vec{\nabla}_p} \Psi(\mathbf{p}, t) d^3 \mathbf{q} \\ &= \int \mathbf{a}^2(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \Psi(\mathbf{q}, t) d^3 \mathbf{q}. \end{aligned} \quad (4.75)$$

Então a equação (4.70) torna-se

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \Psi(\mathbf{p}, t) &= \hat{H}^0 \Psi(\mathbf{p}, t) \\ &+ e \int \left[a_0(\mathbf{p} - \mathbf{q}) - \frac{\hat{\alpha}}{mc} \mathbf{p} \cdot \mathbf{a}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) + \frac{e\hat{\alpha}}{2mc^2} \mathbf{a}^2(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \right] \Psi(\mathbf{q}, t) d^3 \mathbf{q}. \end{aligned} \quad (4.76)$$

Multiplicando ambos os lados dessa equação pela esquerda por $\hat{U}(\mathbf{p})$ definido pela equação (4.79) e usando o fato que segue-se de $\vec{\nabla} \cdot \mathbf{A} = 0$ que $\mathbf{p} - \mathbf{q} \cdot \mathbf{a}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) = 0$ encontramos

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \Phi(\mathbf{p}, t) &= \hat{\tau}_3 \varepsilon_p \Phi(\mathbf{p}, t) \\ &+ \hat{U}(\mathbf{p}) e \int d^3 \mathbf{q} \left[a_0(\mathbf{p} - \mathbf{q}) - \frac{\hat{\alpha}}{mc} \mathbf{q} \cdot \mathbf{a}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \right. \\ &\left. + \frac{e\hat{\alpha}}{2mc^2} \mathbf{a}^2(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \right] \hat{U}^{-1}(\mathbf{q}) \Phi(\mathbf{q}, t) \end{aligned} \quad (4.77)$$

onde usamos as relações

$$\hat{U}(\mathbf{p}) \hat{H}^0 \hat{U}^{-1}(\mathbf{p}) = \hat{\tau}_3 \varepsilon_p, \quad \Phi(\mathbf{p}, t) = \hat{U}(\mathbf{p}) \Psi(\mathbf{p}, t). \quad (4.78)$$

Usando o fato que

$$\hat{U}(\mathbf{p}) = \frac{\hat{1}(\varepsilon_p + mc^2) + \hat{\tau}_1(\varepsilon_p - mc^2)}{2\sqrt{mc^2 \varepsilon_p}}, \quad (4.79)$$

$$\hat{U}^{-1}(\mathbf{q}) = \frac{\hat{1}(\varepsilon_q + mc^2) - \hat{\tau}_1(\varepsilon_q - mc^2)}{2\sqrt{mc^2 \varepsilon_q}}, \quad (4.80)$$

$$\hat{U}(\mathbf{p}) \hat{U}^{-1}(\mathbf{q}) = \frac{\hat{1}(\varepsilon_p + \varepsilon_q) + \hat{\tau}_1(\varepsilon_p - \varepsilon_q)}{2\sqrt{\varepsilon_p \varepsilon_q}}, \quad (4.81)$$

$$\begin{aligned} \hat{U}(\mathbf{p}) (\hat{\tau}_3 + i\hat{\tau}_2) \hat{U}^{-1}(\mathbf{q}) &= \hat{U}(\mathbf{p}) \hat{U}(\mathbf{q}) (\hat{\tau}_3 + i\hat{\tau}_2) \\ &= \frac{(\varepsilon_p \varepsilon_q + m^2 c^4) (\hat{\tau}_3 + i\hat{\tau}_2) + (\varepsilon_p \varepsilon_q - m^2 c^4) \hat{\tau}_1 (\hat{\tau}_3 + i\hat{\tau}_2)}{2mc^2 \sqrt{\varepsilon_p \varepsilon_q}} \\ &= \frac{mc^2}{\sqrt{\varepsilon_p \varepsilon_q}} (\hat{\tau}_3 + i\hat{\tau}_2) = \frac{mc^2}{\sqrt{\varepsilon_p \varepsilon_q}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4.82)$$

e ainda definindo

$$\Phi(\mathbf{p}, t) = \begin{pmatrix} w(\mathbf{p}, t) \\ v(\mathbf{p}, t) \end{pmatrix}, \quad (4.83)$$

encontramos um conjunto de equações para as funções $w(\mathbf{p}, t)$ e $v(\mathbf{p}, t)$:

$$\begin{aligned}
(i\hbar\partial_t - \varepsilon_p) w(\mathbf{p}, t) &= \frac{e}{2} \int \frac{a_0(\mathbf{p} - \mathbf{q})}{\sqrt{\varepsilon_p \varepsilon_q}} [(\varepsilon_p + \varepsilon_q) w(\mathbf{q}, t) + (\varepsilon_p - \varepsilon_q) v(\mathbf{q}, t)] d^3\mathbf{q} \\
&\quad - ec \int \frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}(\mathbf{p} - \mathbf{q})}{\sqrt{\varepsilon_p \varepsilon_q}} [w(\mathbf{q}, t) + v(\mathbf{q}, t)] d^3\mathbf{q} \\
&\quad + \frac{e^2}{2} \int \frac{\mathbf{a}^2(\mathbf{p} - \mathbf{q})}{\sqrt{\varepsilon_p \varepsilon_q}} [w(\mathbf{q}, t) + v(\mathbf{q}, t)] d^3\mathbf{q}
\end{aligned} \tag{4.84}$$

e

$$\begin{aligned}
(i\hbar\partial_t + \varepsilon_p) v(\mathbf{p}, t) &= \frac{e}{2} \int \frac{a_0(\mathbf{p} - \mathbf{q})}{\sqrt{\varepsilon_p \varepsilon_q}} [(\varepsilon_p + \varepsilon_q) v(\mathbf{q}, t) + (\varepsilon_p - \varepsilon_q) w(\mathbf{q}, t)] d^3\mathbf{q} \\
&\quad + ec \int \frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}(\mathbf{p} - \mathbf{q})}{\sqrt{\varepsilon_p \varepsilon_q}} [w(\mathbf{q}, t) + v(\mathbf{q}, t)] d^3\mathbf{q} \\
&\quad - \frac{e^2}{2} \int \frac{\mathbf{a}^2(\mathbf{p} - \mathbf{q})}{\sqrt{\varepsilon_p \varepsilon_q}} [w(\mathbf{q}, t) + v(\mathbf{q}, t)] d^3\mathbf{q}.
\end{aligned} \tag{4.85}$$

Para os estados estacionários escrevemos

$$\Phi(\mathbf{p}, t) = \begin{pmatrix} w(\mathbf{p}) \\ v(\mathbf{p}) \end{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}Et}, \tag{4.86}$$

e encontramos as equações

$$\begin{aligned}
(E - \varepsilon_p) w(\mathbf{p}) &= \frac{e}{2\sqrt{\varepsilon_p}} \int \{a_0(\mathbf{p} - \mathbf{q}) [(\varepsilon_p + \varepsilon_q) w(\mathbf{q}) + (\varepsilon_p - \varepsilon_q) v(\mathbf{q})] \\
&\quad - [2c(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}(\mathbf{p} - \mathbf{q})) - e\mathbf{a}^2(\mathbf{p} - \mathbf{q})] [w(\mathbf{q}) + v(\mathbf{q})]\} \frac{d^3\mathbf{q}}{\sqrt{\varepsilon_q}},
\end{aligned} \tag{4.87}$$

$$\begin{aligned}
(E + \varepsilon_p) v(\mathbf{p}) &= \frac{e}{2\sqrt{\varepsilon_p}} \int \{a_0(\mathbf{p} - \mathbf{q}) [(\varepsilon_p + \varepsilon_q) v(\mathbf{q}) + (\varepsilon_p - \varepsilon_q) w(\mathbf{q})] \\
&\quad + [2c(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}(\mathbf{p} - \mathbf{q})) - e\mathbf{a}^2(\mathbf{p} - \mathbf{q})] [w(\mathbf{q}) + v(\mathbf{q})]\} \frac{d^3\mathbf{q}}{\sqrt{\varepsilon_q}}.
\end{aligned} \tag{4.88}$$

Quando não existe um campo externo ($|\mathbf{A}| = A_0 = 0$) e o conjunto de equações (4.87) e (4.88) transforma-se em um conjunto de equações independentes. A solução desse conjunto corresponde a uma partícula com carga e e é da forma

$$\Phi_0(\mathbf{p}, t) = \begin{pmatrix} w(\mathbf{p}) \\ 0 \end{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_p t} \text{ ou } \Phi_0(\mathbf{p}, t) = \begin{pmatrix} 0 \\ v(\mathbf{p}) \end{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_p t}. \tag{4.89}$$

Capítulo 5

Interpretação dos operadores na MQR

Neste capítulo, veremos que a interpretação dos operadores de partícula única na mecânica quântica relativística nos traz problemas. Introduziremos então o conceito de *operadores de partícula única verdadeiros* e estudaremos as possibilidades de medidas dos autovalores desses operadores.

Vamos retomar a representação de Schrödinger da equação de Klein-Gordon para uma partícula livre,

$$i\hbar\partial_t\Psi = \hat{H}^0\Psi \quad (5.1)$$

com

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} \varphi(\mathbf{r}, t) \\ \chi(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} \quad (5.2)$$

e a hamiltoniana

$$\hat{H}^0 = (\hat{\tau}_3 + i\hat{\tau}_2) \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + mc^2\hat{\tau}_3. \quad (5.3)$$

A equação de movimento (5.1), nos possibilita conhecer o vetor coluna $\Psi(\mathbf{r}, t)$ em qualquer instante de tempo t , se conhecemos o vetor coluna em $t = 0$. Podemos escrever essa evolução do vetor coluna no tempo através da transformação

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{S}(t)\Psi(\mathbf{r}, 0), \quad (5.4)$$

onde o operador evolução temporal

$$\hat{S}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}^0t\right) = 1 + \left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}^0\right)t + \left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}^0\right)^2\frac{t^2}{2!} + \dots \quad (5.5)$$

é unitário Φ , isto é

$$\hat{S}^\dagger(t) = \hat{\tau}_3\hat{S}^\dagger(t)\hat{\tau}_3 = \hat{S}^{-1}(t) = \exp\left(+\frac{i}{\hbar}\hat{H}^0t\right). \quad (5.6)$$

Como na mecânica quântica não-relativística, a dependência temporal no caso relativístico não precisa ser expressada pelo vetor coluna $\Psi(\mathbf{r}, t)$ (*Schrödinger picture*) mas pode também ser incorporada nos operadores. Esse formalismo onde os operadores, e não os vetores, são dependentes do tempo, é conhecido como *Heisenberg picture*. A mudança do *Schrödinger picture* para o *Heisenberg picture* é feita pelas transformações

$$\Psi_H(\mathbf{r}) = \hat{S}^{-1}(t)\Psi(\mathbf{r}, t) \quad (5.7)$$

$$\hat{F}_H(t) = \hat{S}^{-1}(t) \hat{F}(0) \hat{S}(t) \quad (5.8)$$

de tal forma que teremos

$$\begin{aligned} \langle \Psi(\mathbf{r}, t) | \hat{F}(0) | \Psi'(\mathbf{r}, t) \rangle_{\Phi} &= \int d^3r \Psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\tau}_3 \hat{F}(0) \Psi'(\mathbf{r}, t) \\ &= \int d^3r \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}) \hat{S}^\dagger(t) \hat{\tau}_3 \hat{F}(0) \hat{S}(t) \Psi'_H(\mathbf{r}) \\ &= \int d^3r \Psi_H^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\tau}_3 \hat{S}^{-1}(t) \hat{F}(0) \hat{S}(t) \Psi'_H(\mathbf{r}) \\ &= \langle \Psi_H(\mathbf{r}) | \hat{F}_H(t) | \Psi'_H(\mathbf{r}) \rangle_{\Phi}. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Usamos (5.5) e (5.8) para escrever

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\hat{F}}{dt} &= i\hbar \frac{d}{dt} \left(e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \hat{F}(0) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \right) \\ &= i\hbar \left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \hat{F}(0) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} + e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \frac{d\hat{F}(0)}{dt} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} - e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \hat{F}(0) \frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^0 t} \right) \\ &= \left[\hat{F}(t), \hat{H}^0 \right], \end{aligned} \quad (5.10)$$

e em analogia com a mecânica quântica não-relativística podemos concluir que observáveis físicos F , cujos operadores correspondentes \hat{F} comutam com \hat{H}^0 , são constantes de movimento. Isso significa que os valores esperados desses operadores são constantes no tempo. Um dos postulados básicos da mecânica quântica não-relativística é que autovalores de um operador descrevem valores mensuráveis dos correspondentes observáveis clássicos (quantidades físicas) em um estado do sistema. Na mecânica quântica não-relativística sempre existe uma correspondência entre os operadores e as quantidades clássicas (valores mensuráveis). Nem sempre isso acontece na mecânica quântica relativística. Para mostrar isso, vejamos o exemplo do operador velocidade. De (5.3) e (5.10) encontramos

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}^0 \right] = (\hat{\tau}_3 + i\hat{\tau}_2) \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}, \quad (5.11)$$

visto que

$$\left[\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}^0 \right] = \frac{1}{2m} \left\{ [\hat{\mathbf{r}}, (\hat{\tau}_3 + i\hat{\tau}_2)] \hat{\mathbf{p}}^2 + (\hat{\tau}_3 + i\hat{\tau}_2) [\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}^2] \right\} + [\hat{\mathbf{r}}, \hat{\tau}_3] mc^2 \quad (5.12)$$

e $[\hat{\mathbf{r}}, \hat{\tau}_3 + i\hat{\tau}_2] = 0$, $[\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}^2] = 2i\hbar \hat{\mathbf{p}}$. Enquanto a velocidade relativística clássica é dada por

$$\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\mathbf{p}}{\gamma m} = \frac{c^2 \mathbf{p}}{\gamma mc^2} = \frac{c^2 \mathbf{p}}{\varepsilon_p} \quad (5.13)$$

onde

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (5.14)$$

denota a massa relativística da partícula, i.e.

$$\begin{aligned} \varepsilon_p &= \gamma mc^2 = \gamma mc^2 \sqrt{\frac{v^2}{c^2} + \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)} = \gamma \sqrt{m^2 c^2 v^2 + \frac{m^2 c^4}{\gamma^2}} \\ &= \sqrt{c^2 (\gamma m \mathbf{v})^2 + m^2 c^4} = \sqrt{c^2 \mathbf{p}^2 + m^2 c^4} \end{aligned} \quad (5.15)$$

é a energia total de uma partícula de massa de repouso m . Obviamente o lado direito de (5.13) e (5.11) são diferentes, além do mais, pode-se notar que os autovalores da matriz

$$\hat{\tau}_3 + i\hat{\tau}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} \quad (5.16)$$

são nulos. Repare que se $(\hat{\tau}_3 + i\hat{\tau}_2)\Psi = \lambda\Psi$, teremos,

$$\left[\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} - \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right] \Psi = \begin{pmatrix} 1-\lambda & 1 \\ -1 & -(1+\lambda) \end{pmatrix} \Psi = 0, \quad (5.17)$$

para que não existam soluções triviais exigimos que o determinante da matriz que atua em Ψ seja nulo

$$\begin{vmatrix} 1-\lambda & 1 \\ -1 & -(1+\lambda) \end{vmatrix} = 0 \implies \lambda = 0. \quad (5.18)$$

Dessa forma, isso também significa que os autovalores do operador velocidade (5.11) são nulos. Portanto, notamos novamente que numa teoria relativística, em geral, os autovalores (valores esperados) de um operador construído aceitavelmente não são os mesmos valores das quantidades clássicas correspondentes. Além disso, concluímos que nem todos os operadores de uma teoria não-relativística podem ser transferidos para uma teoria relativística de partícula única. A razão para isso é a restrição do conceito de partícula única. Na mecânica quântica relativística a consistência de uma descrição de partícula única é limitada. Isso pode ser especificado mais precisamente: de um ponto de vista matemático, a formulação de uma teoria relativística dentro de um conceito de partícula única, implica a condição que operadores válidos são somente aqueles que não misturam diferentes estados de carga. Tais operadores são chamados operadores *pares* ou operadores *verdadeiros*. Um operador geralmente pode ser separado em uma parte par e outra ímpar

$$\hat{F} = [\hat{F}] + \{\hat{F}\}. \quad (5.19)$$

Mais formalmente um operador $[\hat{F}]$ é chamado *par* ou operador de *partícula única verdadeiro*, se satisfaz

$$[\hat{F}] \Psi^{(+)} = \Psi'^{(+)}, \quad [\hat{F}] \Psi^{(-)} = \Psi'^{(-)} \quad (5.20)$$

onde $\Psi^{(\pm)}$ são funções com fator evolução temporal positivo (negativo). Analogamente um operador $\{\hat{F}\}$ é chamado *ímpar* se satisfaz as condições

$$\{\hat{F}\} \Psi^{(+)} = \Psi'^{(-)}, \quad \{\hat{F}\} \Psi^{(-)} = \Psi'^{(+)}. \quad (5.21)$$

Então a hamiltoniana da equação de Klein-Gordon para uma partícula livre, na representação de Schrödinger e o operador momento são operadores pares

$$\hat{H}^0 = [\hat{H}^0], \quad \hat{\mathbf{p}} = [\hat{\mathbf{p}}]. \quad (5.22)$$

A investigação de operadores pares e ímpares pode ser muito simplificada na representação Feshbach-Villars, especialmente se usarmos as autofunções no espaço dos momentos. Na representação Φ as funções de onda de dois estados de carga diferentes são dadas por

$$\begin{aligned} \Phi_{(\mathbf{p},+)} &= \frac{1}{\sqrt{L^3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \varepsilon_p t) \right] \\ \Phi_{(\mathbf{p},-)} &= \frac{1}{\sqrt{L^3}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} + \varepsilon_p t) \right]. \end{aligned} \quad (5.23)$$

Nesta representação um operador par (ímpar) é (anti) diagonal por causa dos vetores colunas $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ para os dois estados de carga, isto é, devido à (5.20), se o operador é par deve satisfazer

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A \\ C \end{pmatrix} = k \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B \\ D \end{pmatrix} = k' \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (5.24)$$

onde $k = A$, $k' = D$ e $C = B = 0$, ou seja, o operador par deve ser uma matriz diagonal. Pelo mesmo raciocínio, um operador ímpar deve satisfazer de acordo com (5.21)

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A \\ C \end{pmatrix} = k \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B \\ D \end{pmatrix} = k' \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.25)$$

e desta vez $k = C$, $k' = B$ e $A = D = 0$, ou seja, o operador ímpar deve ser uma matriz antidiagonal. Então, podemos deduzir que \hat{H}_Φ é um operador par pois

$$\hat{H}_\Phi = \hat{\tau}_3 \varepsilon_p = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \varepsilon_p = [\hat{H}_\Phi] \quad (5.26)$$

é diagonal. Para o operador momento na representação Φ teremos

$$\hat{\mathbf{p}}_\Phi = \hat{U} \hat{\mathbf{p}} \hat{U}^{-1} = \hat{\mathbf{p}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = [\hat{\mathbf{p}}], \quad (5.27)$$

lembre-se que no espaço dos momentos $\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{p}$. Como um operador par (ímpar) deve ser (anti)diagonal na representação Φ , então é fácil separar um operador \hat{F}_Φ em suas partes par e ímpar

$$\hat{F}_\Phi = \begin{pmatrix} \hat{F}_{11} & \hat{F}_{12} \\ \hat{F}_{21} & \hat{F}_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{F}_{11} & 0 \\ 0 & \hat{F}_{22} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \hat{F}_{12} \\ \hat{F}_{21} & 0 \end{pmatrix} = [\hat{F}_\Phi] + \{\hat{F}_\Phi\}. \quad (5.28)$$

Completado a introdução dos operadores pares e ímpares, agora aplicamos esse método para o operador $\hat{\mathbf{r}}$ que causou problemas em (5.11). No espaço dos momentos o operador $\hat{\mathbf{r}}$ é dado por

$$\hat{\mathbf{r}} = i\hbar \vec{\nabla}_p, \quad \vec{\nabla}_p = \left(\frac{\partial}{\partial p_x}, \frac{\partial}{\partial p_y}, \frac{\partial}{\partial p_z} \right) \quad (5.29)$$

que na representação Φ é dado por¹

$$\hat{\mathbf{r}}_\Phi = \hat{U} \left(i\hbar \vec{\nabla}_p \right) \hat{U}^{-1} = \hat{1} i\hbar \vec{\nabla}_p - \hat{\tau}_1 \frac{i\hbar \mathbf{p}}{2(\mathbf{p}^2 + m^2 c^2)}. \quad (5.30)$$

Visto que $\hat{\tau}_1$ é antidiagonal, o operador partícula única verdadeiro na representação Φ torna-se

$$[\hat{\mathbf{r}}_\Phi] = \hat{1} i\hbar \vec{\nabla}_p. \quad (5.31)$$

Claramente, este é o operador canônico conjugado do operador momento, visto que

$$[[\hat{\mathbf{r}}_\Phi]_i, [\hat{\mathbf{p}}_\Phi]_j] = i\hbar \left[\left(\vec{\nabla}_p \right)_i, p_j \right] = i\hbar \left[\frac{\partial}{\partial p_i}, p_j \right] = i\hbar \delta_{ij} \quad (5.32)$$

¹Vide apêndice 6.5

em comum acordo com a mecânica quântica. Com a ajuda do operador posição verdadeiro (5.30) e de (5.10) podemos calcular o operador velocidade verdadeiro

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{v}}_{\Phi} &= \frac{d}{dt} [\hat{\mathbf{r}}_{\Phi}] = \frac{1}{i\hbar} [\hat{1}i\hbar\vec{\nabla}_p, \hat{H}_{\Phi}] = [\hat{1}\vec{\nabla}_p, \hat{\tau}_3\varepsilon_p] \\ &= \hat{\tau}_3 [\vec{\nabla}_p, \sqrt{\mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4}] = \hat{\tau}_3\vec{\nabla}_p\sqrt{\mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4},\end{aligned}\quad (5.33)$$

como

$$\vec{\nabla}_p\sqrt{\mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4} = \frac{c^2\mathbf{p}}{\varepsilon_p},\quad (5.34)$$

temos finalmente

$$\hat{\mathbf{v}}_{\Phi} = \frac{d}{dt} [\hat{\mathbf{r}}_{\Phi}] = [\vec{\nabla}_p, \hat{H}_{\Phi}] = \hat{\tau}_3\frac{c^2\mathbf{p}}{\varepsilon_p},\quad (5.35)$$

com autovalores

$$\frac{c^2\mathbf{p}}{\varepsilon_p} \quad \text{e} \quad -\frac{c^2\mathbf{p}}{\varepsilon_p},\quad (5.36)$$

isto é

$$\hat{\mathbf{v}}_{\Phi}\Phi_{(\mathbf{p})}^{(\lambda)} = \hat{\tau}_3\frac{c^2\mathbf{p}}{\varepsilon_p}\Phi_{(\mathbf{p})}^{(\lambda)} = \lambda\frac{c^2\mathbf{p}}{\varepsilon_p}\Phi_{(\mathbf{p})}^{(\lambda)}.\quad (5.37)$$

Vamos calcular o valor esperado do operador velocidade no estado $|\Phi_{\lambda}\rangle$. Segundo (3.63) temos

$$\langle\hat{\mathbf{v}}_{\Phi}\rangle_{\lambda} = \frac{\langle\Phi_{\mathbf{p}\lambda}|\hat{\mathbf{v}}_{\Phi}\Phi_{\mathbf{p}\lambda}\rangle}{\langle\Phi_{\mathbf{p}\lambda}|\Phi_{\mathbf{p}\lambda}\rangle} = \lambda\frac{c^2\mathbf{p}}{\varepsilon_p}.$$

Para estados de carga $+e$, vale a mesma relação entre velocidade e momento que a da mecânica clássica relativística (5.13). Para estados de carga $-e$, isso é verdade somente para valores absolutos. Antipartículas com momento \mathbf{p} movem-se em sentido contrário à \mathbf{p} . Então, o operador $[\hat{\mathbf{r}}_{\Phi}]$ satisfaz um número de condições plausíveis e pode ser aceito como um operador partícula única verdadeiro.

Conclusões

O formalismo de Feshbach e Villars, propõe uma forma hamiltoniana para conhecida teoria de Klein-Gordon. A equação de Klein-Gordon, é uma equação de segunda ordem na derivada temporal, enquanto que o formalismo de Feshbach e Villars opera com uma equação de primeira ordem na derivada temporal, deixando assim a equação de movimento em uma forma semelhante ao formalismo não-relativístico de Schrödinger. Porém, a mudança para uma equação quântica relativística ganha novos graus de liberdade em comparação com uma equação não-relativística. Na teoria não-relativística existe somente um estado de partícula livre com um valor do momento bem definido. Na teoria relativística para partículas de spin nulo, existem três estados para um dado valor do momento, correspondentes aos três possíveis valores para a carga, a saber $\pm e$ e 0 . Não obstante, nos restringimos nesse trabalho, apenas a estados de carga correspondentes aos dois sinais de carga $\pm e$. Assim, os novos graus de liberdade estão conectados com a carga da partícula. Apesar de ser uma representação muito rica, o formalismo apresentado por Feshbach e Villars em [2] e em outros trabalhos como [3]-[4],[6]-[7],[10]-[12],[16],[19] e [20] apresenta alguns equívocos em sua estrutura, como por exemplo na normalização e na definição do valor esperado de um operador, tanto quanto no efeito da conjugação de carga sobre a densidade de carga e a densidade de corrente de carga. Segundo as referências [2]-[4],[6]-[7],[16],[19] e [20], a definição do valor esperado de um operador não consegue nem satisfazer o caso mais trivial que é o do operador identidade, isso se deve ao fato de que tanto no formalismo de primeira ordem de Feshbach-Villars como no formalismo de segunda ordem de Klein-Gordon a norma do estado pode assumir valores negativos, essa norma deve ser levada em conta na definição do valor esperado de um operador para que possamos encontrar os resultados consistentes. A conjugação de carga nas referências [2],[10]-[12] e [16] também apresenta problemas, visto que o resultado dessa operação para a densidade de carga e para a densidade de corrente de carga é tal que viola a equação da continuidade. Neste trabalho desenvolvemos os cálculos para a conjugação de carga e encontramos resultados diferentes dos apresentados nessas referências e mostramos que com os nossos não há nenhuma violação da equação da continuidade. Mostramos o jeito correto de se calcular o valor esperado de um operador e também aproveitamos para acrescentar o acoplamento escalar na representação de Feshbach-Villars, o qual não é conhecido na literatura desse formalismo.

Referências Bibliográficas

- [1] M. Taketani e S. Sakata, Proc. Phys. Math. Soc. Japan **22**, 757 (1940); N. Kemmer, Proc. Roy. Soc. (London) **A173**, 91 (1939); W. Heitler, Proc. Roy. Irish Acad. **49**, 1 (1943); K.M. Case, Phys. Rev. **95**, 1323 (1954).
- [2] H. Feshbach e F. Villars, Rev. Mod. Phys. **30**, 24 (1958).
- [3] E. Fischbach, M.M. Nieto e C.K. Scott, Prog. Theor. Phys. **48**, 574 (1972).
- [4] M.G. Fuda, Phys. Rev. C **21**, 1480 (1980).
- [5] M.G. Fuda, Phys. Rev. C **24**, 614 (1981).
- [6] M.G. Fuda e E. Furlani, Am. J. Phys. **50**, 545 (1982).
- [7] N.S. Witte, V. Kowalenko e K.C. Hines, Phys. Rev. D **38**, 3667 (1988).
- [8] M. Horbatsch e D.V. Shapoval, Phys. Rev. A **51**, 1804 (1995).
- [9] J.W. Darewych, Phys. Rev. D **56**, 8103 (1997).
- [10] M. Merad, L. Chetouani, A. Bounames, Phys. Lett. A **267**, 225 (2000).
- [11] A. Bounames e L. Chetouani, Phys. Lett. A **279**, 139 (2001).
- [12] K. Khounfais, T. Boudjedaa, L. Chetouani, Czech. J. Phys. **54**, 697 (2004).
- [13] A.Ya. Silenko, Theor. Math. Phys. **156**, 398 (2008).
- [14] P. Jizba e H. Kleinert, Phys. Rev. D **82**, 085016-1 (2010).
- [15] J.D. Bjorken e S.D. Drell, *Relativistic Quantum Mechanics* (Mcgraw-Hill Book Company, Nova Iorque, 1964).
- [16] A.S. Davydov, *Quantum Mechanics* (Pergamon Press, Nova Iorque, 1965).
- [17] W. Greiner, *Quantum Mechanics, An Introduction* (Springer-Verlag, Berlim, 1990).
- [18] F. Gross, *Relativistic Quantum Mechanics and Field Theory* (Wiley, Nova Iorque, 1993).
- [19] P. Strange, *Relativistic Quantum Mechanics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1998).
- [20] W. Greiner, *Relativistic Quantum Mechanics, Wave Equations* (Springer-Verlag, Berlim, 2000).

- [21] R. Seki, Phys. Lett. **58B**, 49 (1975).
- [22] W. Pauli e V.F. Weisskopf, Helv. Phys. Acta **1**, 709 (1934).
- [23] O. Klein, Z. Phys. **37**, 895 (1926).
- [24] V.A. Fock, Z. Phys. **38**, 242 (1926); **39**, 226 (1926).
- [25] W. Gordon, Z. Phys. **40**, 117 (1926).
- [26] J. -M. Lévy-Leblond, Commun. Math. Phys. **6**, 286 (1967).
- [27] B.G. Sidharth, Int. J. Theor. Phys, **48**, 497 (2009).
- [28] N.A. Lemos, *Mecânica Analítica* (Editora Livraria da Física, São Paulo, 2007).

Capítulo 6

Apêndice

6.1 Transformação de Lorentz

Nesta seção mostraremos um caso particular das transformações de Lorentz, onde usamos como referência [28]. Suponha que η seja um referencial inercial e η' um outro referencial inercial que se move em relação a η com velocidade constante v . Se as origens \mathcal{O} e \mathcal{O}' coincidem nos instantes $t = t' = 0$ e a velocidade relativa v é paralela aos eixos x de η e x' de η' , então as coordenadas (x, y, z, t) e (x', y', z', t') , atribuídas a um mesmo *evento* por observadores fixos nos respectivos referenciais, estão relacionados da seguinte maneira:

$$x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \quad (6.1a)$$

$$y' = y, \quad (6.1b)$$

$$z' = z, \quad (6.1c)$$

$$t' = \frac{t - vx/c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}. \quad (6.1d)$$

As equações (6.1) constituem um caso particular das transformações de Lorentz, chamado de *boost*. Tomando o limite $c \rightarrow \infty$ as equações acima transformam-se em

$$x' = x - vt, \quad y' = y, \quad z' = z, \quad t' = t, \quad (6.2)$$

ou seja, uma transformação de Galileu. O *boost* caracterizado pelas equações (6.1) ainda pode ser escrito na forma

$$x'^{\mu} = \Lambda^{\mu}_{\nu} x^{\nu} \equiv \Lambda^{\mu}_{\nu} x^{\nu}. \quad (6.3)$$

Os coeficientes da transformação Λ^{μ}_{ν} formam uma matriz $\Lambda = (\Lambda^{\mu}_{\nu})$ chamada de matriz da transformação de Lorentz. No caso do *boost* ao longo do eixo x , como é o caso que escolhemos, a matriz associada é

$$\Lambda = (\Lambda^{\mu}_{\nu}) = \begin{pmatrix} \gamma & -\beta\gamma & 0 & 0 \\ -\beta\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (6.4)$$

onde $\gamma = (1 - v^2/c^2)^{-1/2}$ e $\beta = v/c$. As transformações de Lorentz, sempre caracterizadas por $x'^{\mu} = \Lambda^{\mu}_{\nu} x^{\nu}$, incluem outras possibilidades de transformação além do *boost*, tais como as rotações, inversão espacial e reversão temporal.

6.2 Invariância de gauge

A equação de Klein-Gordon na presença de potenciais vetoriais externos é dada por (2.61)

$$\left(\hat{p}^\mu - \frac{e}{c}A^\mu\right)\left(\hat{p}_\mu - \frac{e}{c}A_\mu\right)\psi = m^2c^2\psi. \quad (6.5)$$

Uma transformação de gauge, também conhecida como transformação de calibre, é descrita por

$$A'_\mu = A_\mu + \partial_\mu f \quad (6.6)$$

com $f(x^\mu)$ sendo uma função arbitrária. Queremos mostrar que uma transformação de gauge juntamente com uma transformação de fase na função de onda, mantém a mesma forma da equação de Klein-Gordon (6.5), isto é o que chamamos covariância da equação. Começamos então com um ansatz que para uma dada transformação de calibre $A^\mu \rightarrow A'^\mu$ teremos uma transformação $\psi \rightarrow \psi'$ dada por

$$\psi' = e^\Gamma \psi \quad (6.7)$$

onde $\Gamma(x^\mu)$ é uma função a ser determinada. Observando que

$$\left(\hat{p}_\mu - \frac{e}{c}A'_\mu\right)\psi' = \left(\hat{p}_\mu - \frac{e}{c}A'_\mu\right)e^\Gamma\psi = \hat{p}_\mu(e^\Gamma\psi) - \frac{e}{c}(A_\mu + \partial_\mu f)e^\Gamma\psi \quad (6.8)$$

e usando

$$\hat{p}_\mu(e^\Gamma\psi) = i\hbar\partial_\mu(e^\Gamma\psi) = i\hbar(e^\Gamma\partial_\mu\Gamma)\psi + e^\Gamma\hat{p}_\mu\psi, \quad (6.9)$$

reescrevemos (6.8) como

$$\left(\hat{p}_\mu - \frac{e}{c}A'_\mu\right)\psi' = e^\Gamma\left(\hat{p}_\mu - \frac{e}{c}A_\mu\right)\psi + \left(i\hbar\partial_\mu\Gamma - \frac{e}{c}\partial_\mu f\right)\psi e^\Gamma. \quad (6.10)$$

Fazendo

$$\Gamma = -\frac{ie}{\hbar c}f, \quad (6.11)$$

a segunda parcela de (6.10) anula-se, então teremos

$$\left(\hat{p}_\mu - \frac{e}{c}A'_\mu\right)\psi' = e^\Gamma\left(\hat{p}_\mu - \frac{e}{c}A_\mu\right)\psi. \quad (6.12)$$

Por fim, obtemos

$$\begin{aligned} \left(\hat{p}^\mu - \frac{e}{c}A'^\mu\right)\left(\hat{p}_\mu - \frac{e}{c}A'_\mu\right)\psi' &= \left(\hat{p}^\mu - \frac{e}{c}A'^\mu\right)\left[e^\Gamma\left(\hat{p}_\mu - \frac{e}{c}A_\mu\right)\psi\right] \\ &= \hat{p}^\mu\left[e^\Gamma\left(\hat{p}_\mu - \frac{e}{c}A_\mu\right)\psi\right] - \frac{e}{c}A'^\mu\left[e^\Gamma\left(\hat{p}_\mu - \frac{e}{c}A_\mu\right)\psi\right], \end{aligned} \quad (6.13)$$

usando novamente

$$\hat{p}^\mu\left[e^\Gamma\left(\hat{p}_\mu - \frac{e}{c}A_\mu\right)\psi\right] = e^\Gamma(\hat{p}^\mu\Gamma)\left(\hat{p}_\mu - \frac{e}{c}A_\mu\right)\psi + e^\Gamma\hat{p}^\mu\left[\left(\hat{p}_\mu - \frac{e}{c}A_\mu\right)\psi\right] \quad (6.14)$$

reescrevemos (6.13) da seguinte forma

$$\begin{aligned} \left(\hat{p}^\mu - \frac{e}{c}A'^\mu\right)\left(\hat{p}_\mu - \frac{e}{c}A'_\mu\right)\psi' &= e^\Gamma\left(\hat{p}^\mu - \frac{e}{c}A'^\mu\right)\left(\hat{p}_\mu - \frac{e}{c}A_\mu\right)\psi \\ &\quad + e^\Gamma\left(i\hbar\partial^\mu\Gamma - \frac{e}{c}\partial^\mu f\right)\left(\hat{p}_\mu - \frac{e}{c}A_\mu\right)\psi. \end{aligned} \quad (6.15)$$

Note novamente que com Γ dado por (6.11) a segunda parcela de (6.15) é nula. Substituindo (6.5) em (6.15) ficamos com

$$\left(\hat{p}^\mu - \frac{e}{c}A'^\mu\right)\left(\hat{p}_\mu - \frac{e}{c}A'_\mu\right)\psi' = m^2c^2\psi', \quad (6.16)$$

como queríamos demonstrar.

6.3 Ortogonalidade na representação de Klein-Gordon

Vamos mostrar aqui a ortogonalidade das funções para o caso discreto (normalização na caixa) na representação de Klein-Gordon. Nesta representação o produto interno é dado por

$$(\psi_1, \psi_2) = \frac{i\hbar}{2mc^2} \int d^3r \psi_1^* \overleftrightarrow{\partial}_t \psi_2. \quad (6.17)$$

Dada a função normalizada

$$\psi_{(\mathbf{p}, \lambda)} = \sqrt{\frac{mc^2}{L^3 \varepsilon_p}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \lambda \varepsilon_p t) \right], \quad (6.18)$$

calculamos

$$(\psi_{(\mathbf{p}, \lambda)}, \psi_{(\mathbf{p}', \lambda')}) = \frac{(\lambda \varepsilon_p + \lambda' \varepsilon_{p'})}{2L^3 \sqrt{\varepsilon_p \varepsilon_{p'}}} e^{-\frac{i}{\hbar} (\lambda' \varepsilon_{p'} - \lambda \varepsilon_p) t} \int e^{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{r}} d^3r. \quad (6.19)$$

Explicitamente,

$$\int e^{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{r}} d^3r = \int_0^L e^{\frac{i}{\hbar} (p'_x - p_x)x} dx \int_0^L e^{\frac{i}{\hbar} (p'_y - p_y)y} dy \int_0^L e^{\frac{i}{\hbar} (p'_z - p_z)z} dz, \quad (6.20)$$

onde,

$$p_x = \frac{2\pi\hbar n_x}{L}, \quad p_y = \frac{2\pi\hbar n_y}{L}, \quad p_z = \frac{2\pi\hbar n_z}{L}, \quad (6.21)$$

com

$$n = 0, \pm 1, \pm 2 \dots \quad (6.22)$$

e dessa forma temos para a integral

$$\int e^{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{r}} d^3r = L^3 \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'}, \quad (6.23)$$

finalmente

$$(\psi_{(\mathbf{p}, \lambda)}, \psi_{(\mathbf{p}', \lambda')}) = \frac{(\lambda + \lambda')}{2} e^{-\frac{i}{\hbar} (\lambda' - \lambda) \varepsilon_p t} \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'}, \quad (6.24)$$

ou ainda

$$(\psi_{(\mathbf{p}, \lambda)}, \psi_{(\mathbf{p}', \lambda')}) = \lambda \delta_{\lambda \lambda'} \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'}. \quad (6.25)$$

6.4 Ortogonalidade na representação de Schrödinger

Da mesma forma que na seção anterior mostraremos a relação de ortogonalidade para o caso discreto (normalização na caixa)

$$\langle \Psi_{(\lambda', \mathbf{p}')} | \Psi_{(\lambda, \mathbf{p})} \rangle = \lambda \delta_{\lambda' \lambda} \delta_{\mathbf{p}' \mathbf{p}}. \quad (6.26)$$

A função de onda no formalismo de Schrödinger é dada por

$$\Psi_{(\mathbf{p}, \lambda)} = \frac{1}{\sqrt{4L^3 mc^2 \varepsilon_p}} \begin{pmatrix} mc^2 + \lambda \varepsilon_p \\ mc^2 - \lambda \varepsilon_p \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \lambda \varepsilon_p t)}, \quad (6.27)$$

calculamos

$$\overline{\Psi}_{(\mathbf{p}',\lambda')} \Psi_{(\mathbf{p},\lambda)} = \frac{\lambda' \varepsilon_{p'} + \lambda \varepsilon_p}{2L^3 \sqrt{\varepsilon_{p'} \varepsilon_p}} e^{\frac{i}{\hbar} [(\mathbf{p}-\mathbf{p}') \cdot \mathbf{r} - (\lambda \varepsilon_p - \lambda' \varepsilon_{p'}) t]}, \quad (6.28)$$

tendo em vista que

$$\int e^{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}-\mathbf{p}') \cdot \mathbf{r}} d^3 r = L^3 \delta_{\mathbf{p}',\mathbf{p}}, \quad (6.29)$$

encontramos

$$\langle \Psi_{(\mathbf{p}',\lambda')} | \Psi_{(\mathbf{p},\lambda)} \rangle = \frac{\lambda + \lambda'}{2} e^{-\frac{i}{\hbar} (\lambda - \lambda') \varepsilon_p t} \delta_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}, \quad (6.30)$$

ou ainda

$$\langle \Psi_{(\mathbf{p}',\lambda')} | \Psi_{(\mathbf{p},\lambda)} \rangle = \lambda \delta_{\lambda'\lambda} \delta_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}. \quad (6.31)$$

6.5 Cálculo do operador posição na representação Φ

No espaço dos momentos o operador posição é dado por (5.29)

$$\hat{\mathbf{r}} = i\hbar \vec{\nabla}_p, \quad \vec{\nabla}_p = \left(\frac{\partial}{\partial p_x}, \frac{\partial}{\partial p_y}, \frac{\partial}{\partial p_z} \right). \quad (6.32)$$

Na representação Φ os operadores transformam-se de acordo com (4.25) e portanto temos

$$\hat{\mathbf{r}}_\Phi = \hat{U} i\hbar \vec{\nabla}_p \hat{U}^{-1}, \quad (6.33)$$

com \hat{U} e \hat{U}^{-1} dados por

$$\hat{U} = \frac{\hat{1}(mc^2 + \varepsilon_p) - \hat{\tau}_1(mc^2 - \varepsilon_p)}{\sqrt{4mc^2 \varepsilon_p}}, \quad \hat{U}^{-1} = \frac{\hat{1}(mc^2 + \varepsilon_p) + \hat{\tau}_1(mc^2 - \varepsilon_p)}{\sqrt{4mc^2 \varepsilon_p}}. \quad (6.34)$$

Notando que

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}_p \hat{U}^{-1} &= \left[\frac{(\hat{1} - \hat{\tau}_1)}{\sqrt{4mc^2 \varepsilon_p}} - \frac{\hat{1}(mc^2 + \varepsilon_p) + \hat{\tau}_1(mc^2 - \varepsilon_p)}{2\varepsilon_p \sqrt{4mc^2 \varepsilon_p}} \right] \vec{\nabla}_p \varepsilon_p \\ &= - \left[\frac{mc^2(\hat{1} + \hat{\tau}_1) - \varepsilon_p(\hat{1} - \hat{\tau}_1)}{\sqrt{4mc^2 \varepsilon_p}} \right] \frac{\vec{\nabla}_p \varepsilon_p}{2\varepsilon_p} \\ &= -\hat{\tau}_1 \hat{U}^{-1} \frac{\vec{\nabla}_p \varepsilon_p}{2\varepsilon_p} \end{aligned} \quad (6.35)$$

e ainda que

$$\varepsilon_p = \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4} \Rightarrow \vec{\nabla}_p \varepsilon_p = \frac{c^2 \mathbf{p}}{\varepsilon_p} \quad (6.36)$$

a relação (6.35) torna-se

$$\vec{\nabla}_p \hat{U}^{-1} = -\hat{\tau}_1 \hat{U}^{-1} \frac{c^2 \mathbf{p}}{2\varepsilon_p^2} = -\hat{U}^{-1} \hat{\tau}_1 \frac{c^2 \mathbf{p}}{2\varepsilon_p^2}. \quad (6.37)$$

Analisando como atua o operador (6.37) sobre uma função arbitrária Φ , temos

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{r}}_\Phi \Phi &= \hat{U} i\hbar \vec{\nabla}_p (\hat{U}^{-1} \Phi) = i\hbar \hat{U} \hat{U}^{-1} \vec{\nabla}_p \Phi + i\hbar \hat{U} (\vec{\nabla}_p \hat{U}^{-1}) \Phi \\ &= i\hbar \left[\hat{1} \vec{\nabla}_p - \hat{\tau}_1 \frac{c^2 \mathbf{p}}{2\varepsilon_p^2} \right] \Phi. \end{aligned} \quad (6.38)$$

Dessa forma, encontramos que o operador posição na representação Φ é dado por

$$\hat{\mathbf{r}}_\Phi = \hat{1}i\hbar\vec{\nabla}_p - \hat{\tau}_1 \frac{i\hbar c^2 \mathbf{p}}{2(\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4)}. \quad (6.39)$$

6.6 Densidade de carga-corrente

Mostraremos agora como obter (3.122) e (3.123) de (3.118). Começamos com a Eq.(3.118)

$$i\hbar\partial_t\Psi_c = \frac{\hat{\alpha}}{2M}(\hat{\mathbf{p}} + \mathbf{V}_e/c)^2\Psi_c + Mc^2\hat{\tau}_3\Psi_c - V_t\Psi_c, \quad (6.40)$$

onde $\hat{\alpha} = \hat{\tau}_3 + i\hat{\tau}_2$. Substituindo $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}$ na equação acima temos

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\Psi_c = & -\frac{\hbar^2\hat{\alpha}}{2M}\nabla^2\Psi_c - \frac{i\hbar\hat{\alpha}}{2Mc}\vec{\nabla} \cdot (\mathbf{V}_e\Psi_c) - \frac{i\hbar\hat{\alpha}}{2Mc}\mathbf{V}_e \cdot (\vec{\nabla}\Psi_c) \\ & + \frac{\hat{\alpha}\mathbf{V}_e^2}{2Mc^2}\Psi_c + Mc^2\hat{\tau}_3\Psi_c - V_t\Psi_c, \end{aligned} \quad (6.41)$$

definindo

$$\bar{\Psi}_c \equiv \Psi_c^\dagger \hat{\tau}_3 \quad (6.42)$$

e multiplicando (6.42) pela esquerda de (6.41) encontramos

$$\begin{aligned} i\hbar\bar{\Psi}_c\partial_t\Psi_c = & -\frac{\hbar^2\hat{\alpha}}{2M}\bar{\Psi}_c\nabla^2\Psi_c - \frac{i\hbar\hat{\alpha}}{2Mc}\bar{\Psi}_c\vec{\nabla} \cdot (\mathbf{V}_e\Psi_c) - \frac{i\hbar\hat{\alpha}}{2Mc}\bar{\Psi}_c\mathbf{V}_e \cdot (\vec{\nabla}\Psi_c) \\ & + \frac{\hat{\alpha}\mathbf{V}_e^2}{2Mc^2}\bar{\Psi}_c\Psi_c + Mc^2\bar{\Psi}_c\hat{\tau}_3\Psi_c - V_t\bar{\Psi}_c\Psi_c. \end{aligned} \quad (6.43)$$

Pegamos o conjugado hermitiano da equação (6.41) e depois multiplicamos a equação por $-\hat{\tau}_3\Psi_c$ pela esquerda e obtemos

$$\begin{aligned} i\hbar(\partial_t\bar{\Psi}_c)\Psi_c = & \frac{\hbar^2}{2M}(\nabla^2\bar{\Psi}_c)\hat{\alpha}\Psi_c - \frac{i\hbar}{2Mc}\left[\vec{\nabla} \cdot (\mathbf{V}_e\bar{\Psi}_c)\right]\hat{\alpha}\Psi_c - \frac{i\hbar}{2Mc}\mathbf{V}_e \cdot (\vec{\nabla}\bar{\Psi}_c)\hat{\alpha}\Psi_c \\ & - \frac{\mathbf{V}_e^2}{2Mc^2}\bar{\Psi}_c\hat{\alpha}\Psi_c - Mc^2\bar{\Psi}_c\hat{\tau}_3\Psi_c + V_t\bar{\Psi}_c\Psi_c, \end{aligned} \quad (6.44)$$

onde usamos que $\hat{\tau}_3\hat{\alpha} = \hat{\alpha}^\dagger\hat{\tau}_3$. Multiplicando (6.43) e (6.44) por M e somando-as encontramos

$$i\hbar M\partial_t(\bar{\Psi}_c\Psi_c) = \vec{\nabla} \cdot \left\{ -\frac{\hbar^2}{2}\left[\bar{\Psi}_c\hat{\alpha}\vec{\nabla}\Psi_c - (\vec{\nabla}\bar{\Psi}_c)\hat{\alpha}\Psi_c\right] - \frac{i\hbar}{c}\mathbf{V}_e\bar{\Psi}_c\hat{\alpha}\Psi_c \right\}. \quad (6.45)$$

Passando tudo para o mesmo membro e multiplicando toda equação por $e/(i\hbar m)$ temos

$$\partial_t\left(e\frac{M}{m}\bar{\Psi}_c\Psi_c\right) + \vec{\nabla} \cdot \left\{ \frac{\hbar e}{2mi}\bar{\Psi}_c\hat{\alpha}\vec{\nabla}\Psi_c + \frac{e\mathbf{V}_e}{mc}\bar{\Psi}_c\hat{\alpha}\Psi_c \right\} = 0 \quad (6.46)$$

que é a equação da continuidade com

$$\rho_c = e\frac{M}{m}\bar{\Psi}_c\Psi_c, \quad (6.47)$$

$$\mathbf{j}_c = \frac{\hbar e}{2mi}\bar{\Psi}_c\hat{\alpha}\vec{\nabla}\Psi_c + \frac{e\mathbf{V}_e}{mc}\bar{\Psi}_c\hat{\alpha}\Psi_c. \quad (6.48)$$

6.7 Tensor de energia-momento

Usaremos aqui o formalismo canônico para calcular as energias das partículas através do tensor de energia-momento. Primeiro provaremos que a densidade de lagrangiana

$$\mathcal{L} = i\hbar\bar{\Psi}\partial_t\Psi - \frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}\bar{\Psi}(\hat{\tau}_3 + i\hat{\tau}_2)\vec{\nabla}\Psi - mc^2\bar{\Psi}\hat{\tau}_3\Psi, \quad (6.49)$$

nos dá as corretas equações de movimento. A ação é dada por

$$S = \int \mathcal{L}d^4x. \quad (6.50)$$

A variação com respeito aos componentes de $\bar{\Psi}$ resulta em

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial \bar{\Psi}} &= 0, \\ \Rightarrow \partial_\nu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\nu \bar{\Psi})} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\Psi}} &= 0, \\ \Rightarrow \partial_t \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t \bar{\Psi})} + \vec{\nabla} \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\vec{\nabla} \bar{\Psi})} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\Psi}} &= 0, \\ \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}(\hat{\tau}_3 + i\hat{\tau}_2)\nabla^2\Psi + mc^2\hat{\tau}_3\Psi &= i\hbar\partial_t\Psi, \end{aligned} \quad (6.51)$$

que é a equação de Klein-Gordon no formalismo de Schrödinger. Similarmente a variação com respeito a Ψ resulta na correspondente equação de movimento para $\bar{\Psi}$. O tensor de energia-momento é dado por

$$T_{\mu\nu} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \Psi)}\partial_\nu \Psi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \bar{\Psi})}\partial_\nu \bar{\Psi} - \mathcal{L}g_{\mu\nu}. \quad (6.52)$$

Calculando o componente T_{00} com \mathcal{L} dado por (6.49) encontramos

$$T_{00} = i\hbar\bar{\Psi}\partial_t\Psi - i\hbar\bar{\Psi}\partial_t\Psi + \frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}\bar{\Psi}(\hat{\tau}_3 + i\hat{\tau}_2)\cdot\vec{\nabla}\Psi + mc^2\bar{\Psi}\hat{\tau}_3\Psi, \quad (6.53)$$

e assim

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \int T_{00}d^3x \\ &= \int \left(\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}\bar{\Psi}(\hat{\tau}_3 + i\hat{\tau}_2)\cdot\vec{\nabla}\Psi + mc^2\bar{\Psi}\hat{\tau}_3\Psi \right) d^3x \\ &= \int \bar{\Psi} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}(\hat{\tau}_3 + i\hat{\tau}_2)\nabla^2 + mc^2\hat{\tau}_3 \right) \Psi d^3x \\ &= \int \Psi^\dagger \hat{\tau}_3 \hat{H}^0 \Psi d^3x = \langle \Psi | \hat{H}^0 | \Psi \rangle = \langle \hat{H}^0 \rangle \langle \Psi | \Psi \rangle, \end{aligned} \quad (6.54)$$

onde usamos (3.62). Notando que

$$\hat{H}^0 |\Psi_{(\lambda)}\rangle = \langle \hat{H}^0 \rangle_\lambda |\Psi_{(\lambda)}\rangle = \lambda \varepsilon_p |\Psi_{(\lambda)}\rangle, \quad \lambda = \pm 1,$$

com $\langle \hat{H}^0 \rangle_\lambda$ sendo o autovalor de \hat{H}^0 correspondendo ao autoestado $|\Psi_{(\lambda)}\rangle$ e $\langle \Psi_{(\lambda)} | \Psi_{(\lambda)} \rangle = \lambda$, temos

$$\varepsilon = \langle \Psi_{(\lambda)} | \hat{H}^0 | \Psi_{(\lambda)} \rangle = \langle \hat{H}^0 \rangle_\lambda \langle \Psi_{(\lambda)} | \Psi_{(\lambda)} \rangle = \lambda^2 \varepsilon_p = \varepsilon_p, \quad (6.55)$$

ou seja, a energia é positiva tanto para partículas como para antipartículas.

6.8 Uma equação de onda não-relativística com spin

Em 1967, Lévy-Leblond [26], introduziu uma nova forma de se obter a equação de Pauli para o elétron, com o correto fator g de Landé, abaixando a ordem da equação de Schrödinger. Em contraste com outras derivações, ele não se referiu a fatos empíricos, mas desenvolveu novos conceitos teóricos de abaixamento de ordem da equação de onda.

Conceitualmente ele usou o mesmo método que foi usado na obtenção da equação de Dirac a partir da equação de Klein-Gordon. Nesse texto, seguiremos o desenvolvimento usado em [17], que apresenta de maneira mais didática como Lévy-Leblond chegou a essas conclusões. O objetivo de mostrar esse desenvolvimento, ficará claro mais adiante.

6.8.1 Abaixamento de ordem da equação de Schrödinger

Como primeiro passo, abreviamos o operador de Schrödinger por

$$\hat{S} = i\hbar\partial_t + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 = \hat{E} - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}, \quad (6.56)$$

de tal forma que a equação de Schrödinger torna-se

$$\hat{S}\psi = 0. \quad (6.57)$$

Pode-se perceber que essa equação é assimétrica com respeito as derivadas temporais e espaciais. Isso porque a derivada temporal é de primeira ordem em \hat{S} , enquanto \hat{S} é de segunda ordem. Numa tentativa de remover essa assimetria, tentaremos construir uma equação de onda da forma geral

$$\hat{O}\psi = \left(\hat{A}\hat{E} + \hat{\mathbf{B}}\cdot\hat{\mathbf{p}} + \hat{C}\right)\psi = 0. \quad (6.58)$$

Aqui \hat{A} , $\hat{\mathbf{B}}$ e \hat{C} são operadores lineares (matrizes), os quais, ainda teremos que determinar, mas que não dependem de \hat{E} ou $\hat{\mathbf{p}}$. Perceba, que esse novo operador é de primeira ordem tanto na derivada temporal, quanto na derivada espacial. Além do mais, exigimos que as soluções ψ de (6.58) sejam também soluções da equação de Schrödinger (6.57), ou seja, ψ é uma autofunção simultânea de \hat{S} e \hat{O} . Isso significa que as equações

$$\hat{S}\psi = 0, \quad (6.59a)$$

$$\hat{O}\psi = 0, \quad (6.59b)$$

devem ser simultaneamente válidas. Agora, podemos supor que deve existir um outro operador

$$\hat{O}' = \hat{A}'\hat{E} + \hat{\mathbf{B}}'\cdot\hat{\mathbf{p}} + \hat{C}', \quad (6.60)$$

tal que, multiplicando \hat{O}' por \hat{O} nos dê como resultado um operador proporcional ao operador de Schrödinger (6.56), ou seja,

$$\hat{O}'\hat{O} = 2m\hat{S}. \quad (6.61)$$

Nesse caso, a constante de proporcionalidade foi escolhida como sendo igual a $2m$ para conveniência futura, e se provará muito útil. Os operadores \hat{A}' , $\hat{\mathbf{B}}'$ e \hat{C}' , introduzidos em (6.60), novamente não contém \hat{E} e $\hat{\mathbf{p}}$, eles ainda devem ser determinados, assim como \hat{A} , $\hat{\mathbf{B}}$ e \hat{C} . Se todos, ou mesmo se alguns desses “chutes” se mostrarem impossíveis,

não seremos capazes de encontrar os operadores \hat{A} , $\hat{\mathbf{B}}$ e \hat{C} . Por outro lado, se tivermos êxito, então a equação $\hat{O}\psi = 0$ representa uma equação de onda equivalente à equação de Schrödinger, mas de primeira ordem em \hat{E} e $\hat{\mathbf{p}}$. Doravante, chamaremos (6.58) de equação de Schrödinger de primeira ordem.

Para construir \hat{A} , \hat{A}' , $\hat{\mathbf{B}}$, $\hat{\mathbf{B}}'$, \hat{C} e \hat{C}' , exploramos a equação (6.61), com a ajuda de (6.60), (6.58) e (6.56) obtendo dessa forma

$$\left(\hat{A}'\hat{E} + \sum_{i=1}^3 \hat{B}'_i \hat{p}_i + \hat{C}' \right) \left(\hat{A}\hat{E} + \sum_{j=1}^3 \hat{B}_j \hat{p}_j + \hat{C} \right) = 2m\hat{E} - \sum_{k=1}^3 \hat{p}_k^2. \quad (6.62)$$

Por comparação direta, encontramos as condições

$$\begin{cases} \hat{A}'\hat{A} = 0 \\ \hat{A}'\hat{C} + \hat{C}'\hat{A} = 2m\hat{1} \\ \hat{C}'\hat{C} = 0 \end{cases} \quad (6.63a)$$

$$\begin{cases} \hat{B}'_i \hat{C} + \hat{C}' \hat{B}_i = 0 \\ \hat{B}'_i \hat{A} + \hat{A}' \hat{B}_i = 0 \\ \hat{B}'_i \hat{B}_j + \hat{B}'_j \hat{B}_i = -2\delta_{ij} \hat{1}, \quad (i, j = 1, 2, 3). \end{cases} \quad (6.63b)$$

Para simplificar essas condições, definimos os novos operadores

$$\begin{aligned} \hat{B}_4 &= i \left(\hat{A} + \frac{\hat{C}}{2m} \right), & \hat{B}'_4 &= i \left(\hat{A}' + \frac{\hat{C}'}{2m} \right) \\ \hat{B}_5 &= \hat{A} - \frac{\hat{C}}{2m}, & \hat{B}'_5 &= \hat{A}' - \frac{\hat{C}'}{2m}. \end{aligned} \quad (6.64)$$

Com essa nova notação (6.63b) torna-se

$$\hat{B}'_\mu \hat{B}_\nu + \hat{B}'_\nu \hat{B}_\mu = -2\delta_{\mu\nu} \hat{1}, \quad \mu, \nu = 1 \dots 5. \quad (6.65)$$

Por fim, essas relações podem ainda ser substituídas por uma outra forma mais usual na mecânica quântica relativística.

Seja \hat{M} uma matriz não-singular, arbitrária (com $\hat{M}\hat{M}^{-1} = \hat{1}$), definimos

$$\begin{aligned} \hat{B}_\alpha &= \hat{M}\hat{\gamma}_\alpha, & \hat{B}'_\alpha &= -\hat{\gamma}_\alpha \hat{M}^{-1}, \quad (\alpha = 1, \dots, 4) \\ \hat{B}_5 &= -i\hat{M}, & \hat{B}'_5 &= -i\hat{M}^{-1}. \end{aligned} \quad (6.66)$$

As seguintes relações de anticomutação seguem-se pela introdução de (6.66) em (6.65)

$$\hat{\gamma}_\alpha \hat{\gamma}_\beta + \hat{\gamma}_\beta \hat{\gamma}_\alpha = 2\delta_{\alpha\beta} \hat{1} \quad (\alpha, \beta = 1, \dots, 4) \quad (6.67)$$

Deveríamos notar que essas relações são válidas somente para quatro operadores $\hat{\gamma}_\alpha$, enquanto em (6.65) existem cinco operadores \hat{B}_μ . Pode-se depreender facilmente que a definição (6.66) completa automaticamente as relações de anticomutação (6.65) para o caso que um ou ambos os índices são iguais a 5 (i.e., $\mu = 5$ ou $\nu = 5$, ou $\mu = \nu = 5$).

Por exemplo, calculamos

$$\hat{B}'_5 \hat{B}_\nu + \hat{B}'_\nu \hat{B}_5 = -i\hat{M}^{-1} \hat{M} \hat{\gamma}_\nu - \hat{\gamma}_\nu \hat{M}^{-1} (-i) \hat{M} = -i\hat{\gamma}_\nu + i\hat{\gamma}_\nu = 0 \quad (6.68)$$

para $\nu = 1, 2, 3, 4$ e

$$\hat{B}'_5 \hat{B}_5 + \hat{B}'_5 \hat{B}_5 = -2i \hat{M}^{-1} (-i) \hat{M} = -2\hat{1} \quad (6.69)$$

Então os cinco operadores \hat{B}_ν seriam repostos pelos quatro $\hat{\gamma}_\alpha$ e o operador \hat{M} escolhido arbitrariamente (que realmente não deve ser singular para que exista um operador inverso \hat{M}^{-1}).

As relações de comutação (6.67) definem uma álgebra, conhecida na literatura como álgebra de Clifford. Essa álgebra pode ser representada por matrizes e levam à álgebra das matrizes complexas 4×4 (de particular importância na teoria quântica relativística) como uma representação especial.

Para obter uma representação explícita para $\hat{\gamma}_\alpha$, e assim para \hat{B}_ν , observamos (6.67) mais acuradamente e verificamos imediatamente que as relações abaixo

$$\hat{\gamma}_i^2 = \hat{1}, \quad i = 1 \dots 4 \quad (6.70)$$

$$\hat{\gamma}_\alpha \hat{\gamma}_\beta = -\hat{\gamma}_\beta \hat{\gamma}_\alpha \quad \text{para } \alpha \neq \beta \quad (6.71)$$

são satisfeitas. Segue-se da primeira relação que os autovalores de $\hat{\gamma}_\alpha$ devem ser ± 1 . Matrizes representando os γ 's devem ser quadradas de acordo com (6.70). E partindo de (6.71), segue-se que os traços dessas matrizes devem ser nulos, porque para $\alpha \neq \beta$, temos

$$\hat{\gamma}_\beta \hat{\gamma}_\alpha = -\hat{\gamma}_\alpha \hat{\gamma}_\beta \implies \hat{\gamma}_\alpha = -\hat{\gamma}_\beta \hat{\gamma}_\alpha \hat{\gamma}_\beta$$

com isso percebe-se que

$$\text{tr}(\hat{\gamma}_\alpha) = -\text{tr}(\hat{\gamma}_\beta \hat{\gamma}_\alpha \hat{\gamma}_\beta) = -\text{tr}(\hat{\gamma}_\beta^2 \hat{\gamma}_\alpha) = -\text{tr}(\hat{\gamma}_\alpha) \quad (6.72)$$

e assim $\text{tr}(\hat{\gamma}_\alpha) = 0$. No último passo fizemos uso de $\text{tr} \hat{A} \hat{B} = \text{tr} \hat{B} \hat{A}$ e o fato que $\hat{\gamma}_\beta^2 = \hat{1}$, de acordo com (6.70). Como o traço é a soma dos elementos da diagonal da matriz, o número de autovalores positivos e negativos deve ser igual. Então as matrizes $\hat{\gamma}$ devem ter dimensão par. A menor dimensão, $N = 2$, deve ser excluída, porque no espaço de matrizes 2×2 , existem somente três matrizes anticomutantes $\hat{\sigma}_i$ linearmente independentes. As matrizes $\hat{\sigma}_i$ ($i = 1, 2, 3$), são as conhecidas matrizes de Pauli¹

Assim, concluímos que a menor dimensão possível para satisfazer as condições acima é $N = 4$. Por causa das propriedades das matrizes de Pauli, podemos escolher a seguinte representação para as matrizes $\hat{\gamma}_\alpha$:

$$\hat{\gamma}_i = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_i \\ \hat{\sigma}_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\gamma}_4 = \begin{pmatrix} \hat{1} & 0 \\ 0 & -\hat{1} \end{pmatrix}, \quad \hat{M} = \hat{M}^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{1} \\ \hat{1} & 0 \end{pmatrix} \quad (6.73)$$

Aqui, 0 , $\hat{1}$ e $\hat{\sigma}_i$ indicam submatrizes 2×2 , assim (6.73) é uma abreviação. Explicitamente (6.73) torna-se

$$\hat{\gamma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\gamma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.74)$$

$$\hat{\gamma}_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\gamma}_4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

¹Vide apêndice 7.2

e dessa forma a validade das relações (6.70) e (6.71) podem ser facilmente verificadas.

Pode-se concluir de (6.58) que o vetor coluna deve ter 4 componentes

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}, \quad (6.75)$$

visto que \hat{A} , $\hat{\mathbf{B}}$ e \hat{C} são matrizes 4×4 . Aqui, $\varphi = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}$ e $\chi = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}$ são vetores de dois componentes que juntos formam um vetor coluna de quatro componentes ψ .

Substituindo (6.73) em (6.66) e (6.64) encontramos \hat{A} , $\hat{\mathbf{B}}$ e \hat{C}

$$\hat{A} = -i \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \hat{1} & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{B}} = \begin{pmatrix} \hat{\sigma} & 0 \\ 0 & \hat{\sigma} \end{pmatrix}, \quad \hat{C} = 2mi \begin{pmatrix} 0 & \hat{1} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Por fim, as matrizes \hat{A} , $\hat{\mathbf{B}}$ e \hat{C} são inseridas nas equações de movimento (6.58), dando

$$\left[-i \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \hat{1} & 0 \end{pmatrix} \hat{E} + \begin{pmatrix} \hat{\sigma} & 0 \\ 0 & \hat{\sigma} \end{pmatrix} \cdot \hat{\mathbf{p}} + 2mi \begin{pmatrix} 0 & \hat{1} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = 0. \quad (6.76)$$

Resolvendo a equação matricial, obtemos um sistema de equações acopladas para os vetores de dois componentes φ e χ

$$\begin{cases} \hat{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}\varphi + 2mi\chi = 0 \\ \hat{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}\chi - i\hat{E}\varphi = 0 \end{cases} \quad (6.77)$$

onde $\hat{\sigma}$ é o vetor com componentes $\hat{\sigma}_i$: $\hat{\sigma} = \{\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3\}$.

Isolando χ na primeira equação de (6.77) obtemos

$$\chi = -\frac{\hat{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}}{2mi}\varphi, \quad (6.78)$$

substituindo (6.78) na segunda equação de (6.77) encontramos

$$\left[\frac{(\hat{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})(\hat{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})}{2m} - \hat{E} \right] \varphi = 0. \quad (6.79)$$

Usando a propriedade² $(\hat{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})(\hat{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})\varphi = \hat{\mathbf{p}}^2\varphi$ na equação de movimento acima teremos

$$\left(\hat{E} - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \right) \varphi = 0. \quad (6.80)$$

Esta é justamente a equação de Schrödinger para uma partícula livre. Analogamente, podemos notar que na segunda equação de (6.77) encontramos

$$\hat{E}\varphi = -i\hat{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}\chi. \quad (6.81)$$

Se aplicarmos o operador \hat{E} à esquerda da primeira equação de (6.77) encontramos

$$\left[-(\hat{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})(\hat{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) + 2m\hat{E} \right] \chi = 0 \quad (6.82)$$

²Vide apêndice 7.3

ou ainda

$$\left(\hat{E} - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}\right)\chi = 0. \quad (6.83)$$

Vemos que χ também satisfaz a equação de Schrödinger. Mostramos que os componentes e consequentemente o vetor coluna $\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$ da equação de Schrödinger de primeira ordem (6.58) realmente satisfazem a equação de Schrödinger, como exigido. Então os autovalores de energia são em ambos os casos também

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}.$$

6.8.2 Partículas em um campo eletromagnético e o momento magnético

A invariância de gauge³ da equação de Schrödinger exige o acoplamento mínimo (1.27)

$$\hat{p}^\mu \rightarrow \hat{p}^\mu - \frac{e}{c}A^\mu. \quad (6.84)$$

Assim, as equações de movimento (6.77) tornam-se

$$\begin{cases} \hat{\sigma} \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\varphi + 2mi\chi = 0 \\ \hat{\sigma} \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\chi - i\left(\hat{E} - eA_0\right)\varphi = 0. \end{cases} \quad (6.85)$$

Explicitando $\chi = -\frac{\hat{\sigma} \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)}{2mi}\varphi$ na primeira equação de (6.85) e substituindo na segunda, encontramos

$$\left\{ \hat{E} - eA_0 - \frac{1}{2m} \left[\hat{\sigma} \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) \right] \left[\hat{\sigma} \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) \right] \right\} \varphi = 0. \quad (6.86)$$

Usando a identidade⁴

$$\left(\hat{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{\Pi}}\right) \left(\hat{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{\Pi}}\right) = \hat{\mathbf{\Pi}}^2 + i\hat{\sigma} \cdot \left(\hat{\mathbf{\Pi}} \times \hat{\mathbf{\Pi}}\right) \quad (6.87)$$

encontramos

$$\left[\hat{\sigma} \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) \right] \left[\hat{\sigma} \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) \right] \varphi = \hat{\mathbf{\Pi}}^2 \varphi + i\hat{\sigma} \cdot \left[\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) \times \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) \right] \varphi, \quad (6.88)$$

notando que

$$\begin{aligned} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) \times \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) \varphi &= \hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{p}} \varphi - \frac{e}{c}\hat{\mathbf{p}} \times \mathbf{A} \varphi - \frac{e}{c}\mathbf{A} \times \hat{\mathbf{p}} \varphi + \frac{e^2}{c^2}\mathbf{A} \times \mathbf{A} \varphi \\ &= \frac{i\hbar}{c} \left(\vec{\nabla} \times \mathbf{A} \varphi + \mathbf{A} \times \vec{\nabla} \varphi \right), \end{aligned} \quad (6.89)$$

$$\vec{\nabla} \times (\mathbf{A} \varphi) = \left(\vec{\nabla} \times \mathbf{A} \right) \varphi - \mathbf{A} \times \vec{\nabla} \varphi,$$

³Vide apêndice 7.4

⁴Vide apêndice 7.3

encontramos finalmente

$$\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) \times \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) \varphi = \frac{ie\hbar}{c} \left(\vec{\nabla} \times \mathbf{A}\right) \varphi = \frac{ie\hbar}{c} \mathbf{B} \varphi, \quad (6.90)$$

onde $\mathbf{B} = \vec{\nabla} \times \mathbf{A}$ é o campo magnético. Dessa forma, podemos reescrever (6.86) como

$$i\hbar\partial_t\varphi = \left[\frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + eA_0 - \frac{e\hbar}{2mc} \hat{\sigma} \cdot \mathbf{B} \right] \varphi. \quad (6.91)$$

Esta é justamente a equação de Pauli. O último termo na equação de movimento (6.91) é a energia de interação do campo magnético com o momento magnético intrínseco da partícula $\hat{\mu} = \frac{e\hbar}{2mc} \hat{\sigma}$, ou por causa do operador spin da partícula que é $\hat{\mathbf{S}} = \frac{1}{2} \hat{\sigma}$, temos

$$\hat{\mu} = \frac{e\hbar}{mc} \hat{\mathbf{S}} = g_s \mu_B \hat{\mathbf{S}} = 2\mu_B \hat{\mathbf{S}}, \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} \quad (6.92)$$

O fator g_s é chamado de razão giromagnética ou fator giromagnético e acaba por ser duas vezes maior do que o proveniente do movimento orbital. O fator μ_B se denomina magnéton de Bohr. A razão g_s/g_l é chamada de fator de Landé. Para a partícula em questão, $g_s = 2$.

Concluimos então que a existência do spin não é um efeito relativístico, pois, como acabamos de ver, uma equação de primeira ordem e não-relativística prediz completamente o momento magnético intrínseco de uma partícula de spin 1/2. Aqui, o spin aparece como uma consequência do abaixamento de ordem da equação de onda. Em contraste a isso, muitos livros-texto dizem que a anomalia no momento magnético é devido às propriedades relativísticas.

6.9 Completeza das matrizes de Pauli

Mostraremos que qualquer matriz 2×2 pode ser expressa como uma combinação linear das matrizes $\hat{1}$ e $\hat{\sigma}_i$. As matrizes de Pauli são dadas por

$$\hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (6.93)$$

e assim escrevemos a suposição abaixo

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \\ U_{21} & U_{22} \end{pmatrix} &= \sum_{i=1}^3 a_i \hat{\sigma}_i + a_4 \hat{1} = a_1 \hat{\sigma}_1 + a_2 \hat{\sigma}_2 + a_3 \hat{\sigma}_3 + a_4 \hat{1} \\ &= a_1 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + a_2 \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + a_3 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + a_4 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a_3 + a_4 & a_1 - ia_2 \\ a_1 + ia_2 & a_4 - a_3 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (6.94)$$

As matrizes devem ser iguais. Então encontramos o seguinte sistema de equações

$$\begin{aligned} U_{11} &= 0a_1 + 0a_2 + a_3 + a_4 \\ U_{12} &= a_1 - ia_2 + 0a_3 + 0a_4 \\ U_{21} &= a_1 + ia_2 + 0a_3 + 0a_4 \\ U_{22} &= 0a_1 + 0a_2 - a_3 + a_4 \end{aligned} \quad (6.95)$$

que ainda pode ser escrito como

$$\begin{pmatrix} U_{11} \\ U_{12} \\ U_{21} \\ U_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & -i & 0 & 0 \\ 1 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix}. \quad (6.96)$$

Percebe-se que o determinante da matriz dos coeficientes

$$\begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & -i & 0 & 0 \\ 1 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{vmatrix} = 4i \neq 0 \quad (6.97)$$

é diferente de zero e portanto, sempre existe uma solução não-trivial, i.e. nem todos os coeficientes a_i são nulos, provando proposição. Logo, $\hat{1}$ e $\hat{\sigma}_i$ geram o espaço completo de matrizes 2×2 .

6.10 Uma regra de cálculo para as matrizes de Pauli

Provaremos agora a relação

$$(\hat{\sigma} \cdot \mathbf{A})(\hat{\sigma} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + i\hat{\sigma} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}). \quad (6.98)$$

sendo \mathbf{A} e \mathbf{B} dois vetores arbitrários. As relações de comutação para os $\hat{\sigma}_i$ são

$$\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = i \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k + \delta_{ij} \hat{1} \quad (6.99)$$

onde $\varepsilon_{ijk} = \pm 1$ conforme (i, j, k) seja uma permutação par ou ímpar de $(1, 2, 3)$ e $\varepsilon_{ijk} = 0$ caso haja repetição de índices. Podemos obter (6.98) escrevendo explicitamente o produto escalar

$$\begin{aligned} (\hat{\sigma} \cdot \mathbf{A})(\hat{\sigma} \cdot \mathbf{B}) &= \left(\sum_{i=1}^3 \hat{\sigma}_i A_i \right) \left(\sum_{j=1}^3 \hat{\sigma}_j B_j \right) = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j A_i B_j \quad (6.100) \\ &= \sum_{i,j} \left(i \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k + \delta_{ij} \hat{1} \right) A_i B_j = i \sum_{i,j,k} \varepsilon_{ijk} A_i B_j \hat{\sigma}_k + \sum_{i,j} A_i B_j \delta_{ij} \\ &= \sum_i A_i B_i + i \sum_k (\mathbf{A} \times \mathbf{B})_k \hat{\sigma}_k = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + i\hat{\sigma} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}). \end{aligned}$$