UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

ARLANS JUAN SMOKOVICZ DE LARA

TEMPO DE VOO E O SURGIMENTO DO TEMPO CLÁSSICO EM UMA EXTENSÃO SIMÉTRICA NO ESPAÇO-TEMPO DA MECÂNICA QUÂNTICA NÃO-RELATIVÍSTICA

CURITIBA

2023

ARLANS JUAN SMOKOVICZ DE LARA

TEMPO DE VOO E O SURGIMENTO DO TEMPO CLÁSSICO EM UMA EXTENSÃO SIMÉTRICA NO ESPAÇO-TEMPO DA MECÂNICA QUÂNTICA NÃO-RELATIVÍSTICA

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Setor de Ciências Exatas da Universidade Federal do Paraná, como parte dos requisitos para a obtenção do grau de Doutor em Física.

Orientador: Prof. Dr. Marcus Werner Beims

CURITIBA 2023

DADOS INTERNACIONAIS DE CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO (CIP) UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ SISTEMA DE BIBLIOTECAS – BIBLIOTECA CIÊNCIA E TECNOLOGIA

Lara, Arlans Juan Smokovicz de

Tempo de voo e o surgimento do tempo clássico em uma extensão simétrica no espaço-tempo da mecânica quântica nãorelativística. / Arlans Juan Smokovicz de Lara. – Curitiba, 2023. 1 recurso on-line : PDF.

Tese (Doutorado) - Universidade Federal do Paraná, Setor de Ciências Exatas, Programa de Pós-Graduação em Física.

Orientador: Prof. Dr. Marcus Werner Beims.

1. Teoria quântica. 2. Mecânica quântica não-relativística. 3. Cálculo fracionário. I. Beims, Marcus Werner. II. Universidade Federal do Paraná. Programa de Pós-Graduação em Física. III. Título.

Bibliotecária: Roseny Rivelini Morciani CRB-9/1585



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO FÍSICA - 40001016020P4

TERMO DE APROVAÇÃO

Os membros da Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação FÍSICA da Universidade Federal do Paraná foram convocados para realizar a arguição da tese de Doutorado de **ARLANS JUAN SMOKOVICZ DE LARA** intitulada: "**Tempo de voo e o surgimento do tempo clássico em uma extensão simétrica no espaço-tempo da Mecânica Quântica não-relativística**", sob orientação do Prof. Dr. MARCUS WERNER BEIMS, que após terem inquirido o aluno e realizada a avaliação do trabalho, são de parecer pela sua APROVAÇÃO no rito de defesa.

A outorga do título de doutor está sujeita à homologação pelo colegiado, ao atendimento de todas as indicações e correções solicitadas pela banca e ao pleno atendimento das demandas regimentais do Programa de Pós-Graduação.

CURITIBA, 02 de Agosto de 2023.

Assinatura Eletrônica 03/08/2023 08:45:41.0 MARCUS WERNER BEIMS Presidente da Banca Examinadora Assinatura Eletrônica 03/08/2023 08:44:38.0 RENATO MOREIRA ANGELO Avaliador Interno (UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ)

Assinatura Eletrônica 03/08/2023 10:26:15.0 FERNANDO ROBERTO DE LUNA PARISIO FILHO Avaliador Externo (UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO) Assinatura Eletrônica 04/08/2023 09:06:06.0 EDUARDO OLIMPIO RIBEIRO DIAS Avaliador Externo (UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO)

AGRADECIMENTOS

Meus sinceros agradecimentos volvem-se:

- Ao Prof. Marcus Beims, pela orientação e enorme disposição, interesse, confiança, carisma, altruísmo e dedicação comigo.
- Aos meus pais, que me deram tanto apoio durante toda minha vida acadêmica.
- À minha esposa Jéssica, por iluminar todos os meus dias, em especial nos quais eu duvidava de mim mesmo.
- Ao Vítor, meu grande amigo, que sempre esteve ao meu lado.
- Ao grupo de pesquisa da UFPR organizado pelo Prof. Beims.
- Ao grupo docente do Departamento de Física da UFPR, pelos ensinamentos no decorrer da minha vida acadêmica.
- Aos membros da banca examinadora por aceitar ler e colaborar com o manuscrito, em especial aos professores Eduardo Dias e Fernando Parisio pelas correções mais importantes deste trabalho.
- À fundação CAPES pelo suporte financeiro.

"There is no path. Beyond the scope of light, beyond the reach of Dark... what could possibly await us? And yet, we seek it, insatiably... Such is our fate."

Aldia, Scholar of the First Sin
Dark Souls II: Scholar of the First Sin

RESUMO

O tempo é uma das propriedades físicas mais intrigantes na atualidade, em particular na Mecânica Quântica. Nesta teoria, o tempo é um parâmetro clássico, enquanto a posição é um operador. Assim, há uma dificuldade intrínseca à teoria quântica de definirmos um operador de tempo de chegada. Nesta tese, investigamos uma proposta recente [Phys. Rev. A **95**, 032133 (2017)] que expande o espaço de Hilbert total do sistema, elevando o tempo ao grau de operador, de maneira a tornar a Mecânica Quântica simétrica no espaço-tempo não-relativístico. A abordagem apresenta algumas dificuldades, em especial devido à presença de operadores integrodiferenciais fracionários. Apresentamos uma interpretação a partir da Mecânica Clássica para a existência do formalismo discutido, e obtemos as equações aproximadas para os limites de potencial forte e fraco, assim como soluções para o caso de potencial constante. Mostramos que o valor esperado do tempo de voo é uma média de tempos clássicos para sistemas com imprecisão alta na energia. Aplicamos as soluções para uma barreira retangular de potencial, obtendo as fórmulas de conexão nas interfaces, e calculamos os valores esperados do tempo nesta nova proposta.

Palavras-chave: Tempo na Mecânica Quântica. Cálculo fracionário. Mecânica Quântica não-relativística.

ABSTRACT

Time is one of the most intriguing physical properties in the current days, in particular in Quantum Mechanics. In that theory, time is a classical parameter, while position is an operator. Then, there is an intrinsic difficulty in the quantum theory to define a time-of-arrival operator. In this Thesis, we investigate a recent proposal [Phys. Rev. A **95**, 032133 (2017)] that expands the total Hilbert space of the system, promoting time to the role of an operator, in a way to symmetrize non-relativistic Quantum Mechanics in spacetime. The approach shows difficulties, specially because of the presence of fractional integrodifferential operators. We present a motivation from Classical Mechanics for the existence of the spacetime-symmetric formalism, and we show approximate equations for the strong and weak potential limits, as well as solutions for a constant potential. We show that the average time of flight is an average of classical times for a system with high energy uncertainty. We apply the solutions to a textbook rectangular barrier potential, obtaining the connection formulæ on the interfaces, and calculate the expected values of time in this new proposal.

Keywords: Time in quantum mechanics. Fractional calculus. Non-relativistic quantum mechanics.

Lista de Figuras

F.2 Os autores criam um condensado de Bose-Einstein no estado $|F=2, m_F=2\rangle$ em uma armadilha de dipolo cruzado formada por um guia de onda óptico e um feixe que o intersecta perpendicularmente (armadilha de dipolo óptico). Na figura da esquerda, temos a configuração experimental, na figura da direita, o esquema dos níveis atômicos. (1) Após abaixar a temperatura efetiva da nuvem, os átomos são empurrados por um campo magnético gradiente pulsado no sentido do guia de onda na direção z, em direção ao feixe que gera a barreira de potencial e o par de feixes de Raman. (2) Enquanto os átomos viajam em direção à barreira, os autores usam passagem adiabática rápida para transferir os átomos para o estado $|2,0\rangle$ [o estado $|+x\rangle$]. (3) Durante a interação com a barreira, o par de feixes de Raman acopla os estados $|+x\rangle \in |-x\rangle$, separados pela frequência hiperfina de 6,8 GHz. (4) Para realizar a sequência de medidas, os átomos que foram acoplados ao estado $|-x\rangle$ são transferidos para o estado $|2,1\rangle$. Após a medida, os autores aplicam um campo magnético gradiente B' para realizar medidas de Stern-Gerlach e separadamente fazer a tomografia de ambos os estados.

F.3(a). Imagens de absorção das densidades atômicas após a interação com uma barreira de 135 nK e feixes de Raman para energias incidentes de 400 nK (em cima) e 140 nK (embaixo). Um pulso Stern-Gerlach é usado para separar as duas componentes de spin; um ângulo de aproximadamente 45° existe entre o campo magnético gradiente e a direção de propagação. Os ângulos de precessão dos átomos transmitidos são obtidos fazendo a tomografia completa no sistema de spin 1/2. (b) Projeções de spin obtidas para diferentes velocidades de incidência. As figuras à direita mostram os cortes através dos planos $x - y \in x - z$. Os dados são codificados de modo que vermelho representa velocidades mais baixas e verde velocidades mais altas. (c) Dados experimentais para os tempos τ_y (pontos laranja) e τ_z (pontos azuis) em função da velocidade incidente. A linha vertical corresponde à velocidade equivalente à altura da barreira (5,1 mm/s). Regiões laranja e azul são obtidas através de simulações através da equação de Schrödinger, e as bandas representam um desvio padrão na frequência de Rabi medida. As linhas tracejadas são previsões obtidas através da teoria de medidas fracas para ondas monocromáticas para τ_y (laranja), τ_z (azul), e o tempo semiclássico (verde). As curvas sólidas correspondentes são calculadas levando em conta a largura da distribuição de velocidades do pacote de onda inicial (0,45 mm/s). A figura inserida possui os dados de probabilidade de transmissão (azul) e as simulações através da equação de Schrödinger

91

SUMÁRIO

Li	sta d	le Figuras	8	
1	Intr	odução	14	
2	O c	álculo fracionário	19	
	2.1	Os operadores diferenciais e integrais	20	
	2.2	Propriedades, principais diferenças e exemplos	23	
3	\mathbf{Pos}	ição como variável independente, ou a equação do relógio analógico	27	
4	O fo	ormalismo simétrico no espaço-tempo de Dias-Parisio	33	
	4.1	Valores esperados no formalismo simétrico no espaço-tempo	38	
5	Aplicação do formalismo STS			
	5.1	Potencial fraco	41	
	5.2	Potencial forte	43	
	5.3	Resultados	45	
		5.3.1 Tempo de voo e tempo de tunelamento	45	
		5.3.2 Modelo: barreira de potencial retangular	51	
	5.4	Distribuição constante para um pacote de onda se movendo para a direita .	52	
6	Con	nclusão	58	
Re	Referências			
$\mathbf{A}_{\mathbf{j}}$	Apêndices			
A	A t	ransformada de Laplace de derivadas e integrais não-inteiras	70	

В	O no-go theorem de Pauli para o operador tempo	73
\mathbf{C}	O mecanismo de Page-Wootters	75
D	Os tempos de Larmor e o tempo de fase	77
\mathbf{E}	Comparação de Ximenes-Parisio-Dias	81
\mathbf{F}	O experimento da barreira gaussiana	87

capítulo 1

INTRODUÇÃO

O tempo na Mecânica Quântica (MQ) foi, desde o início da teoria, alvo de questionamentos [1–13], em parte pela conexão com o problema do tempo-de-chegada na MQ [13–27], em parte pela busca por uma unificação da MQ com a Relatividade Geral [28–37]. Essas discussões se devem pelo ao de que, ao contrário do que acontece, por exemplo, na Relatividade Especial [38], onde posição e tempo possuem a mesma hierarquia e formam uma entidade única, o 4-vetor evento, na MQ posição é um operador e tempo é um parâmetro clássico [39–41]. Tal incompatibilidade entre o status dessas quantidades levou a uma busca por maneiras de incluir um operador para o tempo na MQ. Mesmo com a argumentação de Pauli [42], que diz que um hamiltoniano com limite inferior nos seus autovalores e/ou com espectro discreto era incompatível com um operador tempo autoadjunto canonicamente conjugado a ele (tanto o hamiltoniano quanto o operador tempo deveriam ter espectros completamente contínuos e abrangendo todo o eixo real), diversos trabalhos mostraram maneiras de contornar essa restrição [1,16,20,21], abdicando de sua hermiticidade ou da relação canônica de comutação.

Um dos trabalhos mais famosos relacionado a esse assunto é o mecanismo de Page e Wootters e suas interpretações recentes [43–46]. Nestes artigos, os autores consideram que a evolução temporal que observamos se dá pelo fato de que estamos comparando os graus de liberdade *internos* do sistema com os graus de liberdade de um sistema auxiliar, correlacionado ao sistema de interesse, que faz o papel de relógio. Dessa forma, mesmo um universo em um estado estacionário, consistente com uma equação de Wheeler-DeWitt [19,47], nos fornece uma dinâmica para o sistema de interesse, proveniente de sua relação com o relógio, cujos graus de liberdade são identificados como o tempo.

Por outro lado, Briggs e Rost [9–11] argumentam que, se não houver interação com um reservatório, não faz sentido falar de tempo na MQ: um sistema não-interagente permanece no mesmo estado de energia, não havendo dinâmica. Mesmo que a fase mude, esta será uma fase global, e é cancelada quando calculamos quantidades de interesse, como valores esperados, desvios, entre outros. A partir desta ideia, os autores tratam o ambiente em que o sistema de interesse está inserido como um banho térmico, com muitos graus de liberdade, de tal maneira que possamos tratar o ambiente semiclassicamente. Além disso, devido ao fato de que o sistema possui um número muito menor de graus de liberdade do que o banho, a dinâmica do ambiente é efetivamente independente do sistema. Com essas hipóteses, obtém-se a Equação de Schrödinger (ES) dependente do tempo através de uma separação das equações independentes do tempo do banho e do sistema, levando também a uma relação de incerteza energia-tempo.

Ainda na discussão do tempo como parâmetro, temos diversos trabalhos, por exemplo os artigos de Mandelstam e Tamm [48] e Margolus e Levitin [49]. Neles, qualquer Δt que aparece deve ser entendido como um *intervalo de tempo*, não uma incerteza de operadores, uma vez que o tempo não é entendido como um operador nestes trabalhos. Em ambos os casos, tal intervalo Δt é considerado como sendo o menor intervalo de tempo para um sistema evoluir para um estado ortogonal em relação ao inicial. No primeiro caso, o sistema possui uma dispersão de energia ΔE , que cria um limite inferior para o intervalo de tempo com a relação $\Delta E \Delta t \sim \hbar$. Em contraste, no trabalho de Margolus e Levitin, a energia média $\langle E \rangle$ do sistema considerado é quem limita o intervalo temporal, sendo maior ou igual a $\pi \hbar/2 \langle E \rangle$. Tais resultados levam à interpretação de um limite de velocidade para a evolução de sistemas quânticos.

Também é possível entender as relações de livro-texto de "incerteza" entre tempo e energia através de eventos quânticos [50, 51], relacionando a duração de medidas quânticas com a incerteza da energia. Além disso, exigindo consistência na maneira com a qual o tempo entra nas leis fundamentais da Física, é possível também obter a interpretação de que tanto o tempo clássico quanto o tempo quântico são manifestações de emaranhamento [52].

Um melhor entendimento do tempo na MQ também pode trazer à tona novas discussões sobre as desigualdades de Leggett-Garg [53], geralmente vistas como a versão *temporal* das desigualdades de Bell [54]. Elas nos dizem que as previsões da MQ são incompatíveis com as hipóteses de *realismo macroscópico* (um objeto macroscópico, que possui dois ou mais estados macroscópicos distintos, está, para todo instante de tempo, em *um* desses estados) e de *medidas não-invasivas a nível macroscópico* (é possível determinar em qual dos estados o sistema está sem perturbá-lo ou afetar sua dinâmica futura) simultaneamente. Bose, Home e Mal [55], por exemplo, utilizam as desigualdades de Leggett-Garg no "estado mais clássico possível" (o estado coerente [56–58]) para demonstrar que seus resultados discordam da noção cotidiana de realismo macroscópico.

Desigualdades de Bell (e por consequência, a completeza da MQ [59]) trazem a discussão sobre emaranhamento para a mesa. Tratar temporalmente o emaranhamento também é do interesse da comunidade científica, e temos, como um exemplo, o trabalho de Megidish et al. [60], onde os autores demonstram troca de emaranhamento entre fótons que nunca coexistiram, possivelmente sendo uma assinatura de emaranhamento temporal, sugerindo que o emaranhamento, em particular sistemas de duas ou mais partículas emaranhadas, não possui características de não-localidade apenas no espaço, mas também para sistemas com separação tipo-tempo.

A proposta que utilizamos neste trabalho, o formalismo simétrico no espaço-tempo de Dias-Parisio (STS^1) [61,62], utiliza ideias muito similares às do mecanismo de Page e Wootters. O sistema possui um novo espaço de Hilbert com um operador tempo, implicando em um estado estendido para o sistema de interesse, que depende de variáveis tanto no novo espaço de Hilbert quanto no espaço de Hilbert usual de posição. Porém, diferentemente do que acontece no mecanismo de Page e Wootters, o qual possui um espaço de Hilbert para um sistema *auxiliar* que age como um relógio, neste formalismo tanto o espaço usual de posição quanto o novo espaço temporal são *intrínsecos* ao sistema. Isso fornece uma clara interpretação entre relações de energia-tempo e entre diversos tipos de experimentos, como por exemplo experimentos de fenda dupla (só interessa a posição de chegada da partícula), experimentos de tempo de chegada (só interessa o tempo), ou de experimentos onde gostaríamos de fazer previsões tanto do tempo de chegada quanto da posição de chegada. Tal formalismo mostrou, quando comparado com resultados experimentais, resultados mais promissores do que os obtidos através dos tempos de Larmor e de Tempo de Fase [13,63–67], e é o principal motivo de estudarmos esse formalismo.

¹Do inglês, Spacetime-symmetric

Nosso objetivo é tentar compreender melhor a presença e o papel do tempo na MQ, partindo desde uma fundamentação mais teórica até aplicações experimentais. Para isso, devemos estudar as soluções para a equação dinâmica do formalismo STS. Esta possui uma certa dificuldade devido à presença de uma raiz quadrada de operadores. Para isso, consideramos limites de potencial forte e também de potencial fraco, nos permitindo obter equações aproximadas, que conseguimos solucionar analiticamente. Devido à presença da raiz quadrada, naturalmente surgem operadores integrodiferenciais de ordem não-inteira, que mostraremos no decorrer do texto. Uma vez munidos das soluções para os casos de potencial forte e fraco, podemos considerar como estudo de caso o tunelamento, e comparar com tempos de tunelamento obtidos através do formalismo quântico usual. O tunelamento através de uma barreira é um problema muito antigo, um dos primeiros trabalhos relacionados talvez sendo o de MacColl [68]. A definição exata, aplicabilidade e medida de tempos de tunelamento mudam de acordo com as circunstâncias de interesse: tempos de permanência (dwell times em uma tradução livre), tempos de chegada, tempos assintóticos de fase, tempos de atraso, tempos de salto, entre outros. Não é o foco do nosso trabalho fazer um resumo detalhado de todos, então deixamos as Refs. [13, 66, 67] e suas respectivas referências para os leitores mais interessados. Alguns casos particulares serão mencionados para comparação mais tarde.

Este texto está dividido da seguinte maneira: no Cap. 2, faremos uma breve revisão histórica sobre o cálculo integrodiferencial de ordem não-inteira, também chamado de cálculo fracionário, do qual faremos uso em uma das aproximações de interesse. Focaremos em duas definições de derivadas fracionárias, as derivadas de Caputo e de Riemann-Liouville, e mostraremos alguns casos específicos para comparação, assim como uma breve discussão de derivadas de potências e de constantes.

No Cap. 3, apresentamos uma justificativa baseada na Mecânica Clássica (MC) para a formulação da proposta STS, onde consideramos a *posição* como a variável *independente* e o *tempo* como a variável *dependente*. Mostramos que tal abordagem não afeta os resultados obtidos na MC e que, ao quantizar o problema, obtemos as mesmas relações entre energia e tempo (comutação, princípio de incerteza) e as mesmas equações dinâmicas presentes no formalismo STS. Apresentamos então o formalismo STS da maneira presente no artigo original de Dias e Parisio no Cap. 4, e a discussão de alguns pontos importantes. Aplicamos as já mencionadas aproximações de potencial fraco e forte no Cap. 5, assim como uma discussão sobre o papel da distribuição da energia no valor esperado do tempo, e a relação da incerteza na energia com o surgimento do tempo clássico. Aplicamos nossos resultados para o tempo de tunelamento e de voo para uma barreira retangular, e comparamos com resultados teóricos anteriores e com um experimento de armadilha óptica. No Cap. 6 fazemos nossas considerações finais e apresentamos perspectivas futuras.

capítulo 2

O CÁLCULO FRACIONÁRIO

O cálculo diferencial e integral é essencial para a Física: na MC, com a 2^a Lei de Newton [69], $F = \frac{dp}{dt}$ (em uma dimensão espacial), na Eq. de Schrödinger da MQ [39–41], $\hat{H} |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle$, e entre todas as diferentes áreas da física, as leis geralmente são definidas através de equações diferenciais e integrais que são, em geral, de ordem *inteira*. A teoria do cálculo de ordem não-inteira é, portanto, uma extensão do cálculo diferencial e integral usual, com o intuito de generalizar suas respectivas aplicações. Comentamos a seguir alguns dos pontos principais no desenvolvimento de tal teoria.

O começo do cálculo fracionário talvez tenha se dado com cartas entre Leibniz e L'Hospital, nas quais há a discussão do significado de uma derivada de ordem 1/2. Leibniz escreve que "o significado de d^{1/2}x será igual a $x\sqrt{dx/x}$. Isto é, aparentemente, um paradoxo do qual, um dia, resultados úteis serão obtidos" [70,71].

Liouville expandiu funções em séries de potências e definiu a α -ésima derivada de séries operando termo a termo como se α fosse um número inteiro positivo, substituindo os fatoriais por funções Gamma [72]. Riemann, por sua vez, propôs uma definição que envolvia uma integral definida, a qual poderia ser aplicada para séries de potência com expoentes não-inteiros [73]. Grünwald [74] definiu as derivadas como um limite de um quociente de diferenças, obtendo uma expressão em termos de integrais definidas, assim como Krug [75], cujo trabalho foi realizado a partir da fórmula integral de Cauchy para derivadas ordinárias [76], mostrando que a integral definida por Riemann deveria possuir um limite inferior finito, enquanto que a definição de Liouville correspondia a um limite inferior sendo $-\infty$. A aplicação da teoria diferencial e integral fracionária aconteceu simultaneamente ao seu desenvolvimento, com, por exemplo, os trabalhos de Abel [77, 78] no problema da curva tautocrônica, e de Heaviside com o cálculo operacional [79, 80], desenvolvido para solucionar problemas da teoria eletromagnética, um passo importante para a aplicação das derivadas de ordem generalizada. Porém, no seu início, tais técnicas não foram muito bem vistas pelos pesquisadores mais rigorosos, o que não impediu o avanço do formalismo. Recomendamos, para os leitores mais interessados na história do cálculo não-inteiro, a Ref. [81], que trata com mais completeza do que o breve apanhado que apresentamos aqui.

2.1 Os operadores diferenciais e integrais

Quando vemos o símbolo

$$\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}f(x),\tag{2.1}$$

estamos acostumados a entendê-lo como a *n*-ésima derivada da função f(x) em relação a *x*. Como a derivação é a operação inversa da integração¹, escrevemos a notação

$$\frac{\mathrm{d}^{-1}}{\mathrm{d}x^{-1}}f(x) = \int_0^x \mathrm{d}y \, f(y) \tag{2.2}$$

para representar a integral definida com limite inferior nulo. Generalizando para ordem n, escrevemos

$$\frac{\mathrm{d}^{-n}}{\mathrm{d}x^{-n}}f(x) = \underbrace{\int_0^x \mathrm{d}x_{n-1} \int_0^{x_{n-1}} \mathrm{d}x_{n-2} \dots \int_0^{x_1} \mathrm{d}x_0}_{n \text{ integrais}} f(x_0).$$
(2.3)

Podemos também considerar um limite inferior geral, o que muda a notação para

$$\frac{\mathrm{d}^{-n}}{\mathrm{d}(x-a)^{-n}}f(x) = \int_a^x \mathrm{d}x_{n-1} \int_a^{x_{n-1}} \mathrm{d}x_{n-2} \dots \int_a^{x_1} \mathrm{d}x_0 f(x_0).$$
(2.4)

Quando temos uma integral como na Eq. (2.4), podemos utilizar a fórmula de integrais repetidas de Cauchy [81] ou a regra de Leibniz para diferenciação de integrais repetidas vezes [82] para obter

$$\frac{\mathrm{d}^{-n}}{\mathrm{d}(x-a)^{-n}}f(x) = \frac{1}{(n-1)!} \int_a^x \mathrm{d}y \, (x-y)^{n-1} f(y), \tag{2.5}$$

¹Mais especificamente, é a inversa *pela esquerda* da integração, uma vez que ela difere da integração de uma derivada por uma constante aditiva.

válida para $n \in \mathbb{N}, x \in a \in \mathbb{R}, e x > a$.

Reescrevendo o fatorial presente no lado direito da Eq. (2.5) em termos da função Gamma $\Gamma(z)$ para números naturais, $\Gamma(n) = (n-1)!$, nos perguntamos: o que acontece se fizermos $n \to \alpha \in \mathbb{R}$, já que $\Gamma(z)$ admite argumentos reais? A resposta é que obtemos a primeira definição que utilizaremos no cálculo fracionário:

$$D^{-\alpha}f(x) \equiv \frac{\mathrm{d}^{-\alpha}}{\mathrm{d}(x-a)^{-\alpha}}f(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)}\int_a^x \mathrm{d}y\,(x-y)^{\alpha-1}f(y),\tag{2.6}$$

chamada de Integral de Riemann-Liouville de ordem $\alpha \in \mathbb{R}$ [81,83].

Algumas propriedades úteis:

• No limite em que $\alpha \to 0$, este operador vira a identidade: [81,83,84].

$$\lim_{\alpha \to 0} D^{-\alpha} f(x) = f(x).$$
(2.7)

• A integral de Riemann-Liouville é linear:

$$D^{-\alpha}\left(\lambda f(x) + \sigma g(x)\right) = \lambda D^{-\alpha} f(x) + \sigma D^{-\alpha} g(x).$$
(2.8)

 Podemos compor integrações de Riemann-Liouville: se f(x) é contínua para x ≥ a [83]:

$$D^{-\alpha}\left(D^{-\beta}f(x)\right) = D^{-\beta}\left(D^{-\alpha}f(x)\right) = D^{-(\alpha+\beta)}f(x), \qquad (2.9)$$

para $\lambda, \sigma \in \mathbb{C}, a \in \mathbb{R} \in \alpha, \beta \in \mathbb{R}_+$.

Com a definição da integral de Riemann-Liouville, definimos também a derivada fracionária a seguir. Mostraremos duas definições, a derivada de Riemann-Liouville e a derivada de Caputo [81, 83]. Outras definições existem, como por exemplo a derivada de Riesz, usada na MQ fracionária de Laskin [85–88], mas não faremos uso delas neste trabalho.

Considere múltiplas integrações de ordem inteira, como na Eq. (2.5). Simplificamos a notação de x - a para x, mas devemos sempre lembrar que o limite na integração permanece a qualquer. Ao derivarmos esta expressão m vezes, com m > n, o resultado final deve ser igual à derivada de ordem m - n:

$$\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} \left[\frac{1}{(n-1)!} \int_a^x \mathrm{d}y \, (x-y)^{n-1} f(y) \right] = \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} \left[\frac{\mathrm{d}^{-n}}{\mathrm{d}x^{-n}} f(x) \right] = \frac{\mathrm{d}^{m-n}}{\mathrm{d}x^{m-n}} f(x). \tag{2.10}$$

Reescrevendo a expressão acima com k = m - n, obtemos

$$\frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}x^k}f(x) = \frac{1}{(m-k-1)!} \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} \int_a^x \mathrm{d}y \, (x-y)^{m-k-1} f(y), \tag{2.11}$$

isto é, a derivada de ordem k = m - n. Da mesma forma que fizemos para obter a Eq. (2.6), reescrevendo o fatorial como uma função $\Gamma(z)$ e trocando o argumento de números naturais para números reais, obtemos a expressão para a α -ésima derivada ao fazermos $k \to \alpha$:

$$\frac{\mathrm{d}^{\alpha}}{\mathrm{d}x^{\alpha}}f(x) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)}\frac{\mathrm{d}^{n}}{\mathrm{d}x^{n}}\int_{a}^{x}\mathrm{d}y\,\frac{f(y)}{(x-y)^{\alpha-n+1}}.$$
(2.12)

Trocamos o índice de integração $m \to n$ para manter uniforme a notação. Para α um número natural, a expressão acima deve coincidir com a derivada de ordem inteira. A *derivada de Riemann-Liouville* é definida então, como [81,83]:

$$D^{\alpha}f(x) = \begin{cases} \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{\mathrm{d}^{n}}{\mathrm{d}x^{n}} \int_{a}^{x} \mathrm{d}y \frac{f(y)}{(x-y)^{\alpha-n+1}}, & n-1 < \alpha < n \in \mathbb{N}, \\ \frac{\mathrm{d}^{n}}{\mathrm{d}x^{n}} f(x), & \alpha = n. \end{cases}$$
(2.13)

Similarmente, podemos nos perguntar qual o resultado de derivar primeiro, integrar depois: o resultado é a definição da *derivada de Caputo*² [81, 83]:

$$D_{\mathcal{C}}^{\alpha}f(x) = \begin{cases} \left. \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_{a}^{x} \mathrm{d}y \frac{1}{(x-y)^{\alpha-n+1}} \left. \frac{\mathrm{d}^{n}}{\mathrm{d}x^{n}} f(x) \right|_{x=y}, & n-1 < \alpha < n \in \mathbb{N}, \\ \frac{\mathrm{d}^{n}}{\mathrm{d}x^{n}} f(x), & \alpha = n. \end{cases}$$

$$(2.14)$$

Obviamente, devido à linearidade das derivadas usuais e das integrais de ordem inteira, as definições dadas pelas Eqs. (2.13) e (2.14) também são lineares.

A escolha de qual definição utilizar, em princípio, é arbitrária. Como mostrado no Apêndice A, que trata da transformada de Laplace de derivadas e integrais de ordem nãointeira, condições iniciais para as derivadas de ordem *não-inteira* são necessárias quando a equação diferencial envolve a derivada de Riemann-Liouville (através da transformada de Laplace da equação), enquanto precisamos apenas das condições iniciais para derivadas de ordem *inteira* para problemas envolvendo a derivada de Caputo. Por essa razão, a derivada de Riemann-Liouville parece não ser tão interessante para situações físicas, uma vez que não temos (ainda) uma interpretação física para condições iniciais de derivadas não-inteiras.

 $^{{}^{2}}$ É importante salientar que estas definições para as derivadas de Riemann-Liouville e de Caputo são chamadas de *derivadas à esquerda* na literatura. Podemos também considerar as derivadas *à direita*, que possuem diferentes limites de integração alternados, além da diferença entre os *kernels*. Como, na literatura, estas definições apresentam interpretações de "causalidade" e "retro-causalidade", respectivamente, trabalharemos apenas com a derivada à esquerda.

2.2 Propriedades, principais diferenças e exemplos

Além da diferença em relação às condições iniciais na transformada de Laplace (discutidas no apêndice A), relevantes tanto na resolução de problemas quanto na interpretação física de tais operadores, as derivadas de Riemann-Liouville e Caputo diferem em outros quesitos. Sempre assumimos que as derivadas existem em nossas discussões.

Devido à maneira que as Eqs. (2.13) e (2.14) são escritas, uma derivada de uma integral versus uma integral de uma derivada, as derivadas de Riemann-Liouville e de Caputo não coincidem em geral:

$$D^{\alpha}f(x) \neq D^{\alpha}_{\rm C}f(x). \tag{2.15}$$

Os limites $\alpha \to n$ (teto do valor de α) e $\alpha \to n-1$ (piso do valor de α) também precisam de certo cuidado. Em geral,

$$\lim_{\alpha \to n} D^{\alpha} f(x) = f^{(n)}(x); \qquad (2.16a)$$

$$\lim_{\alpha \to n} D_{\mathcal{C}}^{\alpha} f(x) = f^{(n)}(x); \qquad (2.16b)$$

$$\lim_{\alpha \to n-1} D^{\alpha} f(x) = f^{(n-1)}(x);$$
(2.16c)

$$\lim_{\alpha \to n-1} D_{\rm C}^{\alpha} f(x) = f^{(n)}(x) - f^{(n-1)}(0), \qquad (2.16d)$$

bastando fazer uma integração por partes nas Eqs. (2.13) ou (2.14), para Riemann-Liouville e Caputo [83] respectivamente. Note que aqui possuímos uma propriedade que talvez não seja de interesse de físicos na derivada de Caputo no caso de $\alpha \rightarrow n - 1$, já que os limites laterais $\alpha \rightarrow (n - 1)^+$ e $\alpha \rightarrow (n - 1)^-$ não coincidem em geral, devido à presença do fator $f^{(n-1)}(0)$.

Também devido à maneira com que definimos as derivadas com relação à localização da derivada de ordem inteira, elas não comutam em geral com as derivadas usuais de ordem inteira. Seja $m \in \mathbb{N}$:

$$D^{\alpha}_{\mathcal{C}}D^m f(x) = D^{\alpha+m}_{\mathcal{C}}f(x) \neq D^m D^{\alpha}_{\mathcal{C}}f(x); \qquad (2.17a)$$

$$D^m D^\alpha f(x) = D^{\alpha+m} f(x) \neq D^\alpha D^m f(x), \qquad (2.17b)$$

As expressões acima se tornam igualdades quando

 $f^{(s)}(0) = 0,$ s = n, n + 1, ..., m (Caputo) (2.18a)

$$f^{(s)}(0) = 0,$$
 $s = 0, 1, \dots, m$ (Riemann-Liouville), (2.18b)

onde $f^{(s)}(0)$ é a s-ésima derivada de f(x), aplicada em x = 0. A prova novamente vem de uma integração por partes. Por último, mas não menos importante, a relação entre ambas as derivadas: podemos expressar a derivada de Caputo em termos da derivada de Riemann-Liouville [83]:

$$D_{C}^{\alpha}f(x) = D^{\alpha}f(x) - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{x^{k-\alpha}}{\Gamma(k-\alpha+1)} \left. \frac{d^{k}}{dx^{k}}f(x) \right|_{x=0} = D^{\alpha} \left(f(x) - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{x^{k}}{k!} \left. \frac{d^{k}}{dx^{k}}f(x) \right|_{x=0} \right).$$
(2.19)

Tal relação traz peculiaridades para a derivada de um produto de funções:

$$D^{\alpha}\left[f(x)g(x)\right] = \sum_{k=0}^{\infty} \begin{pmatrix} \alpha \\ k \end{pmatrix} \left[D^{\alpha-k}f(x)\right] \frac{\mathrm{d}^{k}}{\mathrm{d}x^{k}}g(x), \qquad (2.20)$$

para a derivada de Riemann-Liouville, e

$$D_{\rm C}^{\alpha}\left[f(x)g(x)\right] = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\alpha}{k}\right) \left[D^{\alpha-k}f(x)\right] \frac{\mathrm{d}^{k}}{\mathrm{d}x^{k}}g(x) - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{x^{k-\alpha}}{\Gamma(k-\alpha+1)} \left[\frac{\mathrm{d}^{k}}{\mathrm{d}x^{k}}g(x)\Big|_{x=0}\right], \qquad (2.21)$$

para a derivada de Caputo: são somas infinitas. Compare com a regra de Leibniz,

$$\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(f(x)g(x)) = \sum_{k=0}^n \left(\begin{array}{c}n\\k\end{array}\right) \frac{\mathrm{d}^{n-k}}{\mathrm{d}x^{n-k}} f(x) \frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}x^k} g(x), \tag{2.22}$$

onde $\binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!}$, que envolve uma soma de n+1 termos.

Observamos, então, que para as derivadas coincidirem, pela Eq. (2.19), o somatório do lado direito da primeira linha (semelhante a uma série de Taylor, mas truncada),

$$\sum_{k=0}^{n-1} \frac{x^{k-\alpha}}{\Gamma(k-\alpha+1)} \left. \frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}x^k} f(x) \right|_{x=0}$$
(2.23)

deve se anular. Devido à independência linear das potências de x, devemos ter f(x) tal que suas primeiras n - 1 derivadas de ordem inteira sejam nulas quando aplicadas em x = 0.

Alguns exemplos das derivadas de Riemann-Liouville e da derivada de Caputo:

• A derivada de uma constante. Talvez a diferença mais significante entre as duas definições seja a derivada de uma constante. Para a derivada de Caputo,

$$D_{\rm C}^{\alpha}[\text{cte}] = 0, \qquad (2.24)$$

como esperado, ao considerar o cálculo fracionário como uma extensão do cálculo usual. Porém, para a derivada de Riemann-Liouville [83], temos

$$D^{\alpha}[\text{cte}] = \frac{\text{cte}}{\Gamma(1-\alpha)} x^{-\alpha}.$$
(2.25)

A transformada de Laplace da derivada de Caputo precisar de condições iniciais para as derivadas de ordem inteira, como mostrado no apêndice A, assim como a derivada de uma constante ser nula, são as principais razões para usarmos a derivada de Caputo em problemas físicos; as fórmulas parecem mais consistentes com o que esperaríamos, *a priori*, de uma extensão do cálculo usual.

A derivada de potências. Dada a sua importância na derivação de uma função expandida em série de Taylor, também achamos relevante ilustrar as derivadas não-inteiras em potências de x. Note que podemos utilizar a expansão em série de Taylor justamente porque as definições dadas pelas Eqs. (2.13) e (2.14) são lineares. Os resultados são [83]

$$D_{\mathcal{C}}^{\alpha} x^{p} = \begin{cases} \frac{\Gamma(p+1)}{\Gamma(p-\alpha+1)} x^{p-\alpha} = D^{\alpha} x^{p}, & n-1 < \alpha < n, \ p > n-1, \ p \in \mathbb{R}; \\ 0, & n-1 < \alpha < n, \ p \le n-1, \ p \in \mathbb{N}, \end{cases}$$

$$(2.26)$$

para a derivada de Caputo, e

$$D^{\alpha}x^{p} = \frac{\Gamma(p+1)}{\Gamma(p-\alpha+1)}x^{p-\alpha}, \quad n-1 < \alpha < n, \quad p > -1, \quad p \in \mathbb{R},$$
(2.27)

para a derivada de Riemann-Liouville. Estas são exatamente as generalizações da n-ésima derivada de potências de x para a derivada usual,

$$\frac{\mathrm{d}^{n}}{\mathrm{d}x^{n}}x^{p} = \frac{p!}{(p-n)!}x^{p-n},$$
(2.28)

ao fazer a troca do fatorial de inteiros para a função $\Gamma(z)$ correspondente, e $n \to \alpha$.

• Derivadas da exponencial e de funções trigonométricas. Para a função exponencial,

$$D^{\alpha} = D_{\rm C}^{\alpha} = \exp\left[\beta x\right] = \beta^{\alpha} \exp\left[\beta x\right].$$
(2.29)

Em particular, para $\alpha = 1/2$,

$$D_{\rm C}^{1/2} \left[D_{\rm C}^{1/2} \exp\left[\beta x\right] \right] = D_{\rm C}^{1/2} \left[\beta^{1/2} \exp\left[\beta x\right] \right] = \beta \exp\left[\beta x\right] = \frac{\rm d}{{\rm d}x} \exp\left[\beta x\right].$$
(2.30)

Com isso, podemos também calcular as derivadas de $sen(\beta x) = cos(\beta x)$:

$$D_{\rm C}^{\alpha} \left[\operatorname{sen}(\beta x) \right] = D_{\rm C}^{\alpha} \left[\frac{1}{2i} \left(\exp\left(i\beta x\right) - \exp\left(-i\beta x\right) \right) \right]$$
$$= \frac{1}{2i} \left((i\beta)^{\alpha} \exp\left(i\beta x\right) - (-i\beta)^{\alpha} \exp\left(-i\beta x\right) \right)$$
(2.31)

 \mathbf{e}

$$D_{\rm C}^{\alpha}\left[\cos(\beta x)\right] = D_{\rm C}^{\alpha}\left[\frac{1}{2}\left(\exp\left(i\beta x\right) + \exp\left(-i\beta x\right)\right)\right]$$
$$= \frac{1}{2}\left(\left(i\beta\right)^{\alpha}\exp\left(i\beta x\right) + \left(-i\beta\right)^{\alpha}\exp\left(-i\beta x\right)\right).$$
(2.32)

No limite em que $\alpha \rightarrow 1,$ recuperamos os resultados usuais:

$$D_{\rm C}^{\alpha \to 1} \left[\operatorname{sen}(\beta x) \right] = \frac{1}{2i} \left((i\beta)^1 \exp\left(i\beta x\right) - (-i\beta)^1 \exp\left(-i\beta x\right) \right)$$
$$= \frac{\beta}{2} \left(\exp\left(i\beta x\right) + \exp\left(-i\beta x\right) \right)$$
$$= \beta \cos(\beta x) \tag{2.33}$$

е

$$D_{\rm C}^{\alpha \to 1} \left[\cos(\beta x) \right] = \frac{1}{2} \left((i\beta)^1 \exp(i\beta x) + (-i\beta)^1 \exp(-i\beta x) \right)$$
$$= \frac{\beta}{2} \left(i \exp(i\beta x) - i \exp(-i\beta x) \right)$$
$$= -\beta \sin(\beta x), \qquad (2.34)$$

como esperado.

CAPÍTULO 3

_POSIÇÃO COMO VARIÁVEL INDEPENDENTE, OU A EQUAÇÃO DO RELÓGIO ANALÓGICO

Nos livros-texto de MC e MQ, sempre tratamos a variável temporal como independente, e as quantidades de interesse como sendo funções do tempo, como por exemplo (em uma dimensão), posição em função do tempo q(t), velocidade em função do tempo $v(t) \equiv \frac{\mathrm{d}q(t)}{\mathrm{d}t}$, e assim por diante. Escrever a Física dessa maneira é intuitivo, uma vez que gostaríamos de fazer previsões futuras de como partículas e sistemas vão evoluir; então perguntamos, por exemplo: passados 12 min, em que posição a partícula estará, com qual velocidade, etc. Na MC, nada nos impede de perguntar o oposto: perguntar quanto tempo uma partícula levaria para percorrer uma distância l, qual a velocidade que a partícula possuiria nessa posição, entre outras perguntas. Há um certo problema em definir uma função neste caso devido ao fato de esta quantidade não ser unívoca (por exemplo, num lançamento vertical, há dois tempos diferentes nos quais a partícula passa por um determinado ponto q, um na subida, outro na descida). Isso difere da MQ, uma vez que o tempo é um parâmetro de evolução *clássico*, e as quantidades de interesse são escritas como operadores. Uma inversão dessa relação só faria sentido, nesse contexto, se o papel de tempo e posição fossem os mesmos, ambos sendo operadores, ou se fossem trocados: se o tempo fosse um operador, e a posição fosse um parâmetro.

Inspirados no comentário acima, neste capítulo consideraremos a *posição* como a variável independente na MC, para potenciais dependentes apenas da posição, em uma dimensão espacial, e analisaremos suas consequências. Por isso chamamos este capítulo de "A equação do relógio analógico", pois estamos mapeando o tempo em função da posição, como num relógio de ponteiros. Diferentemente de abordagens anteriores [89–93], que consideram o tempo (e em alguns casos, a energia) como variável *dependente* adicional à posição e a velocidade, com uma variável adicional τ servindo como o parâmetro *independente*, aqui simplesmente escrevemos o tempo newtoniano como função da posição. Como uma primeira ilustração, considere a 2^a Lei de Newton para massa *m* constante:

$$F_{\rm res} = m \frac{\mathrm{d}^2 q}{\mathrm{d}t^2} = m\ddot{q},\tag{3.1}$$

onde fica subentendida a dependência temporal de q, e o ponto significa derivada em relação a t. Podemos reescrever \ddot{q} em termos da função inversa. Se q(t) é invertível, vale a expressão q(t(q)) = q, que, ao derivarmos em relação a q, teremos, pela regra da cadeia,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}\left(q(t(q))\right) = \frac{\mathrm{d}q(t(q))}{\mathrm{d}t(q)}\frac{\mathrm{d}(t(q))}{\mathrm{d}q} = 1.$$
(3.2)

Ao derivarmos novamente o lado esquerdo, obtemos

$$\frac{d}{dq} \left[\frac{d}{dq} \left(q(t(q)) \right) \right] = \frac{d}{dq} \left(\frac{dq(t(q))}{dt(q)} \frac{d(t(q))}{dq} \right) \\
= \frac{d}{dq} \left(\frac{dq(t(q))}{dt(q)} \right) \frac{d(t(q))}{dq} + \frac{dq(t(q))}{dt(q)} \frac{d^2(t(q))}{dq^2} \\
= \frac{d}{dq} \left(\frac{dq(t(q))}{dt(q)} \right) \frac{d(t(q))}{dq} \frac{d(t(q))}{dq} \left(\frac{d(t(q))}{dq} \right)^{-1} + \frac{dq(t(q))}{dt(q)} \frac{d^2(t(q))}{dq^2} \\
= \left[\left(\frac{d(t(q))}{dq} \right)^{-1} \frac{d}{dq} \left(\frac{dq(t(q))}{dt(q)} \right) \right] \left[\frac{d(t(q))}{dq} \right]^2 + \frac{dq(t(q))}{dt(q)} \frac{d^2(t(q))}{dq^2} \\
= \left[\frac{d}{dt(q)} \left(\frac{dq(t(q))}{dt(q)} \right) \right] \left[\frac{d(t(q))}{dq} \right]^2 + \frac{dq(t(q))}{dt(q)} \frac{d^2(t(q))}{dq^2} \\
= \frac{d^2q(t(q))}{d(t(q))^2} \left(\frac{d(t(q))}{dq} \right)^2 + \frac{dq(t(q))}{dt(q)} \frac{d^2(t(q))}{dq^2},$$
(3.3)

que é nulo, de acordo com o lado direito da Eq. (3.2). Usamos na equação acima $\frac{dq(t(q))}{dt(q)} =$

$$\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}t(q)} = \left(\frac{\mathrm{d}t(q)}{\mathrm{d}q}\right)^{-1} \cdot \operatorname{Ent}\tilde{a}o,$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q} \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}\left(q(t(q))\right)\right] = 0 \implies \frac{\mathrm{d}^{2}q(t(q))}{\mathrm{d}(t(q))^{2}} = -\frac{\frac{\mathrm{d}^{2}(t(q))}{\mathrm{d}q^{2}}}{\left(\frac{\mathrm{d}t(q)}{\mathrm{d}q}\right)^{3}},$$
(3.4)

ou, escrevendo de forma mais compacta com $t' = \frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}q} \in \dot{q} = \frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}t}$,

$$\ddot{q} = -\frac{t''}{t'^3}.$$
 (3.5)

Note que a derivação considera que existe inversa, que t(q) é diferenciável pelo menos duas vezes, e $t' \neq 0$. A 2^a Lei de Newton fica, então,

$$F_{\rm res} = -m\frac{t''}{t'^3} = -\frac{m}{2}\frac{\rm d}{{\rm d}q} \left[\frac{\partial}{\partial t'}\left(\frac{1}{t'}\right)\right],\tag{3.6}$$

como é fácil de verificar. Integrando a Eq. (3.6), obtemos a solução geral para o tempo em função da posição,

$$t(q) = t(q_0) \pm \int_{q_0}^{q} \mathrm{d}\bar{q} \, \frac{m}{\sqrt{2m\left(\frac{m}{2t_0'^2} + \int_{q_0}^{\bar{q}} \mathrm{d}\bar{\bar{q}} \, F_{\mathrm{res}}\right)}},\tag{3.7}$$

a dependência espacial de $F_{\rm res}$ estando implícita, e identificamos $\frac{m}{2t_0'^2} = \frac{m\dot{q}_0^2}{2}$ (o subíndice 0 significando velocidade temporal t' e velocidade espacial \dot{q} iniciais) como sendo o termo de energia cinética inicial. O termo na raiz quadrada pode ser reescrito de uma maneira mais conveniente se levarmos em conta que

$$-\int_{q_0}^{\bar{q}} \mathrm{d}\bar{\bar{q}} F_{\mathrm{res}} = V(\bar{q}) - V(q_0)$$
(3.8)

para uma força conservativa. Dessa maneira, a quantidade dentro da raiz se torna

$$\frac{m}{2t_0^{\prime 2}} + \int_{q_0}^{\bar{q}} \mathrm{d}\bar{\bar{q}} F_{\mathrm{res}} = \frac{m}{2t_0^{\prime 2}} + V(q_0) - V(\bar{q}) = E_0 - V(\bar{q}), \tag{3.9}$$

onde juntamos os termos iniciais na energia inicial total $E_0 = \frac{m}{2t_0'^2} + V(q_0)$. Assim,

$$t(q) = t(q_0) \pm \int_{q_0}^{q} d\bar{q} \frac{m}{\sqrt{2m (E_0 - V(q))}}$$

= $t(q_0) \pm \int_{q_0}^{q} d\bar{q} \frac{m}{p}$
= $t(q_0) \pm \int_{q_0}^{q} d\bar{q} \frac{1}{\dot{q}}$
= $t(q_0) \pm \int_{q_0}^{q} d\bar{q} t'$, (3.10)

na qual escrevemos $p = m\dot{q} = m/t' = \sqrt{2m(E_0 - V(q))}$, consistente com o esperado quando comparamos, por exemplo, com a distância percorrida entre os instantes t_0 e t por uma partícula com velocidade v(t):

$$q(t) - q(t_0) = \int_{t_0}^t \mathrm{d}\bar{t} \, v(\bar{t}). \tag{3.11}$$

Podemos nos perguntar como fica o formalismo lagrangeano [69] para esta situação, e quais são as equações canônicas envolvendo t e sua variável conjugada canônica. Normalmente, escrevemos

$$S = \int_{t_1}^{t_f} \mathrm{d}t \, L(q, \dot{q}; t), \tag{3.12}$$

sendo a função $L(q, \dot{q}; t) = \frac{m\dot{q}^2}{2} - V(q)$ a lagrangeana não-relativística do sistema e o funcional S a ação clássica. Esta função nos fornece, através do princípio da mínima ação,

$$\delta S = \delta \left[\int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t \, L(q, \dot{q}; t) \right] = 0, \qquad (3.13)$$

a equação de Euler-Lagrange

$$\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) = 0, \qquad (3.14)$$

que nos fornece a dinâmica do problema, sendo equivalente à 2^{a} lei de Newton. Podemos nos perguntar se, no caso que estamos tratando neste capítulo, existe uma lagrangeana $\mathcal{L}(t, t'; q)$ que nos forneça a ação \mathcal{S} e, através do princípio de mínima ação, a equação de Euler-Lagrange equivalente,

$$\delta \mathcal{S} = \delta \int_{q_{i}}^{q_{f}} \mathrm{d}q \,\mathcal{L}(t, t'; q) = 0 \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t'} \right) = 0, \tag{3.15}$$

onde os termos são escritos em termos da variável *independente q*. Se desejarmos que as descrições sejam compatíveis, podemos obter a nova lagrangeana a partir da lagrangeana original através de uma mudança de variáveis:

$$S = \int_{t_{i}}^{t_{f}} dt \left(\frac{m\dot{q}^{2}}{2} - V(q)\right)$$

$$= \int_{q_{i}}^{q_{f}} \frac{dt}{dq} dq \left(\frac{m}{2t'^{2}} - V(q)\right)$$

$$= \int_{q_{i}}^{q_{f}} dq \left(\frac{m}{2t'} - V(q)t'\right)$$

$$= \int_{q_{i}}^{q_{f}} dq \mathcal{L}(t, t'; q)$$

$$= \mathcal{S}, \qquad (3.16)$$

onde identificamos $\mathcal{L}(t, t'; q) = \left(\frac{m}{2t'} - V(q)t'\right)$. Note que $L(q, \dot{q}; t)$ possui unidade de energia, enquanto que $\mathcal{L}(t, t'; q)$ possui unidade de *momentum*. Substituindo esta lagrangeana na equação de Euler-Lagrange,

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t'} \right) = 0, \qquad (3.17)$$

teremos

$$-m\frac{t''}{t'^3} = -\frac{\mathrm{d}V(q)}{\mathrm{d}q},\tag{3.18}$$

ou seja, nos fornecendo novamente a 2ª Lei de Newton, Eq. (3.6), para uma força conservativa $F_{\rm res} = -\frac{\mathrm{d}V(q)}{\mathrm{d}q}$.

Da Eq. (3.17), podemos obter, da mesma maneira que no formalismo usual, o momentum p_t canonicamente conjugado a t. No caso usual, o produto das variáveis canônicas qe p possui unidade de ação. Esperamos, então, que o produto $t p_t$ também tenha unidade de ação; logo, p_t deve ter unidade de energia. Então, pela definição [69],

$$p_t \equiv \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t'} = -\frac{m}{2t'^2} - V(q) = -\mathcal{H}, \qquad (3.19)$$

ou seja, no caso de potenciais independentes do tempo e q como a variável independente, o conjugado canônico do tempo é o *negativo* da energia total. Além disso, no caso independente do tempo, vemos que, através da Eq. (3.17),

$$-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial t'}\right) = \frac{\mathrm{d}\mathcal{H}}{\mathrm{d}q} = 0, \qquad (3.20)$$

ou seja, a energia total é uma constante de movimento na posição.

Com o objetivo de tratar, no Cap. 4, a MQ através desta nova interpretação, podemos passar do formalismo Lagrangeano para o formalismo Hamiltoniano da maneira usual [69]. Da mesma forma que obtemos a função hamiltoniana a partir da lagrangeana através de uma transformada de Legendre,

$$H(q, p; t) = \dot{q}p - L(q, \dot{q}; t),$$
 (3.21)

onde também devemos escrever \dot{q} em termos do *momentum* canonicamente conjugado, podemos obter a hamiltoniana desta interpretação através de uma transformada de Legendre. Primeiro, usamos a relação dada pela Eq. (3.19) para escrever t' em termos de \mathcal{H} :

$$t' = \pm \frac{m}{\sqrt{2m\left[\mathcal{H} - V(q)\right]}} \tag{3.22}$$

(consequentemente, isso é o inverso de v = p/m) e substituímos isso na transformada de Legendre:

$$\mathcal{P}(t, p_t; q) = t' p_t - \mathcal{L}(t, t'; q)$$

$$= -t' \mathcal{H} - \left(\frac{m}{2t'} - V(q)t'\right)$$

$$= \mp \frac{m\mathcal{H}}{\sqrt{2m\left[\mathcal{H} - V(q)\right]}} \mp \frac{m}{2} \frac{\sqrt{2m\left[\mathcal{H} - V(q)\right]}}{m} \pm \frac{V(q)m}{\sqrt{2m\left[\mathcal{H} - V(q)\right]}}$$

$$= \mp \frac{m\left(\mathcal{H} - V(q)\right)}{\sqrt{2m\left[\mathcal{H} - V(q)\right]}} \mp \frac{m}{2} \frac{\sqrt{2m\left[\mathcal{H} - V(q)\right]}}{m}$$

$$= \mp \sqrt{2m\left[\mathcal{H} - V(q)\right]}.$$
(3.23)

Chamamos a Eq. (3.23) de *momentuniana* devido à sua unidade (unidade de *momentum*) e de fazer o papel de hamiltoniana nesta interpretação da MC.

Da mesma forma que no formalismo Hamiltoniano usual, temos as equações de Hamilton:

$$t' = \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial p_t} = -\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \mathcal{H}}; \qquad (3.24a)$$

$$-p'_t = \mathcal{H}' = \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t}; \qquad (3.24b)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} = -\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial q}.$$
(3.24c)

Utilizando a momentuniana, podemos escrever as equações de movimento:

$$t' = \mp \frac{m}{\sqrt{2m \left[\mathcal{H} - V(q)\right]}};\tag{3.25a}$$

$$\mathcal{H}' = \pm \frac{m}{\sqrt{2m \left[\mathcal{H} - V(q)\right]}} \left(\frac{\partial V(q)}{\partial t}\right) = 0, \qquad (3.25b)$$

para potenciais independentes do tempo. Tais equações nos mostram que $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0$ é uma constante de movimento no *espaço*; além disso, t' diverge quando $V(q) = \mathcal{H}_0$: a "velocidade temporal" aumenta (em valor absoluto) drasticamente perto de tal limite, o que é esperado, uma vez que t' é o inverso de \dot{q} , que vai a zero para $V(q) = \mathcal{H}_0$ (sem energia cinética).

Classicamente, como dito anteriormente, os resultados são consistentes com os de livros-texto usuais. Porém, quando consideramos as consequências de tal interpretação na MQ, propriedades diferentes começam a surgir. Em particular, o operador obtido através da quantização da momentuniana, o que chamaremos de *operador momentuniano*, obtido fazendo a troca dos parâmetros \mathcal{H} e t na Eq. (3.23) pelos operadores $\hat{\mathbb{H}} \in \hat{\mathbb{T}}$ (a escrita em negrito matemático para deixar claro que estamos considerando esta interpretação alternativa), é idêntico ao operador de *momentum* independente do tempo de uma proposta recente de uma *extensão* da MQ usual, chamado de formalismo simétrico no espaço-tempo, ou formalismo STS [61,62]. Acreditamos ser mais didático separar este capítulo apenas para uma justificativa da existência do formalismo STS, e dedicar o Cap. 4 para apresentar o formalismo de uma maneira mais completa.

CAPÍTULO 4

___O FORMALISMO SIMÉTRICO NO ESPAÇO-TEMPO DE DIAS-PARISIO

Mesmo com o no-go theorem de Pauli sobre operadores temporais na mecânica [42] (veja o apêndice B para uma versão resumida), tentativas de se incluir e entender um operador tempo na MQ foram feitas no decorrer dos anos. O formalismo STS [61,62], que utilizamos nesta tese, propõe uma extensão da MQ usual, de maneira a simetrizar os papéis de posição-tempo e energia-momentum. Se pudéssemos tratar probabilidades levando em conta a possível existência de um operador tempo na MQ, a probabilidade de encontrarmos uma partícula em uma posição entre q e q + dq, exatamente em um tempo t de precisão arbitrária, deve ser rigorosamente zero, uma vez que o tempo é uma variável contínua. Por outro lado, a quantidade

$$\operatorname{Prob}(q,t) \,\mathrm{d}q \,\mathrm{d}t = f(t) \,|\psi(q,t)|^2 \,\mathrm{d}q \,\mathrm{d}t, \tag{4.1}$$

ou seja, a probabilidade de encontrar a partícula em uma posição entre $q \in q + dq$ em um instante de tempo entre $t \in t + dt$, é bem definida. Na expressão acima, $|\psi(q,t)|^2$ é o módulo quadrado da função de onda usual da MQ, e f(t) é uma função extra, relacionada à incerteza temporal. Tal expressão pode ser dividida em duas partes:

- f(t) dt é a probabilidade da ocorrência de um tempo entre t e t + dt;
- $|\psi(q,t)|^2 dq$ é a probabilidade de encontrar a partícula entre $q \in q + dq$ dado que o relógio marcou t.

Esta interpretação é proveniente da Regra de Bayes [94],

$$\operatorname{Prob}(A|B) = \frac{\operatorname{Prob}(B|A)\operatorname{Prob}(A)}{\operatorname{Prob}(B)},\tag{4.2}$$

onde $\operatorname{Prob}(A)$ $[\operatorname{Prob}(B)]$ é a probabilidade de se observar A [B], e $\operatorname{Prob}(A|B)$ $[\operatorname{Prob}(B|A)]$ é a probabilidade *condicional* de se obter A [B] dado que se observou B [A]. A função f(t), infelizmente, não nos é fornecida com o conhecimento apenas do estado do sistema, mas dependerá de configurações do laboratório, possivelmente da preparação do estado, entre outras coisas.

A proposta do formalismo STS é estender o Espaço de Hilbert da partícula com algumas condições novas, de modo a fornecer a estatística e interpretações sobre questões experimentais cuja MQ usual é incapaz de fornecer através dos métodos usuais.

• Condição 1:

O espaço mínimo necessário para descrevermos uma partícula sem *spin* em uma dimensão espacial é $\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_{pos} \otimes \mathcal{H}_{tempo}$, onde \mathcal{H}_{pos} é o espaço de Hilbert da teoria quântica usual, e \mathcal{H}_{tempo} é o espaço de Hilbert *estendido*, e tão intrínseco ao sistema de interesse quanto \mathcal{H}_{pos} . Em discordância com o mecanismo de Page e Wootters [43–45] (veja o apêndice C para um resumo), onde a "evolução sem evolução" ocorre entre graus de liberdade do *sistema de interesse* evoluindo em relação aos graus de liberdade de um *sistema adicional* que atua como um relógio (o sistema total estando em um estado estacionário), as propriedades e características de \mathcal{H}_{tempo} são intrínsecas *ao sistema de interesse*.

O estado completo do sistema é descrito pelo vetor de estado

$$||\Psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t \,\Psi(q\,\&\,t) \,|q\,t\rangle \in \mathcal{H}_{\mathrm{tot}},\tag{4.3}$$

sendo $|qt\rangle = |q\rangle \otimes |t\rangle$ o ket de "posição" no espaço de Hilbert total, e $\Psi(q \& t)$ é o ket de estado projetado em $\langle qt|$. A notação de ket duplo serve para deixar claro que estaremos tratando posição e tempo na mesma hierarquia, e é diferente da notação de ket duplo $|\Psi\rangle\rangle$ do mecanismo de Page e Wootters, como usado no apêndice C, para deixar mais explícita a diferença entre os formalismos. A função de onda $\Psi(q \& t)$ não é equivalente à função de onda $\psi(q,t)$ da MQ usual, estando relacionada com a densidade de probabilidade no lado esquerdo da Eq. (4.1) através de Prob $(q,t) = |\Psi(q \& t)|^2$. Podemos escrever também a Eq. (4.1) através de

$$\Psi(q \& t) = \psi(q, t) \sqrt{f(t)} \exp\left(i\alpha(q, t)\right) = \phi(t, q) \sqrt{g(q)} \exp\left(i\beta(q, t)\right).$$
(4.4)

Consideramos neste trabalho $\alpha(q,t) = \beta(q,t) = 0$. A segunda igualdade vem da nova interpretação: enquanto $\psi(q,t)$ é a função de onda no espaço usual, $\phi(t,q)$ é a função de onda no espaço *temporal*: dessa forma, novamente através da regra de Bayes [Eq.(4.2)], g(q) dq é a probabilidade da medida ser realizada entre $q \in q + dq$ $e |\phi(t,q)|^2 dt$ é a probabilidade de o relógio marcar um valor entre $t \in t + dt$, dado que a medição está sendo realizada na posição q.

Da mesma maneira que a teoria usual não consegue nos fornecer f(t) em geral, também não conseguimos obter g(q) através apenas do espaço extra do formalismo STS, dependendo novamente da configuração do laboratório, preparação do sistema, etc. Porém, tanto f(t) quanto g(q) não são arbitrárias, devendo satisfazer, pela regra de Bayes, Eq. (4.2),

$$Prob(q,t) \, dq \, dt = f(t) \, |\psi(q,t)|^2 \, dq \, dt = g(q) \, |\phi(t,q)|^2 \, dq \, dt.$$
(4.5)

Em particular, se $f(t) = \delta(t - t_m)$, onde t_m é o tempo em que ocorre a medição, recuperamos a interpretação probabilística usual da MQ. Analogamente, para $g(q) = \delta(q - q_m)$, onde agora q_m é a *posição* em que a medição ocorre, nos permite considerar a posição como um parâmetro clássico com precisão absoluta, assim como na MQ usual o tempo possui precisão absoluta. Devido a esta interpretação probabilística, usaremos a mesma notação do artigo original, $\psi(q,t) \equiv \psi(q|t)$ e $\phi(t,q) \equiv \phi(t|q)$, para deixar mais evidentes os papéis de cada quantidade nas suas respectivas interpretações.

Explicitamos aqui algo importante deste paradigma: em experimentos em que o tempo está fixo de alguma forma (por exemplo, o experimentalista vai checar os resultados apenas após o experimento ser concluído), todos os resultados da MQ podem ser obtidos, em princípio, através do conhecimento da função de onda $\psi(q|t)$. Por outro lado, se não nos importamos com medições de posição, como por exemplo, em experimentos de tempo de chegada (o detector é um objeto clássico com posição e momentum bem definidos para todo instante de tempo em princípio), o formalismo sugere usar a função de onda $\phi(t|q)$ para obter as estatísticas. No caso em que sejam necessárias ambas as condições, devemos usar a função de onda completa $\Psi(q \& t)$.
• Condição 2:

Em analogia aos operadores $\hat{Q} \in \hat{P}$ da MQ usual, e o hamiltoniano $\hat{H}(\hat{Q}, \hat{P}, t)$ escrito em função desses operadores e do parâmetro clássico t, que atuam no espaço \mathcal{H}_{pos} , podemos definir suas contrapartes no espaço de Hilbert temporal. O parâmetro clássico em $\mathcal{H}_{\text{tempo}}$ é q. Para o operador tempo $\hat{\mathbb{T}}$,

$$\hat{\mathbb{T}}\left|t\right\rangle = t\left|t\right\rangle,\tag{4.6}$$

onde $|t\rangle$ é o autovetor de $\hat{\mathbb{T}}$ com autovalor t, de maneira análoga ao operador \hat{Q} na MQ usual. Tais autoestados devem satisfazer $\langle t'|t\rangle = \delta(t-t')$ (relação de ortogonalidade) e $\mathbb{1} = \int dt |t\rangle \langle t|$ (relação de completeza).

Para o análogo do *momentum* na MQ usual, definimos o operador de energia $\hat{\mathbb{H}}$, de maneira semelhante à teoria usual:

$$\left\langle q t \Big| \hat{P} \Big| \Big| \Psi \right\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q} \Psi(q \& t);$$
(4.7a)

$$\left\langle q t \left| \hat{\mathbb{H}} \right| \right| \Psi \right\rangle = +i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(q \& t),$$
(4.7b)

com o sinal positivo colocado *ad hoc*, como feito na Ref. [61]. Podemos obter a mesma definição a partir da discussão do Cap. 3: da quantização de variáveis canônicas, temos $[\hat{\alpha}, \hat{p}_{\alpha}] = i\hbar \mathbb{1}$, sendo $\mathbb{1}$ o operador identidade e α e p_{α} a posição generalizada e seu *momentum* canonicamente conjugado, respectivamente. Isso nos leva, por métodos conhecidos em livros-texto [39–41], a

$$\langle \alpha | \hat{p}_{\alpha} | \psi \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \alpha} \langle \alpha | \psi \rangle .$$
 (4.8)

Assim, para os operadores temporais (que fará o papel de coordenada generalizada) e de energia (que fará o papel de *momentum* canonicamente conjugado), temos $i\hbar \mathbb{1} = [\hat{\mathbb{1}}, \hat{p}_{\mathbb{T}}] = -[\hat{\mathbb{1}}, \hat{\mathbb{H}}]$, nos levando diretamente à Eq. (4.7b), uma vez que o *momentum* canonicamente conjugado a $t \in -\mathcal{H}$. O sinal negativo no comutador de \mathbb{T} e \mathbb{H} também explica o sinal positivo na derivada temporal da equação de Schrödinger,

$$\hat{H} \ket{\psi(t)} = +i\hbarrac{\partial}{\partial t} \ket{\psi(t)}$$
 .

Além disso, também obtemos a relação de incerteza entre energia-tempo diretamente através da relação de comutação:

$$\Delta \mathbb{T} \Delta \mathbb{H} \ge \frac{\hbar}{2}.$$
(4.9)

Importante observar que, assim como não temos $\Delta t \Delta \hat{H} \geq \hbar/2$ na MQ usual, já que t é um parâmetro clássico, não possuímos $\Delta q \Delta \mathbb{P} \geq \hbar/2$ no espaço temporal, já que q é um parâmetro clássico neste espaço.

O análogo do hamiltoniano da MQ usual, o operador de momentum $\hat{\mathbb{P}}^{\pm}(\hat{\mathbb{T}}, \hat{\mathbb{H}}, q)$, é definido através da quantização da Eq. (3.23), fazendo-se a troca

$$\begin{pmatrix} t \\ q \\ \mathcal{H} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \hat{\mathbb{T}} \\ q \\ \hat{\mathbb{H}} \end{pmatrix}.$$
(4.10)

Explicitamente,

$$\hat{\mathbb{P}}^{\pm} \equiv \pm \sqrt{2m(\mathbb{H} - V(q))},\tag{4.11}$$

para potenciais independentes do tempo¹. Este operador terá o papel de gerador da dinâmica em seu respectivo espaço: enquanto na equação de Schrödinger, temos $\hat{H} |\psi(t)\rangle = +i\hbar\partial_t |\psi(t)\rangle$, no STS teremos

$$\hat{\mathbb{P}}^{\pm} |\phi(q)\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q} |\phi(q)\rangle.$$
(4.12)

Esta equação produz a evolução espacial, ou o deslocamento, da função de onda $\phi(t|q)$; compare com o hamiltoniano que, através da equação de Schrödinger e do operador de evolução temporal, produz uma evolução temporal na função de onda $\psi(q|t)$.

Por causa do sinal \pm na definição (4.11), escrevemos

$$\hat{\mathbb{P}} \equiv \sigma_z \sqrt{2m(\mathbb{H} - V(q))},\tag{4.13}$$

que a partir de agora chamaremos de momentuniano, em analogia à função momentuniana da Eq. (3.23) e ao hamiltoniano. O objeto $\hat{\sigma}_z = \text{Diag}(1, -1)$ é uma matriz de Pauli. Também devemos escrever a função de onda como uma matriz coluna,

$$\phi(t|q) \equiv \langle t|\phi(q)\rangle = \begin{pmatrix} \langle t|\phi^+(q)\rangle\\ \langle t|\phi^-(q)\rangle \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \phi^+(t|q)\\ \phi^-(t|q) \end{pmatrix}.$$
(4.14)

¹Na Ref. [61], os autores definem o operador $\hat{\mathbb{P}}^{\pm}$ para potenciais dependentes do tempo como $\hat{\mathbb{P}}^{\pm} \equiv \pm \sqrt{2m \left[\hat{\mathbb{H}} - V(q, \hat{\mathbb{T}})\right]}$. Como nossos resultados a partir da MC só são válidos para potenciais independentes do tempo, preferimos considerar apenas este tipo de potencial.

Com isso, reescrevemos a Eq. (4.12) de forma compacta como

$$\hat{\mathbb{P}} |\phi(q)\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q} |\phi(q)\rangle.$$
(4.15)

Devido à presença de duas componentes, a densidade de probabilidade neste espaço deve ser escrita como $\rho(t|q) = |\phi(t|q)|^2 = \phi^{\dagger}(t|q)\phi(t|q) = |\phi^+(t|q)|^2 + |\phi^-(t|q)|^2$.

Ao projetarmos a Eq. (4.15) em $\langle t |$, obtemos

$$\left\langle t \left| \hat{\mathbb{P}} \right| \phi(q) \right\rangle = \hat{\sigma}_z \sqrt{2m \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - V(q) \right) \phi(t|q)} = i\hbar \frac{\partial}{\partial q} \phi(t|q).$$
(4.16)

Notamos que, em geral, o momentuniano utilizado no STS fornece derivadas de ordem *não-inteira*. Vemos isso explicitamente, por exemplo, para a partícula livre:

$$\sqrt{2mi\hbar\frac{\partial}{\partial t}}\phi(t|q) = \sqrt{2mi\hbar}\sqrt{\frac{\partial}{\partial t}}\phi(t|q) = \sqrt{2mi\hbar}\frac{\partial^{1/2}}{\partial t^{1/2}}\phi(t|q).$$
(4.17)

Com a justificativa a partir da MC que mostramos no Cap. 3, isso acontece *na-turalmente* na interpretação do formalismo STS. Compare com, por exemplo, os trabalhos de Laskin [85–88], onde o autor insere *ad hoc* as derivadas de ordem não-inteira, substituindo a derivada espacial, a derivada temporal, ou ambas.

Para uma aplicação deste formalismo utilizando o valor esperado do operador \tilde{T} como o tempo de chegada de uma partícula e comparação com experimentos, sugerimos a Ref. [62], onde os autores comparam resultados obtidos experimentalmente da Ref. [95], com seu formalismo e resultados obtidos através do Tempo de Fase (*phase time*) e do tempo de Büttiker-Landauer [63–65]. O formalismo STS mostrou um grau muito bom de concordância com os experimentos (para mais detalhes, veja o apêndice D, que explica sobre os tempos de fase e de Büttiker-Landauer, e a Ref. [62], resumida no apêndice E, que explica a comparação feita por Ximenes, Dias e Parisio), e é o principal motivo pelo qual o utilizamos.

4.1 Valores esperados no formalismo simétrico no espaço-tempo

Uma teoria física deve ter uma boa concordância com a vida real para ser de interesse. Na MQ usual, esta conexão é feita pela estatística do experimento e pelo *valor esperado* de um

observável \hat{A} . Este objeto, quando calculado em um estado $|\psi(t)\rangle$, é escrito como [39–41]:

$$\left\langle \hat{A} \right\rangle_{\psi} \equiv \frac{\left\langle \psi(t) \middle| \hat{A} \middle| \psi(t) \right\rangle}{\left\langle \psi(t) \middle| \psi(t) \right\rangle},$$
(4.18)

o subíndice ψ indicando que este valor depende do estado preparado. A expressão acima é equivalente a calcular a média dos resultados de medições do observável \hat{A} em um conjunto (*ensemble*) de sistemas identicamente preparados, dado que a medida ocorreu no tempo t. Chamamos a atenção aqui para o fato de que em geral, não escrevemos o denominador da Eq. (4.18), uma vez que a função de onda é normalizada à unidade e o hamiltoniano preserva a normalização na evolução temporal, devido à sua hermiticidade (a evolução é *unitária*). A normalização ser constante pode ser interpretada, como argumentam os autores da Ref. [62], da seguinte maneira: a partícula descrita pelo estado $|\psi(t)\rangle$ deve existir em alguma posição, independente de qual instante de tempo o experimento ocorre. Qual posição, especificamente, é irrelevante, basta que ela exista em alguma.

Da mesma forma, podemos calcular o valor esperado de um operador que atua no espaço de Hilbert temporal $\mathcal{H}_{\text{tempo}}$. Se o sistema é descrito pelo estado $|\phi(q)\rangle$, o valor esperado do operador $\hat{\mathbb{B}}$ é dado por

$$\left\langle \hat{\mathbb{B}} \right\rangle_{\phi} \equiv \frac{\left\langle \phi(q) \middle| \hat{\mathbb{B}} \middle| \phi(q) \right\rangle}{\left\langle \phi(q) \middle| \phi(q) \right\rangle}.$$
 (4.19)

A discussão aqui fica mais delicada: o objeto no denominador, $\langle \phi(q) | \phi(q) \rangle$, é relacionado à densidade de probabilidade de medirmos uma partícula num *tempo* qualquer, dado que a medida esteja acontecendo em uma posição q, com precisão arbitrária. Considere, por exemplo, um elétron passando por uma dupla fenda. Existem pontos $q_{\text{proibidos}}$ que são proibidos²; a existência de franjas escuras em um anteparo, após um número muito grande de repetições, demonstra isso. Para estes pontos, então, $\langle \phi(q_{\text{proibidos}}) | \phi(q_{\text{proibidos}}) \rangle = 0$, e temos uma das principais diferenças entre a dinâmica no espaço de Hilbert espacial e do espaço de Hilbert temporal: enquanto por um lado, sempre encontraremos a partícula em alguma posição, independente do tempo do experimento (interpretação usual), por outro, nem sempre encontraremos a partícula em algum instante de tempo, dependendo da posição em que estamos (interpretação STS). Em geral, $\langle \phi(q) | \phi(q) \rangle \neq$ cte.

Matematicamente, podemos calcular as variações em relação aos seus respectivos pa-

² Neste exemplo, os pontos $q_{\rm proibidos}$ são os nós da função de
onda usual.

râmetros clássicos:

$$-i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q} \left(\langle \phi(q) | \phi(q) \rangle \right) = \left(\langle \phi(q) | \hat{\mathbb{P}}^{\dagger} \right) | \phi(q) \rangle - \langle \phi(q) | \left(\hat{\mathbb{P}} | \phi(q) \rangle \right) \\ = \left\langle \phi(q) | \left(\hat{\mathbb{P}}^{\dagger} - \hat{\mathbb{P}} \right) | \phi(q) \rangle, \qquad (4.20)$$

que não é necessariamente nula, uma vez que $\hat{\mathbb{P}}$ não é, em geral, um operador hermitiano. Logo, a evolução espacial não é, em geral, uma operação unitária. Compare com o análogo na MQ usual:

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left(\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle \right) = \left(\langle \psi(t) | \hat{H}^{\dagger} \right) | \psi(t) \rangle - \langle \psi(t) | \left(\hat{H} | \psi(t) \rangle \right) \\ = \left\langle \psi(t) | \left(\hat{H}^{\dagger} - \hat{H} \right) | \psi(t) \rangle \\ = 0, \qquad (4.21)$$

pela hermiticidade do hamiltoniano. Então, a evolução temporal é unitária, e preserva a normalização.

capítulo 5

APLICAÇÃO DO FORMALISMO STS

Como discutido no capítulo anterior, para experimentos onde, por exemplo, temos precisão arbitrária na posição $[g(x) = \delta(x-x_m)]$ (que será o caso no decorrer do nosso trabalho), podemos utilizar apenas o formalismo STS, isto é, a estatística relevante é proveniente do vetor de estado $|\phi(q)\rangle$. Toda a evolução necessária será obtida a partir da Eq. (4.12). Resolver tal equação, para um potencial genérico, é extremamente complicado, devido à presença da raiz quadrada na definição da momentuniana, Eq. (3.23), e por consequência, do momentuniano, Eq. (4.13). Para os propósitos do nosso trabalho, consideramos dois limites para expandirmos o momentuniano: um limite de potencial fraco e outro de potencial forte.

5.1 Potencial fraco

Partindo da momentuniana, considere que $V(q) \ll \mathcal{H}$, ou seja, praticamente toda a energia da partícula está na energia cinética. Podemos, então, expandir em série de Taylor até primeira ordem, de maneira que

$$\mathcal{P} = \pm \sqrt{2m\left(\mathcal{H} - V(q)\right)} \simeq \pm \sqrt{2m\mathcal{H}} \left(1 - \frac{1}{2}\frac{V(q)}{\mathcal{H}}\right),\tag{5.1}$$

onde usamos $\sqrt{1+\lambda} \simeq 1 + \lambda/2$ para λ suficientemente pequeno, e $\lambda = V(q)/\mathcal{H}$. Ao quantizarmos esta momentuniana, obtemos

$$\hat{\mathbb{P}} \simeq \hat{\sigma}_z \sqrt{2m\hat{\mathbb{H}}} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{V(q)}{\hat{\mathbb{H}}} \right) = \hat{\sigma}_z \sqrt{2m} \left(\hat{\mathbb{H}}^{1/2} - \frac{1}{2} \frac{V(q)}{\hat{\mathbb{H}}^{1/2}} \right).$$
(5.2)

Se o potencial dependesse do tempo, deveríamos, possivelmente, precisar fazer uma simetrização devido à não-comutatividade de \hat{H} com \hat{T} . Como nesta tese só utilizamos potenciais independentes do tempo, por ora não há a necessidade de nos preocuparmos com isso.

Quando projetados em $\langle t|$, os operadores $\hat{\mathbb{H}}^{1/2} \in 1/\hat{\mathbb{H}}^{1/2} = \hat{\mathbb{H}}^{-1/2}$ nos fornecem derivadas e integrais *fracionárias* de ordem 1/2, respectivamente. Estes operadores foram discutidos no Cap. 2. Utilizaremos, para a derivada de ordem 1/2, a derivada de Caputo¹ e a integral de Riemann-Liouville [81, 83]. Então, a equação da "dinâmica", quando projetada, se escreve

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial q}\phi(t|q) = \hat{\sigma}_z\sqrt{2mi\hbar}\frac{\partial^{1/2}}{\partial t^{1/2}}\phi(t|q) - \hat{\sigma}_z\sqrt{\frac{m}{2mi\hbar}}V(q)\frac{\partial^{-1/2}}{\partial t^{-1/2}}\phi(t|q).$$
(5.3)

Esta equação diferencial parcial fracionária pode ser resolvida por diversos métodos, por exemplo, pela transformada de Laplace de derivadas e integrais de ordem não-inteira. Por ora, focaremos em um potencial constante $V(q) = V_0$, que será o potencial utilizado na Seção 5.3.

Após multiplicarmos a Eq. (5.3) por $\hat{\sigma}_z$, escrevemos $\phi^{\pm}(t|q) = F^{\pm}(t)G^{\pm}(q)$ e fazemos uma separação de variáveis. Então, a Eq. (5.3) fornece duas expressões,

$$p G^{\pm}(q) = \mp i\hbar \partial_q G^{\pm}(q); \qquad (5.4a)$$

$$p F^{\pm}(t) = \sqrt{2m} \left[\sqrt{i\hbar} \partial_t^{1/2} - \frac{V_0}{2\sqrt{i\hbar}} \partial_t^{-1/2} \right] F^{\pm}(t), \qquad (5.4b)$$

p sendo a constante de separação, e fizemos uso da linearidade das derivadas e integrais. Notamos que $F^+(t)$ e $F^-(t)$ satisfazem as mesmas equações; portanto, sem perda de generalidade, podemos considerar $F^+(t) = F^-(t) = F(t)$.

Para solucionar as Eqs. (5.4a) e (5.4b), usamos os ansätze

$$G^{\pm} \propto \exp\left[\pm \frac{i}{\hbar} pq\right]$$
 (5.5a)

$$F(t) \propto \exp\left[-i\omega t\right],$$
 (5.5b)

¹Na nossa opinião, a derivada fracionária de Caputo tem uma interpretação física mais adequada. Em primeiro lugar, a derivada de uma constante é nula, como discutido no Cap. 2. Em segundo lugar, a extensão da transformada de Laplace para ordens não-inteiras é direta e a transformada de Laplace requer apenas condições iniciais de ordem inteira, como podemos ver no apêndice A, que são mais familiares para os físicos.

junto com a propriedade da derivada de ordem não-inteira da exponencial,

$$\frac{\partial^{\alpha}}{\partial t^{\alpha}} \exp\left[\beta t\right] = \beta^{\alpha} \exp\left[\beta t\right],\tag{5.6}$$

para obter, através da parte temporal, a relação de dispersão

$$p = \sqrt{2m\hbar\omega} \left(1 - \frac{V_0}{2\hbar\omega}\right). \tag{5.7}$$

Esta é justamente a expansão em série de Taylor em primeira ordem do *momentum* de uma partícula com energia $E = \hbar \omega$ sujeita a um potencial V_0 . Então, na aproximação de potencial fraco, o *momentum* no formalismo STS é consistente com resultados conhecidos da MC e da MQ.

Reescrevendo $p = \sqrt{2m\hbar\omega} \left(1 - \frac{V_0}{2\hbar\omega}\right) \simeq \sqrt{2m(E - V_0)}$, resolvemos esta equação para E, no limite de potencial fraco, para obter

$$E \simeq \frac{p^2}{2m} + V_0.$$
 (5.8)

Por completeza, como o potencial nulo está dentro deste limite, podemos mostrar o exemplo para V(q) = 0, e obtemos o resultado exato

$$\phi^{\pm}(t|q) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t \pm \frac{i}{\hbar}pq\right],\tag{5.9}$$

que é idêntico à função de onda $\psi(q|t)$ para a partícula livre da MQ usual, também obtido pelos autores na Ref. [61].

5.2 Potencial forte

Por outro lado, podemos considerar uma expansão em série de Taylor da momentuniana, dada pela Eq. (3.23), no limite de potencial forte, $V(q) \gg \mathcal{H}$. Teremos, então:

$$\mathcal{P} = \pm \sqrt{2m\left(\mathcal{H} - V(q)\right)} \simeq \sqrt{-2mV(q)} \left[1 - \frac{\mathcal{H}}{2V(q)}\right],\tag{5.10}$$

que, ao ser quantizada e projetada em $\langle t|$, nos fornece

$$\sqrt{-2mV(q)} \left[1 - \frac{i\hbar}{2V(q)} \frac{\partial}{\partial t} \right] \phi(t|q) = -\hat{\sigma}_z i\hbar \frac{\partial}{\partial q} \phi(t|q).$$
(5.11)

Curiosamente, dentro desta aproximação, a intensidade do potencial suprime os efeitos fracionários e a ordem da derivada temporal é a mesma da derivada espacial, iguais à

unidade. Escrevendo novamente $\phi^{\pm}(t|q) = F^{\pm}(t)G^{\pm}(q)$ e separando as equações, obtemos

$$\pm i\hbar \frac{\partial}{\partial q} G^{\pm}(q) = \sqrt{\frac{-m}{2V(q)}} \left[E - 2V(q) \right] G^{\pm}(q); \qquad (5.12a)$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}F^{\pm}(t) = EF^{\pm}(t), \qquad (5.12b)$$

válida para potenciais genéricos, e E é a constante de separação. Novamente, a equação envolvendo apenas o tempo tem a mesma forma para $F^+(t) \in F^-(t)$, então consideramos $F^+(t) = F^-(t) = F(t)$. A solução para a Eq. (5.12b) é trivial, nos fornecendo

$$F(t) \propto \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right),$$
 (5.13)

possuindo a mesma forma da solução temporal para o potencial fraco, Eq. (5.5b).

Para a parte espacial, vale lembrar que estamos no limite de potencial forte: podemos reescrever o termo do lado direito da Eq. (5.12a) como

$$\sqrt{\frac{-m}{2V(q)}} \left[E - 2V(q) \right] \simeq -\sqrt{2m(E - V(q))},$$
(5.14)

o que nos leva a escrever

$$\pm i\hbar \frac{\partial}{\partial q} G^{\pm}(q) = -\sqrt{2m(E - V(q))} G^{\pm}(q), \qquad (5.15)$$

que possui solução do tipo

$$G^{\pm}(q) = \exp\left[\pm\frac{i}{\hbar}\int_{q_0}^q \mathrm{d}q'\sqrt{2m(E-V(q'))}\right] = \exp\left(\pm\frac{i}{\hbar}\bar{S}(E,q)\right),\tag{5.16}$$

com q_0 dependendo das condições de contorno do problema, e $\overline{S}(E,q)$ é a ação clássica abreviada [96], relacionada com a ação clássica usual através de uma transformada de Legendre,

$$S(q,t) = \bar{S}(E,q) - Et.$$
 (5.17)

Como um exemplo, considere o potencial constante, $V(q) = V_0$. A menos de uma constante multiplicativa,

$$G^{\pm}(q) = \exp\left[\pm \frac{i}{\hbar}pq\right],$$
 (5.18)

sendo $p = \sqrt{2m(E - V_0)} \in \mathbb{C}$ o momentum da partícula, um imaginário puro, consistente com relações de energia-momentum conhecidos da MC e MQ para uma partícula com energia E sujeita a um potencial V_0 , dentro da barreira. Gostaríamos de notar que essa relação entre energia e *momentum* foi obtida a partir do próprio formalismo. Na Ref. [62], os autores utilizam, nas Eqs. (22) e (23), esta relação por analogia com o coeficiente de transmissão obtido através da equação de Schrödinger. A Eq. (5.16) confirma esse uso.

5.3 Resultados

5.3.1 Tempo de voo e tempo de tunelamento

Apenas com o valor esperado de $\langle \mathbb{T} \rangle (q)$ não podemos obter predições de tempos de voo e de tunelamento. Assim como fazemos para medir uma distância, precisamos saber onde está o zero da "régua" temporal. Desta maneira, seguindo a Ref. [62], definimos

$$T_{\text{STS}}\left(q_{i} \to q_{f}\right) = \left\langle \mathbb{T} \right\rangle\left(q_{f}\right) - \left\langle \mathbb{T} \right\rangle\left(q_{i}\right) \tag{5.19}$$

como sendo o tempo médio que a partícula leva para sair de uma posição q_i para chegar numa posição q_f .

Um comentário importante precisa ser feito sobre a Eq. (5.19). Alguns trabalhos, como por exemplo a Ref. [97], comentam que a pergunta "quanto tempo um objeto quântico demora para tunelar através da barreira?" é má-colocada, uma vez que não é possível, em geral, demarcar as regiões de tunelamento e de não-tunelamento, exceto para barreiras quadradas: para um pacote de onda numa barreira gaussiana, por exemplo, um determinado ponto q_1 terá energias acima e abaixo da barreira diferentes de um outro ponto q_2 . Além disso, ao considerar um pacote, haverá dispersão, então "chegar" pode se referir a parte do pacote, sempre havendo informação parcial. Os autores argumentam, então, que a pergunta correta é "quanto tempo a partícula quântica demora para atravessar a barreira?". A Eq. (5.19) é ainda mais genérica, uma vez que ela simplesmente pergunta "qual é o tempo médio para uma partícula se mover de q_i a q_f ", e isso inclui tanto barreiras retangulares como barreiras genéricas, como por exemplo a barreira gaussiana da Ref. [98] (veja o apêndice F), além de não tratar apenas do tunelamento, mas também de tempos de voo. Expressões como o tempo de fase e o tempo de Larmor são aplicadas a ondas monocromáticas (isto é, uma componente energética apenas) |13,61,64,66,97|, enquanto, em princípio, a Eq. (5.19) é genérica, podendo ser usada tanto para ondas monocromáticas quanto para pacotes de onda (assim como, por exemplo, o tempo de voo de tunelamento² da Ref. [97]).

As soluções que nos levarão às Eqs. (5.43) e (5.45), junto com $F(t) = \exp(-iEt/\hbar)$, são autofunções do momentuniano, Eq. (4.13), com autovalores $p = \sqrt{2mE}$ fora da região espacial da barreira ou $p = \sqrt{2m(E - V_0)}$ dentro da região espacial da barreira. Quando preparamos sistemas para experimentos na MQ usual, geralmente o descrevemos utilizando um *pacote de onda*, através de uma combinação linear de autofunções do hamiltoniano \hat{H} . Da mesma maneira, uma vez que $\hat{\mathbb{P}}$ é um operador linear, combinações lineares de soluções da Eq. (4.12) também são soluções da mesma equação. Então, as componentes do pseudo-spinor $\phi(t|q)$ que utilizaremos são

$$\phi^{\pm}(t|q) = \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \, C_E^{\pm} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right) G^{\pm}(E,q), \qquad (5.20)$$

onde os limites E_{\min} e E_{\max} precisam respeitar as aproximações de potencial fraco/forte, e C_E^{\pm} é a distribuição de energia. Mudamos a notação de $G^{\pm}(q)$ para $G^{\pm}(E,q)$ para explicitar sua dependência energética. Estamos cometendo um abuso de notação utilizando o mesmo símbolo $\phi^{\pm}(t|q)$ (que utilizamos para as autofunções de $\hat{\mathbb{P}}$) para o pacote de onda, mas como a partir de agora só trataremos o pacote de onda, esperamos que não haja confusão. Também não escreveremos mais os limites da integração, mas sempre devemos levar em conta de que E_{\min} e E_{\max} precisam respeitar os limites que levam às Eqs. (5.3) e (5.11).

Usando a relação de completeza $\mathbbm{1}=\int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}t~|t\rangle\langle t|,$ escrevemos o valor esperado de $\hat{\mathbbm{1}}$ como[61,62]

$$\left\langle \hat{\mathbb{T}} \right\rangle(q) = \frac{\left\langle \phi(q) \middle| \hat{\mathbb{T}} \middle| \phi(q) \right\rangle}{\langle \phi(q) \middle| \phi(q) \rangle} \\ = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dt \, t \, \rho(t|q)}{\int_{-\infty}^{\infty} dt \, \rho(t|q)},$$
 (5.21)

onde

$$\rho(t|q) = \phi^{\dagger}(t|q)\phi(t|q)
= \left| \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE C_{E}^{+} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) G^{+}(E,q) \right|^{2}
+ \left| \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE C_{E}^{-} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) G^{-}(E,q) \right|^{2}.$$
(5.22)

 $^{^2 \}mathrm{Tradução}$ livre de "Tunneling Flight Time".

A Eq. (5.21) tem uma forma muito similar com, por exemplo, a Eq. (4) combinada com a Eq. (3) da Ref. [97]:

$$P(Y,t) = \frac{|\psi(Y,t)|^2}{\int_0^\infty dt \ |\psi(Y,t)|^2}$$
(Eq. (3), Ref. [97])

е

$$\langle t \rangle = \int_0^\infty dt \, t P(Y, t),$$
 (Eq. (4), Ref. [97])

com algumas diferenças. Primeiro, as Eqs (3) e (4) da Ref. [97] possuem limites de integração de 0 a ∞ , significando que a partícula chega na posição inicial (o início da barreira) no instante t = 0. A Eq. (5.21) possui limites de integração de $-\infty$ a ∞ , provenientes da relação de completeza. Segundo, a posição do detector Y é muito distante da região da barreira, e o tempo de voo é obtido ao comparar a evolução *com* a barreira *versus* a evolução *sem* a barreira. A Eq. (5.19) é arbitrária, uma vez que no formalismo STS a posição é considerada um parâmetro clássico, como discutido no Cap. 4.

Para facilitar o cálculo do valor esperado proveniente da Eq. (5.21), podemos considerar separadamente o numerador $N \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt \, t \, \rho(t|q)$ e o denominador $D \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt \, \rho(t|q)$. Para o numerador, temos:

$$N \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt \, t \, \rho(t|q)$$

$$= \sum_{r=\pm} \int_{-\infty}^{\infty} dt \, t \left| \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \, C_E^r \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right) G^r(E,q) \right|^2$$

$$= \sum_{r=\pm} \int_{-\infty}^{\infty} dt \, t \left[\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \, C_E^r \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right) G^r(E,q) \right]$$

$$\times \left[\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} d\bar{E} \, C_{\bar{E}}^r \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \bar{E}t\right) G^r(\bar{E},q) \right]^*, \qquad (5.23)$$

onde a barra significa mudar $E \to \overline{E}$ e o símbolo * denota conjugação complexa. A integral em t pode ser reescrita como

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t \, t \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \left(E - \bar{E}\right) t\right] = -2\pi i \hbar^2 \frac{\partial}{\partial \bar{E}} \delta(\bar{E} - E), \tag{5.24}$$

onde usamos

$$t \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(E-\bar{E}\right)t\right] = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\bar{E}}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(E-\bar{E}\right)t\right],\tag{5.25}$$

como pode ser facilmente verificado, e a representação integral da Delta de Dirac [99],

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p \, \exp\left[ip(x-a)\right] = 2\pi\delta(x-a). \tag{5.26}$$

Com isso, o numerador é escrito como:

$$N = -2\pi i\hbar^2 \sum_{r=\pm} \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} d\bar{E} C_E^r G^r(E,q) C_{\bar{E}}^{r*} G^{r*}(\bar{E},q) \frac{\partial}{\partial\bar{E}} \delta(\bar{E}-E).$$
(5.27)

Integrando por partes, fazendo $u = C_{\bar{E}}^{r*}G^{r*}(\bar{E},q), \, \mathrm{d}v = \partial_{\bar{E}}\delta(\bar{E}-E)\mathrm{d}\bar{E}, \, \mathrm{teremos}$

$$N = -2\pi i\hbar^{2} \sum_{r=\pm} \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \ C_{E}^{r} G^{r}(E,q) \left[C_{\bar{E}}^{r*} G^{r*}(\bar{E},q) \delta(\bar{E}-E) \Big|_{\bar{E}=E_{\min}}^{E_{\max}} \right] + 2\pi i\hbar^{2} \sum_{r=\pm} \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \ C_{E}^{r} G^{r}(E,q) \left[\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} d\bar{E} \ \delta(\bar{E}-E) \frac{\partial}{\partial \bar{E}} \left[C_{\bar{E}}^{r*} G^{r*}(\bar{E},q) \right] \right] = -2\pi i\hbar^{2} \sum_{r=\pm} \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \ C_{E}^{r} G^{r}(E,q) \left[C_{E_{\max}}^{r*} G^{r*}(E_{\max},q) \delta(E_{\max}-E) \right] + 2\pi i\hbar^{2} \sum_{r=\pm} \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \ C_{E}^{r} G^{r}(E,q) \left[C_{E_{\min}}^{r*} G^{r*}(E_{\min},q) \delta(E_{\min}-E) \right] + 2\pi i\hbar^{2} \sum_{r=\pm} \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \ C_{E}^{r} G^{r}(E,q) \frac{\partial}{\partial E} \left[C_{E}^{r*} G^{r*}(E,q) \right] = -\pi i\hbar^{2} \sum_{r=\pm} \left[\left| C_{E_{\max}}^{r} G^{r}(E_{\max},q) \right|^{2} - \left| C_{E_{\min}}^{r} G^{r}(E_{\min},q) \right|^{2} \right] + 2\pi i\hbar^{2} \sum_{r=\pm} \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \ C_{E}^{r} G^{r}(E,q) \frac{\partial}{\partial E} \left[C_{E}^{r*} G^{r*}(E,q) \right] ,$$
(5.28)

onde usamos

$$\int_0^a \mathrm{d}z \, f(z)\delta(z) = \int_{-a}^0 \mathrm{d}z \, f(z)\delta(z) = \frac{1}{2}f(0). \tag{5.29}$$

Os termos integrados na Eq. (5.28) podem ser reescritos se fizermos a antiderivada do diferencial do módulo quadrado. Escreva $h(E) = C_E^r G^r(E,q)$:

$$\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \mathrm{d}\left[h(E)h^{*}(E)\right] = \left|h(E_{\max})\right|^{2} - \left|h(E_{\min})\right|^{2}$$
$$= \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \mathrm{d}\left[h(E)\right]h^{*}(E) + \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \mathrm{d}\left[h^{*}(E)\right]h(E)$$
$$= \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \mathrm{d}E \frac{\partial h(E)}{\partial E}h^{*}(E) + \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \mathrm{d}E \frac{\partial h^{*}(E)}{\partial E}h(E).$$
(5.30)

O termo $\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \frac{\partial h^*(E)}{\partial E} h(E)$ é exatamente a integral não calculada na Eq. (5.28). Portanto,

$$N = \pi i \hbar^2 \sum_{r=\pm} \left[\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \, C_E^r G^r(E,q) \frac{\partial}{\partial E} \left[C_E^{r*} G^{r*}(E,q) \right] \right] - \pi i \hbar^2 \sum_{r=\pm} \left[\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \, C_E^{r*} G^{r*}(E,q) \frac{\partial}{\partial E} \left[C_E^r G^r(E,q) \right] \right],$$

ou ainda, usando a propriedade de que

$$C_{E}^{r*}G^{r*}(E,q)\partial_{E}\left[C_{E}^{r}G^{r}(E,q)\right] = \left[C_{E}^{r}G^{r}(E,q)\partial_{E}\left[C_{E}^{r*}G^{r*}(E,q)\right]\right]^{*},$$

e $z - z^* = 2i \operatorname{Im}(z)$, teremos

$$\begin{split} N &= \pi i \hbar^2 \sum_{r=\pm} \left[\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \, C_E^r G^r(E,q) \frac{\partial}{\partial E} \left[C_E^{r*} G^{r*}(E,q) \right] \right] \\ &- \pi i \hbar^2 \sum_{r=\pm} \left[\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \, C_E^{r*} G^{r*}(E,q) \frac{\partial}{\partial E} \left[C_E^r G^r(E,q) \right] \right] \\ &= \pi i \hbar^2 \sum_{r=\pm} \left[\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \, C_E^r G^r(E,q) \frac{\partial}{\partial E} \left[C_E^{r*} G^{r*}(E,q) \right] \right] \\ &- \pi i \hbar^2 \sum_{r=\pm} \left[\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \, \left[C_E^r G^r(E,q) \frac{\partial}{\partial E} \left[C_E^{r*} G^{r*}(E,q) \right] \right]^* \right] \\ &= -2\pi \hbar^2 \sum_{r=\pm} \operatorname{Im} \left[\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \, C_E^r G^r(E,q) \frac{\partial}{\partial E} \left[C_E^{r*} G^{r*}(E,q) \right] \right]. \end{split}$$

Com um raciocínio similar, o denominador se torna

$$D = 2\pi\hbar \sum_{r=\pm} \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \ |C_E^r G^r(E,q)|^2, \qquad (5.31)$$

o que finalmente nos fornece

$$\left\langle \hat{\mathbb{T}} \right\rangle(q) = -\hbar \frac{\sum_{r=\pm} \operatorname{Im} \left[\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \, C_E^r G^r(E,q) \frac{\partial}{\partial E} \left[C_E^r G^r(E,q) \right]^* \right]}{\sum_{r=\pm} \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \, \left| C_E^r G^r(E,q) \right|^2}, \quad (5.32)$$

sempre lembrando que os limites das integrais em E devem respeitar os limites de potencial fraco ou forte nas suas respectivas regiões. Obtemos, assim, a receita para calcular tempos médios de voo e tunelamento para potenciais constantes suficientemente fortes/fracos, dependendo da região. Em particular, no caso que estudaremos,

$$T_{\rm STS}(0 \to L) = \left\langle \hat{\mathbb{T}} \right\rangle(L) - \left\langle \hat{\mathbb{T}} \right\rangle(0), \qquad (5.33)$$

para uma barreira localizada entre q = 0 e q = L.

Podemos obter um entendimento melhor da Eq. (5.32), ao expandirmos a integral no numerador. Usando a regra do produto,

$$\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \, C_E^r G^r(E,q) \frac{\partial}{\partial E} \left[C_E^r G^r(E,q) \right]^* = \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \, C_E^r G^r(E,q) C_E^{r*} \frac{\partial}{\partial E} G^{r*}(E,q) + \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \, C_E^r G^r(E,q) G^{r*}(E,q) \frac{\partial}{\partial E} C_E^{r*} = \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \, |C_E^r|^2 \, G^r(E,q) \frac{\partial}{\partial E} G^{r*}(E,q) + \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \, C_E^r |G^r(E,q)|^2 \frac{\partial}{\partial E} C_E^{r*}.$$
(5.34)

Para distribuições de energia C_E^r reais, a integral envolvendo $\frac{\partial}{\partial E} C_E^{r*}$ é real, e não contribui para a Eq. (5.32). Portanto, precisamos nos preocupar apenas com a integral envolvendo $\frac{\partial}{\partial E} G^{r*}(E,q)$. Neste caso, utilizando a Eq. (5.16) para escrever $G^r(E,q)$,

$$\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE |C_E^r|^2 G^r(E,q) \frac{\partial}{\partial E} G^{r*}(E,q) = \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE |C_E^r|^2 |G^r(E,q)|^2 \frac{\partial}{\partial E} \left(r \frac{i}{\hbar} \bar{S}(E,q)\right)^*$$
$$= -\frac{ri}{\hbar} \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE |C_E^r|^2 |G^r(E,q)|^2 \frac{\partial}{\partial E} \left[\bar{S}(E,q)\right]^*$$
$$= -\frac{ri}{\hbar} \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE |C_E^r|^2 |G^r(E,q)|^2 T_{class}^*, \quad (5.35)$$

onde $T_{\text{class}} = \frac{\partial}{\partial E} \left[\bar{S}(E,q) \right]$ é o tempo clássico, que é real para energias acima da barreira e imaginário para energias abaixo da barreira. Ao utilizarmos a Eq. (5.35) na Eq. (5.32), observamos que, se a partícula possui energias abaixo da barreira, T_{class} é um imaginário puro, de modo que a integral acima não contribui para o valor esperado do tempo. Logo, para o tunelamento, o valor esperado de tempo de tunelamento é nulo.

Por outro lado, para energias acima da barreira, T_{class} é real, e a Eq. (5.32) se torna

$$\left\langle \hat{\mathbb{T}} \right\rangle (q) = -\hbar \frac{\sum_{r=\pm} \operatorname{Im} \left[\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \, C_E^r G^r(E,q) \frac{\partial}{\partial E} \left[C_E^r G^r(E,q) \right]^* \right]}{\sum_{r=\pm} \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \, |C_E^r G^r(E,q)|^2} = \frac{\sum_{r=\pm} r \left[\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \, |C_E^r G^r(E,q)|^2 \, T_{\text{class}} \right]}{\sum_{r=\pm} \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \, |C_E^r G^r(E,q)|^2}.$$
(5.36)

Este é nosso primeiro resultado principal: o valor esperado do tempo possui a forma de uma média (na energia, dependente da distribuição de energia do sistema) de tempos clássicos de chegada, com pesos dados pela forma da função de onda.

Considere, ainda, uma distribuição gaussiana de energia para a componente + do vetor $\phi(t|q)$, e $C_E^- = 0$, por simplicidade. Escrevemos, então,

$$C_E^+ = \left(\frac{\sigma^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{\sigma^2 E^2}{\hbar^2}\right),\tag{5.37}$$

sendo \hbar/σ a incerteza na energia. Com esta distribuição, a integral no denominador da Eq. (5.36) se escreve

$$\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE |C_E^r G^r(E,q)|^2 = \frac{\sigma}{\hbar\sqrt{\pi}} \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \exp\left(-\frac{2\sigma^2 E^2}{\hbar^2}\right)$$
$$= \frac{1}{2\sqrt{2}} \left[\operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{2}E_{\max}\sigma}{\hbar}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{2}E_{\min}\sigma}{\hbar}\right) \right], \quad (5.38)$$

onde erf(a) é a função erro de a, enquanto que o numerador se escreve

$$\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \left| C_E^r G^r(E,q) \right|^2 T_{\text{class}} = \frac{\sigma}{\hbar\sqrt{\pi}} \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \exp\left(-\frac{2\sigma^2 E^2}{\hbar^2}\right) T_{\text{class}}.$$
 (5.39)

Para $\sigma \to 0$, ou seja, um pacote de onda bem localizado no tempo, a contribuição da exponencial é praticamente irrelevante, exp $\left(-\frac{2\sigma^2 E^2}{\hbar^2}\right) \to 1$, e obtemos

$$\left\langle \hat{\mathbb{T}} \right\rangle^{\sigma \to 0} (q) = \frac{\frac{\sigma}{\hbar\sqrt{\pi}} \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \exp\left(-\frac{2\sigma^2 E^2}{\hbar^2}\right) T_{\text{class}}}{\frac{1}{2\sqrt{2}} \left[\operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{2}E_{\max}\sigma}{\hbar}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{2}E_{\min}\sigma}{\hbar}\right) \right]} \\ \simeq \frac{\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE T_{\text{class}}}{\Delta E} \\ = \frac{\int_{\bar{S}_{\min}}^{\bar{S}_{\max}} d\bar{S}}{\Delta E} \\ = \frac{\Delta \bar{S}}{\Delta E}, \tag{5.40}$$

onde $\Delta E = E_{\text{max}} - E_{\text{min}} \in \Delta \overline{S} = \overline{S}(E_{\text{max}}) - \overline{S}(E_{\text{min}})$, e utilizamos a aproximação da função erro $\operatorname{erf}(aq) \simeq 2aq/\sqrt{\pi}$. Portanto, o caso limite de uma distribuição C_E^+ = cte implica na existência de uma contribuição tipo-clássica para o tempo de voo.

Por outro lado, para σ muito grande, isto é, com precisão muito alta na energia, vemos que a exponencial gaussiana presente na equação acima se comporta como uma delta de Dirac para E próximo a zero. Então, neste limite,

$$\left\langle \hat{\mathbb{T}} \right\rangle^{\sigma \to \infty} (q) \simeq \frac{T_{\text{class}}^{E=0}}{\frac{1}{2\sqrt{2}} \left[\operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{2}E_{\max}\sigma}{\hbar} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{2}E_{\min}\sigma}{\hbar} \right) \right]} \to \infty, \quad (5.41)$$
já que erf $\left(\frac{\sqrt{2}E_{\max}\sigma}{\hbar} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{2}E_{\min}\sigma}{\hbar} \right) \to 0$ para $\sigma \to \infty.$

Com essa discussão, podemos passar para as aplicações do formalismo STS.

5.3.2 Modelo: barreira de potencial retangular

Utilizamos, para os propósitos desta tese, a barreira de potencial retangular,

$$V(q) = \begin{cases} V_0 = \text{const}, & 0 < q < L; \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$
(5.42)

 V_0 é tal que podemos usar os resultados obtidos na Seção 5.2, e L é a largura da barreira.

Impomos a restrição de que a função de onda deve ser contínua nas interfaces q = 0 e q = L para todos os instantes de tempo, da mesma maneira feita na MQ usual [39–41]. Como as funções F(t) têm a mesma forma para ambos os casos, Eqs. (5.5b) e (5.13), para haver a continuidade temporal, basta fazermos as energias para todas as regiões serem idênticas. Para a parte espacial, teremos

$$G^{\pm}(q) = \begin{cases} A_1^{\pm} \exp\left[\pm \frac{i}{\hbar} p_1 q\right], & q < 0; \\ A_2^{\pm} \exp\left[\pm \frac{i}{\hbar} p_2 q\right], & 0 < q < L; \\ A_3^{\pm} \exp\left[\pm \frac{i}{\hbar} p_1 q\right], & L < q, \end{cases}$$
(5.43)

onde inserimos as constantes A_j^{\pm} , que deverão satisfazer as condições de conexão espacial, e escrevemos os *momenta*

$$p_{j} = \begin{cases} \sqrt{2mE}, & j = 1; \\ \sqrt{2m(E - V_{0})}, & j = 2. \end{cases}$$
(5.44)

Conectar a função de onda nas interfaces nos fornece

$$A_2^{\pm} = A_1^{\pm}; \tag{5.45a}$$

$$A_3^{\pm} = A_1^{\pm} \exp\left[\pm \frac{i}{\hbar} \left(p_2 - p_1\right) L\right].$$
 (5.45b)

Com as Eqs. (5.43) e (5.45), junto a $F(t) = \exp(-iEt/\hbar)$, obtemos a solução completa para a barreira retangular.

5.4 Distribuição constante para um pacote de onda se movendo para a direita

Esta e a seção seguinte tratam de aplicações dos resultados obtidos anteriormente. Consideraremos, em ambos os casos, $C_E^+ = \text{cte e } C_E^- = 0$. Esta última igualdade significa que, uma vez que na Eq. (5.43) temos ondas planas, as ondas que se movem da direita (q mais positivo) para a esquerda (q mais negativo) não existem. Mesmo parecendo uma distribuição não-física, uma distribuição constante na energia pode ser interpretada como um pacote bem localizado no tempo [ver Eq. (5.40)], como discutimos no fim da seção 5.3.1. Por outro lado, uma distribuição constante implica em um pacote com uma largura de banda energética arbitrária (considerando as aproximações de potencial forte ou fraco



Figura 5.1: $\rho(t|q)$ para $m = \hbar = L = 1$ e $V_0 = 5$. A distribuição de energia é dada por $C_E^+ = 1$ e $C_E^- = 0$. Limites de integração indo de E = 0 até E = 2. Todas as quantidades estão em unidades arbitrárias.

para os limites de integração em E), tanto casos quase-monocromáticos (considerando E_{\min} próximo de E_{\max}), como casos com largura de banda maior [97].

A Fig. 5.1 mostra um exemplo de pacote de onda para $m = \hbar = L = 1$, $C_E^+ = 1$, $C_E^- = 0$ e limites de integração indo de E = 0 até E = 2, para uma barreira de intensidade $V_0 = 5$ localizada entre q = 0 e q = L = 1, em unidades arbitrárias. Podemos notar que, à medida que o tempo avança, a onda oscila e se desloca para q cada vez mais positivo; ou, mais de acordo com a interpretação do STS, para cada posição fixa, temos um comportamento temporal distinto. A amplitude também diminui com o passar do tempo. Como $\phi(t|q)$ não é normalizada, $\rho(t|q)$ também não o é, então podemos ter valores arbitrariamente altos.

Para a distribuição que estamos considerando, a Eq. (5.32) pode ser escrita como

$$\left\langle \hat{\mathbb{T}} \right\rangle(q) = -\hbar \frac{\operatorname{Im} \left[\int dE \, G(E,q) \frac{\partial}{\partial E} \left[G(E,q) \right]^* \right]}{\int dE \, \left| G(E,q) \right|^2},\tag{5.46}$$

onde deixamos de usar os índices $r = \pm$ já que só temos a componente +. A derivada dentro da integral, novamente, requer atenção especial. Seguindo a Eq. (5.35), a integral no numerador da Eq. (5.46) é reescrita como

$$\int dE G(E,q) \frac{\partial}{\partial E} \left[G(E,q) \right]^* = \int dE \frac{imq}{\hbar \sqrt{2m \left(E - V_0\right)}} \exp \left[-2r \frac{\operatorname{Im} \left(\sqrt{2m \left(E - V_0\right)} \right) q}{\hbar} \right],$$
(5.47)

que também vale para o caso $E > V_0$. Para o tunelamento, $E < V_0$ e a quantidade $\sqrt{2m(E - V_0)}$ é puramente imaginária; então

$$\left\langle \hat{\mathbb{T}} \right\rangle(q) = 0,$$
 (5.48)

para pacotes de onda cujas energias estão abaixo da barreira, já que a integral se torna *real*. Então, na média, o tunelamento é um fenômeno *instantâneo* segundo essa abordagem.

Para sistemas cujas energias envolvidas estejam acima e abaixo da barreira, apenas as energias maiores que o potencial contribuem para o numerador do cálculo do tempo de tunelamento. Escrevemos, então:

$$\begin{split} \left\langle \hat{\mathbb{T}} \right\rangle (q) &= -\hbar \frac{\mathrm{Im} \left[\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \mathrm{d}E \; G(E,q) \frac{\partial}{\partial E} \left[G(E,q) \right]^* \right]}{\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \mathrm{d}E \; \left| G(E,q) \right|^2} \\ &= -\hbar \frac{\mathrm{Im} \left[\int_{E_{\min}}^{V_0} \mathrm{d}E \; \left| G(E,q) \right|^2 \left(-\frac{iq}{\hbar} \right) \frac{\partial p^*}{\partial E} + \int_{V_0}^{E_{\max}} \mathrm{d}E \; \left| G(E,q) \right|^2 \left(-\frac{iq}{\hbar} \right) \frac{\partial p}{\partial E} \right]}{\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \mathrm{d}E \; \left| G(E,q) \right|^2}. \end{split}$$

Como, para $E < V_0, p = i\kappa$, com κ um número real, é um imaginário puro, a integral

$$\int_{E_{\min}}^{V_0} \mathrm{d}E \ |G(E,q)|^2 \left(-\frac{iq}{\hbar}\right) \frac{\partial p^*}{\partial E} = -\int_{E_{\min}}^{V_0} \mathrm{d}E \ |G(E,q)|^2 \left(\frac{q}{\hbar}\right) \frac{\partial \kappa}{\partial E}$$

é real, então Im $\left[\int_{E_{\min}}^{V_0} dE |G(E,q)|^2 \left(-\frac{iq}{\hbar}\right) \frac{\partial p^*}{\partial E}\right] = 0$, e

$$\left\langle \hat{\mathbb{T}} \right\rangle (q) = \frac{\int_{V_0}^{E_{\max}} \mathrm{d}E \ |G(E,q)|^2 q \frac{\partial p}{\partial E}}{\int_{E_{\min}}^{V_0} \mathrm{d}E \ |G(E,q)|^2 + \int_{V_0}^{E_{\max}} \mathrm{d}E \ |G(E,q)|^2} = \frac{\int_{V_0}^{E_{\max}} \mathrm{d}E \ q \frac{\partial p}{\partial E}}{\int_{E_{\min}}^{V_0} \mathrm{d}E \ \exp\left(-\frac{2q}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}\right) + \int_{V_0}^{E_{\max}} \mathrm{d}E},$$
(5.49)

onde usamos

$$|G(E,q)|^{2} = \begin{cases} \exp\left(-\frac{2q}{\hbar}\sqrt{2m(V_{0}-E)}\right), & E < V_{0}, \\ 1, & E > V_{0}, \end{cases}$$
(5.50)

como pode ser verificado. Fazendo a substituição

$$u = \sqrt{2m(V_0 - E)} \Longrightarrow \mathrm{d}u = -m\,\mathrm{d}E/\sqrt{2m(V_0 - E)} = -m\mathrm{d}E/u,$$

a integral onde $|G(E,q)|^2 \neq 1$ se escreve

$$\int_{E_{\min}}^{V_{0}} dE \exp\left(-\frac{2q}{\hbar}\sqrt{2m(V_{0}-E)}\right) = -\frac{1}{m}\int_{u_{i}}^{0} du \, u \exp\left(-\frac{2q}{\hbar}u\right)$$
$$= -\frac{1}{m}\left[-\frac{\hbar}{2q}\,ue^{\left(-\frac{2q}{\hbar}u\right)}\Big|_{u=u_{i}}^{0} + \frac{\hbar}{2q}\int_{u_{i}}^{0}due^{\left(-\frac{2q}{\hbar}u\right)}\right]$$
$$= -\frac{1}{m}\left[-\frac{\hbar}{2q}\,ue^{\left(-\frac{2q}{\hbar}u\right)}\Big|_{u=u_{i}}^{0} - \frac{\hbar^{2}}{4q^{2}}\,e^{\left(-\frac{2q}{\hbar}u\right)}\Big|_{u=u_{i}}^{0}\right]$$
$$= -\frac{1}{m}\left[\frac{\hbar}{2q}u_{i}e^{\left(-\frac{2q}{\hbar}u_{i}\right)} - \frac{\hbar^{2}}{4q^{2}}\left[1 - e^{\left(-\frac{2q}{\hbar}u_{i}\right)}\right]\right]$$
$$= \frac{\hbar}{4q^{2}m}\left[\hbar - e^{\left(-\frac{2q}{\hbar}u_{i}\right)}\left(2qu_{i} + \hbar\right)\right], \quad (5.51)$$

sendo $u_i = \sqrt{2m(V_0 - E_{\min})}$. Com $\int_{V_0}^{E_{\max}} dE = E_{\max} - V_0$, e $\int_{V_0}^{E_{\max}} dE \, q \frac{\partial p}{\partial E} = q \sqrt{2m(E_{\max} - V_0)},$ (5.52)

obtemos

$$\left\langle \hat{\mathbb{T}} \right\rangle (q) = \frac{q\sqrt{2m(E_{\max} - V_0)}}{\frac{\hbar}{4q^2m} \left[\hbar - e^{-\frac{2q}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E_{\min})}} \left(2q\sqrt{2m(V_0 - E_{\min})} + \hbar \right) \right] + E_{\max} - V_0} \\ = \frac{4q^3m}{\hbar} \frac{\sqrt{2m(E_{\max} - V_0)}}{\left[\hbar - e^{-\frac{2q}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E_{\min})}} \left(2q\sqrt{2m(V_0 - E_{\min})} + \hbar \right) \right] + \frac{4q^2m}{\hbar} \left(E_{\max} - V_0 \right)}.$$

$$(5.53)$$

Este é nosso segundo resultado principal. Ele nos fornece, através de $T_{\text{STS}}(q_i \to q_f) = \langle \hat{\mathbb{T}} \rangle (q_f) - \langle \hat{\mathbb{T}} \rangle (q_i)$, o tempo esperado de voo para pacotes de onda que possuem energias abrangendo valores menores que a intensidade da barreira até maiores que a intensidade da barreira. Em particular, se $E_{\min} = 0$,

$$T_{\rm STS}(0 \to L) = \frac{4L^3m}{\hbar} \frac{\sqrt{2m(E_{\rm max} - V_0)}}{\left[\hbar - e^{-\frac{2L}{\hbar}\sqrt{2mV_0}} \left(2L\sqrt{2mV_0} + \hbar\right)\right] + \frac{4L^2m}{\hbar} \left(E_{\rm max} - V_0\right)}, \quad (5.54)$$

já que $\langle \hat{\mathbb{T}} \rangle(0) = 0$. Comparamos a Eq. (5.54) com os tempos $\tau_y \in \tau_{\phi}$ na Fig. 5.2.

No limite $\hbar \to 0$, a Eq. (5.53) se torna

$$\left\langle \hat{\mathbb{T}} \right\rangle^{(\hbar \to 0)}(q) = \frac{2Lm}{\sqrt{2m(E_{\max} - V_0)}},$$
(5.55)

que também coincide com o limite $E_{\min} \to V_0$, o que indica que o limite semiclássico suprime a contribuição das energias abaixo da barreira. Este é o dobro do tempo que uma partícula clássica com momentum $p = \sqrt{2m(E_{\max} - V_0)}$ levaria para cruzar a mesma região.

Por outro lado, podemos considerar apenastempo de vo
o. Neste caso, $E_{\rm min}>V_0,$ e

$$\left\langle \hat{\mathbb{T}} \right\rangle (q) = -\hbar \frac{\operatorname{Im} \left[\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \, G(E,q) \frac{\partial}{\partial E} \left[G(E,q) \right]^* \right]}{\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \, \left| G(E,q) \right|^2}$$
$$= \frac{\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \, q \frac{\partial p}{\partial E}}{\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \, q}$$
$$= \frac{\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \, q \frac{\partial p}{\partial E}}{E_{\max} - E_{\min}}$$
$$= \frac{q \left[\sqrt{2m(E_{\max} - V_0)} - \sqrt{2m(E_{\min} - V_0)} \right]}{E_{\max} - E_{\min}}, \qquad (5.56)$$

que, como discutido na Eq. (5.40), nos mostra que o tempo de voo é uma média na energia de tempos clássicos.

Também mostramos neste trabalho comparações com os resultados experimentais da Ref. [98] (veja o apêndice F) na Fig. 5.3. Apesar de precisarmos dividir os resultados por π , vemos que a forma da curva é similar com os resultados obtidos pelos autores, e se assemelha mais aos valores de τ_y do tempo de Larmor.



Figura 5.2: Comparação entre a Eq. (5.54) e os tempos de voo/tunelamento, $\tau_y = \tau_D e \tau_{\phi}$, obtidos na Ref. [64], em unidades do tempo característico da barreira $\tau_0 = mL/\hbar k_0$. Aqui, temos $k_0 = \sqrt{2mV_0}/\hbar$, $k = \sqrt{2mE_{\text{max}}}/\hbar$ para $T_{\text{STS}} e k = \sqrt{2mE}/\hbar$ para os outros tempos. A quantidade k_0L nos dá a intensidade da barreira. $T_{\text{STS}}(0 \to L)$ está dividido por π . Notamos que, para uma barreira fraca (Fig. 5.2a), nossos resultados diferem bastante. À medida que aumentamos a intensidade da barreira, vemos que T_{STS} começa a coincidir mais para k grande, quando normalizado por π .



Figura 5.3: Comparações entre a Eq. (5.54) dividida por π e a Fig. 4c da Ref. [98]. A intensidade da barreira é π (para uma barreira com velocidade correspondente a 5.1 mm/s, cheque a referência para mais detalhes), comprimento da barreira de 1.3 µm, de tal forma que $\tau_0 = mL/\hbar k_0 = L/v \simeq 2.5 \times 10^{-4}$ s. Quadrados azuis são medidas de τ_y , enquanto que triângulos vermelhos são medidas de τ_z . Notamos que, após a renormalização, o resultado obtido através do STS se assemelha mais a τ_y do tempo de Larmor.

CAPÍTULO 6

CONCLUSÃO

Esta tese apresenta um pequeno apanhado de trabalhos sobre o tempo na mecânica quântica. Mostramos um resumo sobre o cálculo fracionário no Cap. 2, que aparece naturalmente no decorrer do texto, e apresentamos uma reinterpretação da mecânica clássica com a *posição* como variável independente no Cap. 3. Esta interpretação nos fornece os mesmos resultados clássicos, nos casos em que tempo e posição são invertíveis, isto é, podemos fazer a mudança $q(t) \rightarrow t(q)$. Resultados interessantes surgem quando fazemos a quantização do gerador da dinâmica nesta nova interpretação, e uma das principais consequências desta quantização é o formalismo simétrico no espaço-tempo (chamado de formalismo STS no texto) [61,62], que apresentamos no Cap. 4.

Aplicamos o formalismo STS para barreiras de potencial constantes $V(q) = V_0$ para uma partícula com energia E em limites de potencial forte $E \ll V_0$ e potencial fraco $E \gg$ V_0 , para depois utilizarmos estes resultados para o caso de uma partícula atravessando uma barreira existente entre q = 0 e q = L, de intensidade V_0 . Mostramos que, para uma partícula bem localizada no tempo, isto é, não-localizada na energia, o valor esperado de voo é uma média, na energia, de tempos *clássicos* para distribuições C_E^{\pm} reais. Em especial, calculamos resultados para um pacote de onda com distribuição constante na energia. Comparamos nossos resultados com expressões conhecidas, como os tempos de Larmor τ_y e de fase τ_{ϕ} [64].

A proposta do formalismo STS é promissora. Além de possivelmente auxiliar nosso entendimento do tempo na Mecânica Quântica, a proposta STS pode nos ajudar no uso de derivadas e integrais de ordem não-inteira na Física, como na própria Mecânica Quântica [85–88, 100, 101], ou até mesmo em outras áreas, uma vez que o cálculo fracionário pode ser usado para modelar efeitos não-locais do tipo lei de potência, efeitos de memória a longo prazo do tipo lei de potência e propriedades fractais (Ref. [102] e suas referências), processos de difusão anômala em meios complexos [103] e propagação de ondas acústicas em tecido biológico [104], para citar algumas. Podemos ver especialmente que a ordem da derivada temporal $\frac{\partial^{\alpha}}{\partial t^{\alpha}}$ varia de $\alpha = 1/2$ para um potencial nulo para $\alpha = 1$ para um potencial muito forte. O formalismo STS também pode motivar mais estudos sobre a simetria entre espaço-tempo e energia-momentum.

De maneira geral, o principal desafio do formalismo STS é resolver a Eq. (4.12). Uma maneira possível é fazer a transformada de Fourier do operador momentuniano. Na Ref. [105], por exemplo, os autores fornecem um tratamento para potências do operador diferencial $-\nabla q + \partial_t$, mas utilizando diferentes operadores integrodiferenciais. Em princípio, algo similar poderia ser utilizado no momentuniano para nos fornecer soluções além do escopo de potencial forte ou fraco. Poderíamos, então, fazer uma comparação melhor com o experimento da Ref. [98], ou até mesmo previsões para o modelo do efeito Stark da Ref. [106] e potenciais genéricos, para todos os limites de energia. Possíveis problemas de convergência da transformada inversa de Fourier podem ser evitados ao limitar as frequências na integração, devido à barreira atuar como um filtro, hipótese justificada na Ref. [13].

Esperamos que nossos resultados ajudem a obter um melhor entendimento das relações entre posição/momentum e tempo/energia. Para isso, no futuro podemos considerar situações multidimensionais e analisar as consequências da obtenção de uma momentuniana com mais de uma dimensão espacial para o momentuniano e a mecânica quântica. Também podemos considerar potenciais dependentes do tempo, além de múltiplas partículas com múltiplos momentunianos, e verificar questões de interesse. Trabalhar com o estado completo $||\Psi\rangle$ também possui particular interesse, uma vez que podemos perguntar sobre probabilidades de tempos de voo com imprecisão tanto na posição quanto no tempo, possivelmente nos fornecendo as funções f(t) e g(q) de maneira geral.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

REFERÊNCIAS

- Y. Aharonov e D. Bohm, Time in the Quantum Theory and the Uncertainty Relation for Time and Energy, Phys. Rev. 122, 1649 (1961).
- [2] M. Razavy, Quantum-Mechanical Time Operator, Am. J. Phys. 35, 955 (1967).
- M. Razavy, Quantum-mechanical conjugate of the hamiltonian operator, Il N. Cim. B (1965-1970), 63, 271 (1969).
- [4] G. R. Allcock, The time of arrival in quantum mechanics I. Formal considerations, Ann. Phys. 53, 253 (1969).
- [5] G. R. Allcock, The time of arrival in quantum mechanics II. The individual measurement, Ann. Phys. 53, 286 (1969).
- [6] G. R. Allcock, The time of arrival in quantum mechanics III. The measurement ensemble, Ann. Phys. 53, 311 (1969).
- [7] J. Kijowski, On the time operator in quantum mechanics and the heisenberg uncertainty relation for energy and time, Rep. Math. Phys. 6 361 (1974).
- [8] A. L. Xavier e M. A. M. de Aguiar, Phase-Space Approach to the Tunnel Effect: A New Semiclassical Traversal Time, Phys. Rev. Lett. 79, 3323 (1997).
- [9] J. S. Briggs e J. M. Rost, Time dependence in quantum mechanics, Eur. Phys. J. D 10, 311 (2000).
- [10] J. S. Briggs e J. M. Rost, On the Derivation of the Time-Dependent Equation of Schrödinger, Found. of Phys. 31, 693 (2001).

- [11] J. S. Briggs, A derivation of the time-energy uncertainty relation, J. Phys.: Conf. Ser. 99, 012002 (2008).
- [12] R. Brunneti, Fredenhagen e M. Hoge, Time in Quantum Physics: From an External Parameter to an Intrinsic Observable, Found. Phys. 40, 1368 (2010).
- [13] J. G. Muga, R. S. Mayato e I. L. Gusquiza (editores), em *Time in Quantum Mecha*nics, Vol. 1 (Springer, Berlin, 2008), 2^a Ed.
- [14] C. R. N. Grot e R. S. Tate, Time of arrival in quantum mechanics, Phys. Rev. A 54, 4676 (1996).
- [15] V. Delgado e J. G. Muga, Arrival time in quantum mechanics, Phys. Rev. A 56, 3425 (1997).
- [16] J. G. Muga, C. R. Leavens e J. P. Palao, Space-time properties of free-motion timeof-arrival eigenfunctions, Phys. Rev. A 58, 4336 (1998).
- [17] I. L. Egusquiza e J. G. Muga, Free-motion time-of-arrival operator and probability distribution, Phys. Rev. A 61, 012104 (1999).
- [18] J. G. Muga e C. R. Leavens, Arrival time in quantum mechanics, Phys. Rep. 338, 353 (2000).
- [19] E. Anderson (editor), em Classical and Quantum Gravity: Theory, Analysis and Applications (Nova, New York, 2012) 1^a Ed.
- [20] E. A. Galapon, R. F. Caballar e R. T. Bahague, Confined Quantum Time of Arrivals, Phys. Rev. Lett. 93, 180406 (2004).
- [21] E. A. Galapon, R. F. Caballar e R. T. Bahague, Confined quantum time of arrival for the vanishing potential, Phys. Rev. A 72, 062107 (2005).
- [22] E. A. Galapon, F. Delgado, J. G. Muga e I. Egusquiza, Transition from discrete to continuous time-of-arrival distribution for a quantum particle, Phys. Rev. A 72, 042107 (2005).
- [23] E. A. Galapon, Theory of quantum first time of arrival via spatial confinement I: confined time of arrival operators for continuous potentials, Int. J. Mod. Phys. 21, 6351 (2006).

- [24] E. A. Galapon e A. Villaneuva, Quantum first time-of-arrival operators, J. Phys. A: Math. Theory. 41, 455302 (2008).
- [25] E. A. Galapon, Theory of quantum arrival and spatial wave function collapse on the appearance of particle, Proc. Roy. Soc. A 71, 465 (2009).
- [26] E. A. Galapon e J. J. Magadan, Quantizations of the classical time of arrival and their dynamics, Ann. Phys. 397, 278 (2018).
- [27] P. C. Flores e E. A. Galapon, Relativistic free-motion time-of-arrival operator for massive spin-0 particles with positive energy, Phys. Rev. A 105, 062208 (2022).
- [28] C. Rovelli, Quantum reference systems, Class. Quantum Grav. 8, 317 (1991).
- [29] B. Dittrich, Partial and complete observables for canonical general relativity, Class. Quantum. Grav. 23, 6155 (2006).
- [30] B. Dittrich, Partial and complete observables for Hamiltonian constrained systems, Gen. Relativ. and Gravit. 39, 1891 (2007).
- [31] M. Bojowald, P. A. Höhn e A. Tsobanjan, An effective approach to the problem of time, Class. Quantum Grav. 28, 035006 (2011).
- [32] P. Małkiewicz, Clocks and dynamics in quantum models of gravity, Class. Quantum Grav. 34, 145012 (2017).
- [33] F. Giacomini, E. Castro-Ruiz e C. Brukner, Quantum mechanics and the covariance of physical laws in quantum reference frames, Nat. Commun. 10, 494 (2019.
- [34] R. Gambini e J. Pulin, The Montevideo Interpretation: How the Inclusion of a Quantum Gravitational Notion of Time Solves the Measurement Problem, Universe 6, 236 (2020).
- [35] M. Bojowald e A. Tsobanjan, Quantization of Dynamical Symplectic Reduction, Commun. Math. Phys. 382, 547 (2021).
- [36] A. Singh, Quantum space, quantum time, and relativistic quantum mechanics, Quantum Stud.: Math. Found. 9 35 (2022).

- [37] G. Czelusta e J. Mielczarek, Quantum variational solving of the Wheeler-DeWitt equation, Phys. Rev. D 105, 126005 (2022).
- [38] A. P. French, em Special Relativity (CRC Press, London, 1968) 1^a Ed.
- [39] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu e F. Laloë, em Quantum Mechanics, Vol. 1 (Wiley-VCH, New York (1991).
- [40] J. J. Sakurai e J. Napolitano, em Mecânica Quântica Moderna (Bookman, Porto Alegre, 2013) Edição em português.
- [41] E. Merzbacher, em Quantum Mechanics (John Wiley & Sons, New York, 1999) 3^a
 Ed.
- [42] W. Pauli, em Handbuch der Physik, Vol. 24 (Springer, 1933) 1^a Ed.
- [43] D. N. Page e W. K. Wootters, Evolution without evolution: Dynamics described by stationary observables, Phys. Rev. D 27, 2885 (1983).
- [44] V. Giovannetti, S. Lloyd e L. Maccone, *Quantum time*, Phys. Rev. D 92, 045033 (2015).
- [45] L. Maccone e K. Sacha, Quantum Measurements of Time, Phys. Rev. Lett. 124, 110402 (2020).
- [46] L. R. S. Mendes e D. O. Soares-Pinto, *Time as a consequence of internal coherence*, Proc. R. Soc. 475, 20190470 (2019).
- [47] B. S. DeWitt, Quantum Theory of Gravity. I. The Canonical Theory, Phys. Rev. 160, 1113 (1967).
- [48] L. Mandelstam e I. G. Tamm, The Uncertainty Relation Between Energy and Time in Non-relativistic Quantum Mechanics, J. Phys. USSR 9, 249 (1945).
- [49] N. Margolus e L. B. Levitin, The maximum speed of dynamical evolution, Physica D 120, 188 (1998).
- [50] E. O. Dias, Quantum formalism for events and how time can emerge from its foundations, Phys. Rev. A 103, 012219 (2021).

- [51] M. Fadel e L. Maccone, *Time-energy uncertainty relation for quantum events*, Phys. Rev. A 104, L050204 (2021).
- [52] C. Foti, A. Coppo, G. Barni, A. Cuccoli e P. Verruchi, Time and classical equations of motion from quantum entanglement via the Page and Wootters mechanism with generalized coherent states, Nat. Commun. 12, 1787 (2021).
- [53] A. J. Leggett e A. Garg, Quantum mechanics versus macroscopic realism: is the flux there when nobody looks, Phys. Rev. Lett. 54, 857 (1985).
- [54] J. S. Bell, On the Einstein-Podolsky-Rosen Paradox, Physics Physique Fizika 1, 195 (1964).
- [55] S. Bose, D. Home e S. Mal, Nonclassicality of the harmonic-oscillator coherent state persisting up to the macroscopic domain, Phys. Rev. Letters 120, 210402 (2018).
- [56] J. P. Gazeau, em Coherent states in quantum physics (Wiley-VCH 2009).
- [57] A. D. Ribeiro e R. M. Angelo, Entanglement dynamics via coherent-state propagators, Phys. Rev. A 82, 052335 (2010).
- [58] A. J. S. Lara e A. D. Ribeiro, Entanglement via entangled-boundary-condition trajectories: long-time accuracy, Phys. Rev. A 100, 042123 (2019).
- [59] A. Einstein, B. Podoslki e N. Rose, Can Quantum-Mehcanical Description of Physical Reality be Considered Complete?, Phys. Rev. 48, 696 (1935).
- [60] E. Megidish, A. Halevy, T. Shacham, T. Dvir, L. Dovrat e H. S. Eisenber, Entanglement swapping between photons that have never coexisted, Phys. Rev. Lett. 110, 210403 (2013).
- [61] E. O. Dias e F. Parisio, Space-time-symmetric extension of nonrelativistic quantum mechanics, Phys. Rev. A 95, 032133 (2017).
- [62] R. Ximenes, F. Parisio e E. O. Dias, Comparing experiments on quantum traversal time with the predictions of a space-time-symmetric formalism, Phys. Rev. A 98, 032105 (2018).

- [63] M. Büttiker e R. Landauer, Traversal Time for Tunneling, Phys. Rev. Lett. 49, 1739 (1982).
- [64] M. Büttiker, Larmor precession and the traversal time for tunneling, Phys. Rev. B 27, 6178 (1983).
- [65] E. P. Wigner, Lower Limit for the Energy Derivative of the Scattering Phase Shift, Phys. Rev. 98, 145 (1955).
- [66] E. H. Hauge e J. A. Støvneng, *Tunneling times: a critival review*, Rev. Mod. Phys.
 61, 917 (1989).
- [67] R. Landauer e Th. Martin, Barrier interaction time in tunneling, Rev. Mod. Phys.
 66, 217 (1994).
- [68] L. A. MacColl, Note on the Transmission and Reflection of Wave Packets by Potential Barriers, Phys. Rev. 40, 621 (1932).
- [69] S. T. Thornton e J. B. Marion, em *Dinâmica clássica de partículas e sistemas* (Cengage Learning, São Paulo (2021) (Tradução da 5^a Ed. norte-americana).
- [70] G. W. Leibniz, em carta a L'Hospital, de Hanover, Alemanha, 30/09/1695. Publicada em Leibnizen Mathematische Schriften, Vol. 2, Olms Verlag. Hildesheim (1962).
- [71] K. S. Miller e B. Ross, em An Introduction to the Fractional Calculus and Fractional Differential Equations (Wiley-Interscience, New York (1993) 1^a Ed.
- [72] J. Liouville, Mémoire sur quelques Quéstions de Géometrie et de Mécanique, et sur un nouveau genre de Calcul pour résoudre ces Quéstions., J. École Polytech. 13, 21 (1832).
- [73] B. Riemann (autor), H. Weber e R. Dedekind (editores) em The collected works of Bernhard Riemann (Dover, New York, 1953).
- [74] A. K. Grünwald, Uber "begrenzte" derivationen und deren anwendung, Z. Angew. Math. Phys. 12, 145 (1867).
- [75] A. Krug, Theorie der Derivationen, Akad. Wiss. Wien. Denkenschriften Math. Naturwiss. Kl. 57, 151 (1890).

- [76] G. B. Arfken e H. Weber, em Mathematical methods for physicists (Academic Press, 2005), 6^a Ed.
- [77] N. H. Abel, Solution de quelques problèmes à l'aide d'intégrales définies, Werke 1, 10 (1823.
- [78] N. H. Abel (autor) e L. Sylow (editor), em *Œuvres Complètes de Niels Henrik Abel*, Vol 1. (Cambridge University Press 2012).
- [79] O. Heaviside, em *Electrical papers* (1892).
- [80] O. Heaviside, On operators in physical mathematics, Part II, Proc. Roy. Soc. 54, 105 (1894).
- [81] K. B. Oldham e J. Spanier, em The fractional Calculus: Theory and Applications of Differentiation and Integration to Arbitrary Order (Dover, New York, 2006).
- [82] M. H. Protter e C. B. Morrey, Jr., em Intermediate Calculus (Undergraduate Texts in Mathematics (Springer, New York, 1984), 2^a Ed.
- [83] M. K. Ishteva, em Properties and applications of the Caputo Fractional Operator (Tese de Mestrado), Depto. de Matemática, Universität Karlsruhe (2005).
- [84] I. Podlubny, em Fractional Differential Equations (Academic Press, San Diego, 1999), 1^a Ed.
- [85] N. Laskin, Fractional quantum mechanics, Phys. Rev. E 62, 3135 (2000).
- [86] N. Laskin, Fractional quantum mechanics and Lévy path integrals, Phys. Lett. A 268, 298 (2000).
- [87] N. Laskin, Fractional Schrödinger equation, Phys. Rev. E 66, 0506108 (2002).
- [88] N. Laskin, em Fractional Quantum Mechanics (World Scientific Publishing Co, Singapore, 2018)
- [89] C. Lanczos, em The variational principles of mechanics (University of Toronto Press, Toronto, 1962).
- [90] J. L Synge, em *Classical Dynamics* (Springer, Berlin, Heidelberg, 1960).

- [91] D. T. Haar, em *Elements of Hamiltonian mechanics* (North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1961).
- [92] S. Hjalmars, Some remarks on time and energy as conjugate variables, Nuovo Cim 25, 355 (1962).
- [93] M. Grigorescu, Energy and time as conjugate dynamical variables, Can. J. of Phys. 78, 959 (2000).
- [94] A. Papoulis e U. Pillai, em Probability, Random Variables and Stochastic Processes (McGraw-Hill Europe, 2002), 2^a Ed.
- [95] A. Ranfagni, D. Mugnai, P. Fabeni e G. P. Pazzi, Delay-time measurements in narrowed waveguides as a test of tunneling, Appl. Phys. Lett. 58, 774 (1991).
- [96] M. C. Gutzwiller, em Chaos in Classical and Quantum Mechanics (Springer, Berlin, 1990) 1^a Ed.
- [97] T. Rivlin, E. Pollak e R. S. Dumont, Comparison of a direct measure of barrier crossing times with indirect measures such as the Larmor time, New. Journ. of Phys. 23, 063044 (2021).
- [98] R. Ramos, D. Spierings, I. Racicot e A. M. Steinberg, Measurement of the time spent by a tunneling atom within the barrier region, Nature 583, 529 (2020).
- [99] K. D. Machado, em Equações diferenciais aplicadas, Vol. 1 (Todapalavra, 2012).
- [100] M. Naber, Time fractional Schrödinger equation, J. Math. Phys. 45, 3339 (2004).
- [101] A. A. Stanislavsky, Hamiltonian formalism of fractional systems, Eur. Phys. J. B 49, 93 (2006).
- [102] V. E. Tarasov, Review of some promising fractional physical models, Int. J. Mod. Phys. 27, 1330005 (2013).
- [103] R. Metzler e J. Klafter, The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach, Phys. Rep. 339, 1 (2000).
- [104] S. Holm e S. P. Näsholm, A causal and fractional all-frequency wave equation for lossy media, J. Acoust. Soc. of America 130, 2195 (2011).

- [105] S. G. Samko, A. A. Kilbas e O. I. Marichev, em Fractional integrals and derivatives: theory and applications (Gordon and Breach Science Publishers, Singapore, 1993), 1^a Ed.
- [106] S. Yusofsani e M. Kolesik, Quantum tunneling time: Insights from an exactly solvable model, Phys. Rev. A 101, 052121 (2020).
- [107] K. D. Machado, em Equações diferenciais aplicadas, Vol. 2 (Todapalavra, 2018)
- [108] O. Heaviside, em *Electromagnetic theory* (Cosimo Classics, 2008), 1^a Ed.
- [109] M. Greenberg, em Foundations of applied mathematics (Dover Publications, 2013), Reprint.
- [110] D. C. Harris e M. D. Bertolucci, em Symmetry and spectroscopy: an introduction to vibrational and electronic spectroscopy (Dover Books on Chemistry, New York, 1989).
- [111] C. J. Foot, em Atomic Physics (Oxford University Press, New York, 2005).
- [112] N. V. Vitanov, T. Halfmann, B. W. Shore, K. Bergmann, Laser-induced population transfer by adiabatic passage techniques, Ann. Rev. of Phys. Chem. 52, 763 (2001).
- [113] N. P. Barnes, Transition metal solid-state lasers, Tunable Lasers Handbook, pg-219 (1995).

Apêndices

APÊNDICE **A**

____A TRANSFORMADA DE LAPLACE DE DERIVADAS E INTEGRAIS NÃO-INTEIRAS

Uma das principais ferramentas da Física-Matemática para se obter soluções de equações diferenciais é o uso de transformadas integrais como a de Fourier ou de Laplace [76,99,107, 108]. Tais ferramentas transformam a equação, inicialmente envolvendo derivadas e integrais de funções, em um problema algébrico. Ao aplicar a respectiva transformada inversa na raiz do problema algébrico, obtemos a solução de interesse. Infelizmente, o cálculo *ana-lítico* de tais transformadas inversas é, em geral, extremamente difícil. Mesmo assim, o uso de transformadas integrais é muito útil. Não fizemos uso dessas transformadas nos nossos resultados em particular, porém para problemas futuros com potenciais genéricos, esta pode tornar-se uma ferramenta essencial, e por isso incluímos este apêndice, dedicado à transformada de Laplace.

Admitindo-se sua existência, chama-se Transformada de Laplace de f(x) a expressão

$$F(s) \equiv \mathcal{L}[f(x), s] \equiv \int_0^\infty \mathrm{d}x \, e^{-sx} f(x), \tag{A.1}$$

com $s \in \mathbb{C}$. Condições suficientes para a existência da transformada de Laplace de f(x)são [109]:

- f(x) deve ser contínua por partes em todo intervalo finito em $[0,\infty)$ e
- f(x) deve ser de ordem exponencial γ : existem constantes M > 0 e T > 0 tal que $|f(x)| \le M e^{\gamma x}, \forall x > T.$

Como dito anteriormente, devemos ser capazes de calcular a transformada inversa para obter a solução de interesse. Ela é dada por [76,99,107,108]:

$$f(x) = \mathcal{L}^{-1}[F(s), x] = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \mathrm{d}s \, e^{sx} F(s), \tag{A.2}$$

sendo $c = \text{Re}(s) > c_0$, c_0 pertencente ao semiplano de convergência absoluta da integral presente na Eq. (A.2), significando que a linha de integração de $c - i\infty$ a $c + i\infty$ (uma linha paralela ao eixo imaginário) está à direita (no sentido positivo do eixo real) de todos os polos do integrando.

Algumas propriedades importantes da transformada de Laplace [83]:

• Linearidade:

$$\mathcal{L}\left[\lambda f(x) + \sigma g(x), s\right] = \lambda \mathcal{L}\left[f(x), s\right] + \sigma \mathcal{L}\left[\sigma g(x), s\right]$$
$$\mathcal{L}^{-1}\left[\lambda F(s) + \sigma G(s), x\right] = \lambda \mathcal{L}^{-1}\left[F(s), x\right] + \sigma \mathcal{L}^{-1}\left[\sigma G(s), x\right], \qquad (A.3)$$

 $\operatorname{com} \lambda \in \sigma \in \mathbb{C}.$

• Produto convolução:

$$\mathcal{L}\left[f(x) \star g(x), s\right] = \mathcal{L}\left[f(x), s\right] \mathcal{L}\left[g(x), s\right], \tag{A.4}$$

sendo o produto convolução $f(x) \star g(x)$ definido por

$$f(x) \star g(x) \equiv \int_0^x dy \, f(x-y)g(y) = \int_0^x dy \, f(y)g(x-y).$$
(A.5)

- $\lim_{s \to \infty} s \mathcal{L}[f(x), s] = f(0).$
- Transformada de uma integral de ordem inteira:

$$\mathcal{L}\left[D^{-n}f(x),s\right] = s^{-n}\mathcal{L}\left[f(x),s\right].$$
(A.6)

• Transformada de uma derivada de ordem inteira:

$$\mathcal{L}[D^{n}f(x),s] = s^{n}\mathcal{L}[f(x),s] - \sum_{k=0}^{n-1} s^{n-k-1} \left. \frac{\mathrm{d}^{k}}{\mathrm{d}x^{k}} f(x) \right|_{x=0}.$$
 (A.7)

Estas últimas, junto com a propriedade de linearidade, talvez sejam as propriedades mais úteis na resolução de problemas. Por esse motivo, apresentamos também as generalizações para ordens não-inteiras a seguir [81,83,84]:
• Transformada da integral de Riemann-Liouville:

$$\mathcal{L}\left[D^{-\alpha}f(x),s\right] = s^{-\alpha}\mathcal{L}\left[f(x),s\right].$$
(A.8)

• Transformada da derivada de Riemann-Liouville:

$$\mathcal{L}\left[D^{\alpha}f(x),s\right] = s^{\alpha}\mathcal{L}\left[f(x),s\right] - \sum_{k=0}^{n-1} s^{n-k-1} \left[D^{\alpha-k-1}f(x)\right]\Big|_{x=0}, \quad n-1 < \alpha < n.$$
(A.9)

• Transformada da derivada de Caputo:

$$\mathcal{L}\left[D^{\alpha}f(x),s\right] = s^{\alpha}\mathcal{L}\left[f(x),s\right] - \sum_{k=0}^{n-1} s^{\alpha-k-1} \left.\frac{\mathrm{d}^{k}}{\mathrm{d}x^{k}}f(x)\right|_{x=0}, \quad n-1 < \alpha < n.$$
(A.10)

E aqui está o outro motivo que justifica o uso das derivadas de Caputo: sua transformada de Laplace envolve apenas as condições iniciais em derivadas inteiras, algo que não acontece com a derivada de Riemann-Liouville. Por isso, acreditamos que as derivadas de Caputo possuam um significado físico mais compreensível em um primeiro instante, mas também não podemos deixar de levar em conta que problemas que envolvem derivadas não-inteiras possam ter particular interesse em entender o que são condições iniciais em derivadas não-inteiras.

APÊNDICE **B**_

O *NO-GO THEOREM* DE PAULI PARA O OPERADOR TEMPO

Na MQ usual, o par de operadores de posição e *momentum*, $\hat{Q} \in \hat{P}$ respectivamente, são chamados de conjugados canônicos por satisfazerem a relação de comutação canônica,

$$\left[\hat{Q},\hat{P}\right] = i\hbar\mathbb{1},\tag{B.1}$$

sendo 1 o operador identidade [39–41]. Na representação da posição, o operador \hat{P} é descrito através de uma derivada,

$$\hat{P} \to -i\hbar \frac{\partial}{\partial q}.$$
 (B.2)

Com isso, quando aplicamos o operador $\exp\left(+\frac{i}{\hbar}\lambda\hat{P}\right)$ em um autoestado de \hat{Q} , obtemos um deslocamento espacial [39–41]:

$$\exp\left(+\frac{i}{\hbar}\lambda\hat{P}\right)\left|r\right\rangle = \left|r+\lambda\right\rangle,\tag{B.3}$$

onde $|r\rangle$ é um autoestado de \hat{Q} com autovalor associado r, e λ é um número real qualquer, com unidade de comprimento. O operador $\exp\left(+\frac{i}{\hbar}\lambda\hat{P}\right)$ é chamado de *operador* de translação. Como na MQ usual o hamiltoniano \hat{H} participa do operador de evolução temporal através da equação

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}\right)|\psi(t_0)\rangle = |\psi(t_0+t)\rangle, \qquad (B.4)$$

também conhecida como a solução formal da equação de Schrödinger para hamiltonianos independentes do tempo [39–41], podemos imaginar que, por analogia, o hamiltoniano

seja o momentum (com unidade de energia) canonicamente conjugado a um operador de posição \hat{T} (com unidade de tempo). Então, da mesma forma que temos a relação de comutação canônica da Eq. (B.1), propomos que $\hat{T} = \hat{T}^{\dagger}$ e

$$\left[\hat{T},\hat{H}\right] = i\hbar\mathbb{1}.\tag{B.5}$$

Então, o operador de deslocamento de energia $\exp\left(+\frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{T}\right)$, que é unitário por construção $(\hat{T}$ é hermitiano), vai levar um autoestado de \hat{H} com autovalor E a um outro autoestado de \hat{H} , com autovalor $E + \varepsilon$:

$$\exp\left(+\frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{T}\right)|E\rangle = |E+\varepsilon\rangle.$$
(B.6)

Como não há restrições no valor de ε , exceto de que seja real para manter a unitariedade do operador de deslocamento de energia, podemos considerar dois casos:

- 1. Com ε contínuo, o operador de deslocamento de energia pode levar um autoestado de \hat{H} com autovalor E a um vetor com energia qualquer. Como existem hamiltonianos cujo espectro é discreto (por exemplo, o hamiltoniano do oscilador harmônico ou da partícula num poço quadrado), isso nos leva a uma contradição.
- Com ε arbitrariamente negativo, podemos levar um autoestado de Ĥ a um vetor com energia arbitrariamente baixa. Como hamiltonianos em geral possuem espectro limitado inferiormente, possuindo um estado fundamental (o estado estacionário de energia mais baixa) [39–41], isso nos leva a outra contradição.

Portanto, concluímos que a construção de um operador temporal \hat{T} de maneira a ser hermitiano e canonicamente conjugado ao hamiltoniano \hat{H} não é possível para hamiltonianos cujo espectro é discreto e/ou limitado inferiormente [42].

Note que, mesmo que o sinal na Eq. (B.5) seja diferente do sinal obtido através da quantização da Eq. (3.19), a discussão ainda é válida.

APÊNDICE C

O MECANISMO DE PAGE-WOOTTERS

A proposta de Page e Wootters [43–46] consiste em estender o espaço de Hilbert \mathcal{H}_{s} do sistema de interesse para um espaço $\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_{s} \otimes \mathcal{H}_{T}$, onde \mathcal{H}_{T} é o espaço de um sistema auxiliar T, que damos o nome de "relógio", assumindo ser isomórfico ao espaço de Hilbert de uma partícula em uma reta. Tal espaço \mathcal{H}_{T} é equipado com operadores de coordenadas canônicas $\hat{T} \in \hat{\Omega}$, sendo $[\hat{T}, \hat{\Omega}] = i$, que representam posição e número de onda do relógio. Tais operadores podem representar, sob a restrição a seguir, o tempo e o indicador de energia do sistema evoluindo. Em seguida, introduzimos o operador de *vínculo* do modelo,

$$\hat{J} = \hbar \hat{\Omega} \otimes \mathbb{1}_{\mathrm{s}} + \mathbb{1}_{\mathrm{T}} \otimes \hat{H}_{\mathrm{s}},\tag{C.1}$$

sendo \hat{H}_{s} o hamiltoniano do sistema, e $\mathbb{1}_{i}$ (com i = S ou T) sendo a identidade nos seus respectivos subespaços. Por construção, \hat{J} é auto-adjunto e possui espectro contínuo que inclui todos os valores reais como possíveis autovalores. Identificamos um conjunto especial de vetores $|\Psi\rangle\rangle$ (usamos a mesma notação da Ref. [44], que é diferente da notação da Eq. (4.3), por se tratarem de formalismos diferentes), os chamados vetores físicos do modelo, os quais providenciam uma representação completa, porém estática, da história completa do sistema S. Eles são identificados como sendo autovetores de autovalor nulo do operador de vínculo,

$$\hat{J} |\Psi\rangle\rangle = 0.$$
 (C.2)

Podemos interpretar esta equação como sendo um vínculo que força os vetores físicos a serem autovetores do hamiltoniano total \hat{J} com autovalor nulo, de modo a ser consistente com uma equação de Wheeler-DeWitt [19, 47]. Então, neste modelo, os vetores $|\Psi\rangle\rangle$

são objetos estáticos, sem evolução, como sugere o título do trabalho original de Page e Wootters, "Evolução sem evolução: dinâmica descrita por observáveis estacionários" [43]. Para obter a evolução do sistema S, fornecida pelo vetor de estado $|\psi(t)\rangle$ que evoluirá em relação aos graus de liberdade do relógio T, projetamos $|\Psi\rangle\rangle$ em um autovetor $|t\rangle$ do operador \hat{T} :

$$|\psi(t)\rangle = \langle t|\Psi\rangle\rangle, \qquad (C.3)$$

onde

$$\hat{T} \ket{t} = t \ket{t};$$
 (C.4a)

$$\langle t'|t\rangle = \delta(t-t').$$
 (C.4b)

Ao projetar a equação de vínculo neste mesmo autovetor $|t\rangle$, utilizando a relação de comutação entre $\hat{T} \in \hat{\Omega}$,

$$\langle t | \hat{J} | \Psi \rangle \rangle = 0 \iff \left[\hat{H}_{\rm s} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] |\psi(t)\rangle = 0,$$
 (C.5)

que é justamente a equação de Schrödinger, obtida com a *posição* do sistema auxiliar atuando como variável temporal. De maneira similar, podemos projetar a equação de vínculo em um autovetor de $\hat{\Omega}$, $|\omega\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dt \exp(i\omega t) |t\rangle$ (transformada de Fourier de $|t\rangle$), de modo que a função de onda do sistema S nesta representação é escrita por

$$\left|\tilde{\psi}(\omega)\right\rangle = \left\langle\omega|\Psi
ight
angle,$$
 (C.6)

onde, de maneira similar à feita com $|t\rangle$,

$$\hat{\Omega} \left| \omega \right\rangle = \omega \left| \omega \right\rangle; \tag{C.7a}$$

$$\langle \omega' | \omega \rangle = \delta(\omega - \omega').$$
 (C.7b)

Então,

$$\left\langle \omega \left| \hat{J} \right| \Psi \right\rangle \right\rangle = 0 \iff \left[\hat{H}_{s} + \hbar \omega \right] \left| \tilde{\psi}(\omega) \right\rangle = 0,$$
 (C.8)

que implica que $|\tilde{\psi}(\omega)\rangle$ deve ser o vetor nulo exceto quando ω é tal que $-\hbar\omega$ faz parte do espectro de \hat{H}_{s} .

APÊNDICE D_____

OS TEMPOS DE LARMOR E O TEMPO DE FASE

Os tempos utilizados nas nossas comparações da Fig 5.2, τ_z , $\tau_y \in \tau_{\phi}$, foram obtidos na Ref. [64], e apresentamos aqui sua dedução. O problema teórico difere da barreira retangular de livro-texto utilizada na seção 5.3.2 devido à interação do *spin* com um campo magnético, de modo que o hamiltoniano total do problema é escrito como

$$\hat{H} = \begin{cases} \mathbb{1}\left(\frac{\hat{P}^2}{2m} + V_0\right) - \frac{\hbar\omega_{\rm L}}{2}\sigma_z, & -\frac{L}{2} \le y \le \frac{L}{2}, \\ \mathbb{1}\frac{\hat{P}^2}{2m} - \frac{\hbar\omega_{\rm L}}{2}\hat{\sigma}_z, & \text{caso contrário,} \end{cases}$$
(D.1)

onde, σ_z é a matriz z de Pauli, 1 é a matrix identidade 2×2 , $\omega_{\rm L} = g\mu B_0/\hbar$ é a frequência de precessão de Larmor e L é a largura da barreira. Na expressão para $\omega_{\rm L}$, g é a razão giromagnética, μ é o valor absoluto do momento magnético e B_0 é a intensidade do campo magnético. A função de onda neste caso é um spinor, com componentes

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi^+(y) \\ \psi^-(y) \end{pmatrix}$$
(D.2)

para o caso independente do tempo, de modo que $|\psi^{\pm}(y)|^2 dy$ é a probabilidade de encontrar uma partícula com spin $\pm \hbar/2$ no intervalo entre $y \in y + dy$. O feixe incidente é polarizado na direção x (saindo do papel),

$$\psi = \begin{pmatrix} 1\\1 \end{pmatrix} \exp(iky) \,. \tag{D.3}$$

Como \hat{H} é diagonal na base do spinor, podemos resolver o problema de espalhamento para os spins $\pm \hbar/2$ separadamente. Para cada componente do spinor, assumimos:

$$\psi^{\pm}(y) = \begin{cases} \exp(iky) + A^{\pm} \exp(-iky), & y < -\frac{L}{2}; \\ B^{\pm} \exp(\kappa^{\pm}y) + C^{\pm} \exp(-\kappa^{\pm}y), & -\frac{L}{2} < y < \frac{L}{2} \\ D^{\pm} \exp(iky), & \frac{L}{2} < y, \end{cases}$$
(D.4)

onde A^{\pm} , B^{\pm} , C^{\pm} , D^{\pm} são as constantes de conexão. A quantidade κ^{\pm} , o número de onda dentro da barreira, é dado por

$$\kappa^{\pm} = \sqrt{k_0^2 - k^2 \mp \frac{m\omega_{\rm L}}{\hbar}} \simeq \kappa \mp \frac{m\omega_{\rm L}}{2\hbar\kappa},\tag{D.5}$$

no limite de campo infinitesimal. A quantidade $k_0 = \sqrt{2mV_0}/\hbar$ é o número de onda relacionado à barreira e $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ é o número de onda da partícula livre com energia E, de modo que $\kappa = \sqrt{k_0^2 - k^2} = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ é o número de onda da partícula com energia E dentro da barreira na ausência de campo. Desse modo, o efeito do campo magnético B_0 é de mudar a altura V_0 da barreira para $\tilde{V}_0 = V_0 \pm \hbar\omega_{\rm L}/2$. Consideramos o limite de campo infinitesimal porque queremos eliminar ao máximo os efeitos da interação com o campo e nos preocuparmos apenas com o tempo de tunelamento.

Então, podemos resolver o problema na ausência de campo magnético, cuja solução é facilmente obtida se fizermos a substituição de $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}$ do caso sem campo magnético, isto é,

$$\psi(y) = \begin{cases} \exp(iky) + A \exp(-iky), & y < -\frac{L}{2}; \\ B \exp(\kappa y) + C \exp(-\kappa y), & -\frac{L}{2} < y < \frac{L}{2}; \\ D \exp(iky), & \frac{L}{2} < y, \end{cases}$$
(D.6)

por κ^{\pm} para cada componente do spinor. Em particular, para $B_0 = 0$ (ou $\omega_{\rm L} = 0$), o coeficiente D é dado por

$$D = \sqrt{T} \exp\left(i\Delta\phi - ikL\right),\tag{D.7}$$

onde

$$T = \frac{1}{1 + \left[\frac{(k^2 + \kappa^2)^2}{4k^2\kappa^2}\sinh^2(\kappa L)\right]},$$
 (D.8)

é a probabilidade de transmissão e $\Delta \phi$ é o aumento de fase no cruzamento da barreira, que pode ser obtido através da equação

$$\tan\left(\Delta\phi\right) = \frac{k^2 - \kappa^2}{2k\kappa} \tanh\left(\kappa L\right). \tag{D.9}$$

O coeficiente multiplicando a onda refletida é dado por

$$A = \sqrt{R} \exp\left(-i\frac{\pi}{2} + i\Delta\phi - ikL\right),\tag{D.10}$$

sendo R = 1 - T a probabilidade de reflexão. Os coeficientes da função de onda dentro da barreira são fornecidos, ao impor a condição de continuidade da função de onda nas interfaces, por:

$$B = \frac{\kappa + ik}{2\kappa} \exp\left(i\frac{kL}{2} - \frac{\kappa L}{2}\right)D;$$
 (D.11a)

$$C = \frac{\kappa - ik}{2\kappa} \exp\left(i\frac{kL}{2} + \frac{\kappa L}{2}\right)D,$$
 (D.11b)

e, portanto, possuímos a função de onda completa para o caso sem campo. Ao ligarmos o campo, bata fazer $D \to D^{\pm}$ para cada componente do spinor, substituindo $\kappa \to \kappa^{\pm}$.

No artigo original, o autor trata dois limites, campo magnético muito intenso e campo magnético infinitesimal. Os resultados usados nas comparações com a Eq. (5.54) na Fig. 5.2 são os obtidos para o caso infinitesimal, e portanto só apresentamos estes neste apêndice. Neste caso, considere os valores esperados das componentes de *spin S_i* da partícula *transmitida*. Utilizando a Eq. (D.4), obtemos

$$\langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle \psi | \sigma_z | \psi \rangle = \frac{\hbar}{2} \frac{|D^+|^2 - |D^-|^2}{|D^+|^2 + |D^-|^2};$$
 (D.12a)

$$\langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle \psi | \sigma_y | \psi \rangle = i \frac{\hbar}{2} \frac{D^+ D^{-*} - D^{+*} D^-}{|D^+|^2 + |D^-|^2};$$
(D.12b)

$$\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle \psi | \sigma_x | \psi \rangle = \frac{\hbar}{2} \frac{D^+ D^{-*} + D^{+*} D^-}{|D^+|^2 + |D^-|^2}.$$
 (D.12c)

Escrevendo D^{\pm} em termos de $T^{\pm} = T(\kappa^{\pm})$, os valores esperados das componentes de *spin* são escritas como:

$$\langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2} \frac{T^+ - T^-}{T^+ + T^-};$$
 (D.13a)

$$\langle S_y \rangle = -\hbar \sin \left(\Delta \phi^+ - \Delta \phi^- \right) \frac{\sqrt{T^+ T^-}}{T^+ + T^-};$$
 (D.13b)

$$\langle S_x \rangle = \hbar \cos \left(\Delta \phi^+ - \Delta \phi^- \right) \frac{\sqrt{T^+ T^-}}{T^+ + T^-}.$$
 (D.13c)

Se escrevermos, por exemplo $T^+ - T^-$ no limite de campo infinitesimal, obteremos:

$$T^{+} - T^{-} = -\omega_{\rm L} \frac{m}{\hbar\kappa} \frac{\partial T}{\partial\kappa},\tag{D.14}$$

o termo $\frac{m}{\hbar\kappa}\frac{\partial T}{\partial\kappa}$ tendo unidade de tempo. Isso sugere, segundo o autor, que podemos definir tempos característicos de precessão para cada uma das componentes,

$$\langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2} \omega_{\rm L} \tau_z;$$
 (D.15a)

$$\langle S_y \rangle = -\frac{\hbar}{2} \omega_{\rm L} \tau_y; \tag{D.15b}$$

$$\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \left(1 - \frac{\omega_{\rm L} \tau_x}{2} \right).$$
 (D.15c)

Dividir as Eqs. (D.13a), (D.13b) e (D.13c) por $T^+ + T^- \simeq 2T$ (no limite de campo infinitesimal) nos fornece

$$\tau_z = -\frac{m}{\hbar\kappa} \frac{\partial \left[\ln\left(\sqrt{T}\right)\right]}{\partial \kappa} \left[\ln\left(\sqrt{T}\right)\right]; \tag{D.16a}$$

$$\tau_y = -\frac{m}{\hbar\kappa} \frac{\partial \Delta \phi}{\partial \kappa}; \tag{D.16b}$$

$$\tau_x = \frac{m}{\hbar\kappa} \sqrt{\left(\frac{\partial\Delta\phi}{\partial\kappa}\right)^2 + \left(\frac{\partial\left[\ln\left(\sqrt{T}\right)\right]}{\partial\kappa}\right)} = \frac{m}{\hbar\kappa} \left|\frac{1}{D}\frac{\partial D}{\partial\kappa}\right|.$$
 (D.16c)

Para obter τ_x , expandimos a Eq. (D.13c) até segunda ordem em B_0 (ou, equivalentemente, até segunda ordem em $\omega_{\rm L}$). Uma vez que a função de onda descreve uma partícula com spin 1/2, existe uma relação entre os valores esperados de S_j , dada por

$$\langle S_x \rangle^2 + \langle S_y \rangle^2 + \langle S_z \rangle^2 = \frac{\hbar^2}{4}.$$
 (D.17)

Devemos, então, obter

$$\tau_x = \sqrt{\tau_z^2 + \tau_y^2}.\tag{D.18}$$

Calculando as derivadas em τ_y e τ_z , obtemos as equações que utilizamos na Fig. 5.2

$$\tau_z = \frac{mk_0^2}{\hbar\kappa^2} \frac{(\kappa^2 - k^2)\sinh^2(\kappa L) + \kappa L k_0^2 \sinh(2\kappa L)/2}{4k^2\kappa^2 + k_0^4 \sinh^2(\kappa L)};$$
(D.19a)

$$\tau_y = \frac{mk}{\hbar\kappa} \frac{2\kappa L \left(\kappa^2 - k^2\right) + k_0^2 \sinh(2\kappa L)}{4k^2\kappa^2 + k_0^4 \sinh^2(\kappa L)},\tag{D.19b}$$

para energias abaixo da barreira $(k/k_0 < 1)$. Para energias acima da barreira, basta fazer $\kappa \to i\kappa$. Também utilizado na Fig. 5.2 é o tempo de fase τ_{ϕ} (também conhecido como tempo de atraso do pacote de onda [98]), obtido através de

$$\tau_{\phi} = \hbar \frac{\mathrm{d}\Delta\phi}{\mathrm{d}E} = \frac{m}{\hbar k} \frac{\mathrm{d}\Delta\phi}{\mathrm{d}k} = \frac{m}{\hbar k\kappa} \frac{2\kappa L k^2 \left(\kappa^2 - k^2\right) + k_0^4 \sinh(2\kappa L)}{4k^2 \kappa^2 + k_0^4 \sinh^2(\kappa L)}, \qquad (\mathrm{D.20})$$

para energias abaixo da barreira. Como nos tempos $\tau_z \in \tau_y$, para obter os tempos acima da barreira, basta fazer a substituição $\kappa \to i\kappa$.

APÊNDICE **E**

_COMPARAÇÃO DE XIMENES-PARISIO-DIAS

Na Ref. [62], é apresentada uma comparação do formalismo STS com resultados de experimento com guias de onda. Os resultados mostram uma comparação melhor que os tempos de Larmor e de tempo de fase, e é o principal motivo pelo qual escolhemos este formalismo nesta tese. Apresentamos neste apêndice um resumo do artigo.

Como a Eq. (4.15) é linear, combinações lineares de soluções também são soluções. Nós utilizamos esta propriedade na Eq. (5.20), porém, diferentemente do nosso caso, os autores consideram distribuições de *momenta*, de modo que podemos escrever a densidade de probabilidade $\rho_{\text{XDP}}(t|q) = \phi^{\dagger}_{\text{XDP}}(t|q)\phi_{\text{XDP}}(t|q)$ como

$$\rho_{\rm XDP}(t|q) = \frac{\hbar}{2\pi m} \left| \int_0^\infty dk \,\sqrt{k} C_k^+ \exp\left(+ikq - \frac{iE_k t}{\hbar}\right) \right|^2 + \frac{\hbar}{2\pi m} \left| \int_0^\infty dk \,\sqrt{k} C_k^- \exp\left(-ikq - \frac{iE_k t}{\hbar}\right) \right|^2, \tag{E.1}$$

onde o subíndice XDP denota os resultados da Ref. [62]. Se $\rho_{\text{XDP}}(t|q)$ é normalizado, C_k^{\pm} denota a amplitude de probabilidade da partícula ser medida com momentum $\pm \hbar k$. Tais coeficientes devem ser relacionados, através da regra de Bayes, Eq. (4.2), com os coeficientes da expansão na MQ usual, vide Eq. (4.1),

$$\psi(q|t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k \, \tilde{C}_k \exp\left(+ikq - \frac{iE_k t}{\hbar}\right),\tag{E.2}$$

como discutido no Cap. 4.

Os autores argumentam que, para o caso da partícula livre, como a probabilidade condicionada temporalmente não dependem do *instante de tempo* em que a medida está

acontecendo, seria natural assumir que a quantidade C_k^{\pm} não depende da *posição* do detector. Dessa forma,

$$C_k^{\pm} = \Theta(k)\tilde{C}_{\pm k},\tag{E.3}$$

onde $\Theta(k)$ é a função degrau de Heaviside. A Eq. (E.3) não é satisfeita em geral. Com isso, a Eq. (E.1) se torna a conhecida distribuição de Kijowski para o problema do tempo de chegada [7,13],

$$\rho_{\text{XDP}}(t|q) = \frac{\hbar}{2\pi m} \left| \int_0^\infty \mathrm{d}k \,\sqrt{k} \tilde{C}_k^+ \exp\left(+ikq - \frac{iE_k t}{\hbar}\right) \right|^2 + \frac{\hbar}{2\pi m} \left| \int_{-\infty}^0 \mathrm{d}k \,\sqrt{-k} \tilde{C}_k^- \exp\left(+ikq - \frac{iE_k t}{\hbar}\right) \right|^2. \tag{E.4}$$

A Eq. (E.4) pode ser reescrita, de forma compacta, como

$$\rho_{\rm XDP}(t|q) = \frac{\hbar}{2\pi m} \sum_{r=\pm} \int_0^\infty \mathrm{d}k \int_0^\infty \mathrm{d}\bar{k} \sqrt{k\bar{k}} C_k^r C_{\bar{k}}^{r*} \exp\left(ir\left(k-\bar{k}\right)q\right) \exp\left(-i\hbar\left(\frac{k^2-\bar{k}^2}{2m}\right)t\right). \tag{E.5}$$

Com isso, escrevemos o valor esperado de $\hat{\mathbb{T}},$ da mesma maneira que a Eq. (5.21), como

$$\left\langle \hat{\mathbb{T}} \right\rangle(q) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t \, t \, \rho_{\mathrm{XDP}}(t|q)}{\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t \, \rho_{\mathrm{XDP}}(t|q)}.$$
 (E.6)

A integral temporal que surge no numerador da Eq. (E.6) pode ser reescrita como

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t \, t \exp\left(-i\hbar\left(\frac{k^2-\bar{k}^2}{2m}\right)t\right) = \frac{2\pi m}{i\hbar\bar{k}}\frac{\partial}{\partial\bar{k}}\delta\left(\frac{\hbar\left(k^2-\bar{k}^2\right)}{2m}\right),\tag{E.7}$$

onde $\delta(a)$ é a delta de Dirac. Podemos usar a relação da delta de Dirac de uma função [99, 107, 109] para reescrever

$$\delta\left(\frac{\hbar\left(k^2-\bar{k}^2\right)}{2m}\right) = \frac{m}{\hbar k} \left[\delta(k+\bar{k}) + \delta(k-\bar{k})\right].$$
(E.8)

Como as integrais em $k \in \bar{k}$ na Eq. (E.4), e por consequência na Eq. (E.6), possuem limites de integração com $k \in \bar{k}$ indo de 0 a ∞ , a única contribuição não nula é proveniente do termo proporcional a $\delta(k - \bar{k})$. Definindo

$$\Gamma_k^{\pm}(q) \equiv C_k^{\pm} \frac{\exp\left(\pm ikq\right)}{\sqrt{k}},\tag{E.9}$$

nos fornece, para o numerador N_{XDP} da Eq. (E.6),

$$N_{\rm XDP} = \frac{m}{i\hbar} \int_0^\infty dk \, \left[\Gamma_k^{+*}(q) \frac{\partial \Gamma_k^{+*}(q)}{\partial k} + \Gamma_k^{-*}(q) \frac{\partial \Gamma_k^{-*}(q)}{\partial k} \right]. \tag{E.10}$$

De maneira similar, o denominador D_{XDP} da Eq. (E.6) é reescrito como

$$D_{\rm XDP} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt \, \rho_{\rm XDP}(t|q) = \int_{0}^{\infty} dk \, \left[\left| C_{k}^{+} \right|^{2} + \left| C_{k}^{-} \right|^{2} \right], \tag{E.11}$$

nos fornecendo

$$\left\langle \hat{\mathbb{T}} \right\rangle(q) = \frac{m}{i\hbar} \frac{\int_{0}^{\infty} \mathrm{d}k \left[\Gamma_{k}^{+*}(q) \frac{\partial \Gamma_{k}^{+*}(q)}{\partial k} + \Gamma_{k}^{-*}(q) \frac{\partial \Gamma_{k}^{-*}(q)}{\partial k} \right]}{\int_{0}^{\infty} \mathrm{d}k \left[\left| C_{k}^{+} \right|^{2} + \left| C_{k}^{-} \right|^{2} \right]}.$$
 (E.12)

Como os coeficientes C_k^{\pm} , segundo a discussão no começo deste apêndice, estão relacionados com os coeficientes da MQ usual via Eq. (E.3), fazemos a conexão com o coeficiente de transmissão $\mathcal{T}(k)$ para a região q > L, para uma barreira retangular de intensidade V_0 e localizada entre 0 < q < L, como a utilizada na seção 5.3.2. A parte espacial da função de onda para a região q > L tem a forma $\psi_k(q) \sim \mathcal{T}(k) \exp(ikq)$, onde

$$\mathcal{T}(k) = \frac{4kk_1 \exp\left[-iL\left(k - k_1\right)\right]}{(k+k_1)^2 - (k-k_1)^2 \exp\left[2iLk_1\right]},\tag{E.13}$$

sendo $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ e $k_1 = \sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar$ os números de onda na região fora da barreira (q < 0 ou q > L) e dentro da barreira (0 < q < L), respectivamente. Para q > L, $C_k^+ = A_k \mathcal{T}(k)$ e $C_k^- = 0$, onde A_k é a amplitude da função de onda incidente na MQ usual. Com isso, a Eq. (E.6) é escrita, para q > L, como

$$\left\langle \hat{\mathbb{T}} \right\rangle(q) = \frac{m}{i\hbar} \frac{\int_{0}^{\infty} \mathrm{d}k \, \left[A_{k} \mathcal{T}(k) \exp\left(ikL\right)\right] \frac{\partial}{\partial k} \left[A_{k} \mathcal{T}(k) \exp\left(ikL\right)\right]}{\int_{0}^{\infty} \mathrm{d}k \, \left|A_{k} \mathcal{T}(k)\right|^{2}}.$$
 (E.14)

Com isso em mãos, os autores comparam com o experimento das Refs. [13,95], através de uma analogia de MQ com eletromagnetismo. O experimento consiste em um circuito de microondas de banda X, atravessando um guia de onda de estreitamento de passo¹ na banda P, cujo comprimento é L. Suas dimensões são $a' \times b' = 7,9 \times 15,8$ mm² na banda P e $a \times b = 10,16 \times 22,86$ mm² na banda X, como mostrado na Fig. E.1. Os sinais eletromagnéticos são enviados para um osciloscópio de alta resolução e gravados antes e depois do estreitamento. Para o modo $T E_{0,1}$, o índice de refração no guida de onda é $n = \sqrt{1 - [\lambda/(2b)]^2}$, onde λ é o comprimento de onda no vácuo. O problema da barreira retangular é equivalente ao circuito magnético quando são feitas as substituições

$$\begin{pmatrix} k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE} \\ k_1 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E - V_0)} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \frac{2\pi}{\lambda}n = \frac{2\pi}{c}\sqrt{\nu^2 - \nu_{\text{form}}^2} \\ \frac{2\pi}{\lambda}n' = \frac{2\pi}{c}\sqrt{\nu^2 - \nu_{\text{dentro}}^2} \end{pmatrix}, \quad (E.15)$$

¹Tradução livre de "step narrowing waveguide"



Figura E.1: Figura superior: esquema do guia de onda, com uma onda incidente no modo $T E_{0,1}$. Figura inferior: análogo quântico.

sendo ν a frequência da fonte de microondas. As constantes $\nu_{\text{fora}}^2 \in \nu_{\text{dentro}}^2$ são relacionadas com os parâmetros experimentais $b \in b'$, sendo $\nu_{\text{dentro}}^2 = c/(2b') \in \nu_{\text{fora}}^2 = c/(2b)$. Podemos obter o potencial V_0 em termos das variáveis do problema eletromagnético a partir de k_1 . Ao calcularmos seu quadrado, vemos que

$$\hbar^2 k_1^2 = \hbar^2 k^2 + 2mV_0 = \hbar^2 k^2 + \hbar^2 k_0^2, \qquad (E.16)$$

onde $k_0 = \sqrt{2mV_0}/\hbar$ é o número de onda relacionado ao potencial. Ao substituirmos as quantidades como feito na Eq. (E.15), obtemos

$$k_0 = \frac{2\pi}{c\sqrt{\nu_{\text{dentro}}^2 - \nu_{\text{fora}}^2}}.$$
(E.17)

Além disso, a velocidade de grupo para ondas quânticas é $\frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m}$, enquanto que para ondas eletromagnéticas, temos $\frac{d\omega}{dk} = \frac{c^2k}{\omega}$. Então, além da discussão anterior, devemos fazer a troca

$$\frac{\hbar}{m} \to \frac{c^2}{2\pi\nu}.$$
 (E.18)

Definindo $A_{\nu} \equiv \sqrt{\frac{\partial k}{\partial \nu}} A_k$ e fazendo as substituições das Eqs. (E.15) e (E.18) na Eq. (E.14), obtemos:

$$\left\langle \hat{\mathbb{T}} \right\rangle(q) = \frac{\int_{\nu_{\text{fora}}}^{\infty} d\nu \left[A_{\nu} \mathcal{T}(\nu) \exp\left(ik(\nu)L\right) \right] \frac{\partial}{\partial \nu} \left[A_{\nu} \mathcal{T}(\nu) \exp\left(ik(\nu)L\right) \right]}{2\pi i \int_{\nu_{\text{fora}}}^{\infty} d\nu \left| A_{\nu} \mathcal{T}(\nu) \right|^{2}}.$$
 (E.19)



Figura E.2: Medidas de tempo de atraso (*delay-time*) para uma barreira de potencial de largura L, em função da frequência. A linha vermelha sólida representa a Eq. (E.19), a linha verde tracejada curta representa o tempo de Büttiker-Landauer e a linha roxa tracejada longa o tempo de fase. Os pontos e quadrados representam dados experimentais de [13,95]. As linhas verticais representam a frequência de corte, de modo que frequências abaixo representam tunelamento. (a) Barreira de comprimento L = 15 cm, largura de banda $\Lambda = 30$ MHz. (b) Barreira de comprimento L = 20 cm, largura de banda $\Lambda = 50$ MHz.

Completamos a analogia com o problema eletromagnético ao relacionar os coeficientes A_{ν} com a intensidade das linhas espectrais da fonte. O sinal de microondas é fornecido por um klystron (Varian X-13), cuja largura de banda típica é da ordem de 30 MHz², com uma frequência central da ordem de 10 GHz, nos fornecendo uma fonto aproximadamente *monocromática*. O perfil típico é lorentziano, de maneira que

$$A_{\nu} = \frac{\sqrt{\Lambda/(2\pi)} \exp(-i2\pi\nu t_{\mu})}{i(\nu+\nu_{\mu}) + (\Lambda/2)} - \frac{\sqrt{\Lambda/(2\pi)} \exp(-i2\pi\nu t_{\mu})}{i(\nu-\nu_{\mu}) - (\Lambda/2)},$$
(E.20)

onde Λ é o parâmetro de escala que especifica a largura a meia-altura, que, no experimento discutido na Ref. [62], $\Lambda \simeq 30$ MHz, e ν_{μ} é a frequência central da distribuição lorentziana. Além disso, $t_{\mu} = l/v_{\mu}$, sendo l a distância percorrida pelo pulso eletromagnético para chegar no começo da barreira q = 0, e v_{μ} é a velocidade de fase da frequência ν_{μ} . Ao considerar o termo exp $(-i2\pi\nu t_{\mu})$, já está incluído nos cálculos o termo $\langle \hat{T} \rangle (q = 0)$. Os dados experimentais são comparados com 3 curvas teóricas: (i) predições com o formalismo STS (linha vermelha sólida), (ii) Büttiker-Landauer (linha verde tracejada curta) e (iii) tempo de fase (linha roxa tracejada longa) [13,63–65,95]. A linha vertical representa a frequência de corte, portanto frequências abaixo dessa representam tunelamento. Para a Fig. E.2(a), é usado L = 15 cm e $\Lambda = 30$ MHz, enquanto que para a Fig. E.2(b), como L = 20 cm, a atenuação da onda é maior, e os autores procuraram um valor de Λ que

²Documentação (http://www2.l3t.com/edd/pdfs/datasheets/l-3_edd_brochure.pdf) (não publicado)

melhor descrevia a curva, obtendo $\Lambda=50$ MHz.

APÊNDICE **F**____

LO EXPERIMENTO DA BARREIRA GAUSSIANA

Para obter os resultados experimentais que utilizamos na Fig. 5.3, os autores da Ref. [98] realizam um experimento utilizando um condensado de Bose de átomos de rubídio atravessando uma barreira óptica de 1,3 µm de largura. Apresentamos aqui os detalhes do experimento, com formatação similar ao artigo original.

Os autores consideram a definição operacional de tempo de tunelamento como um relógio que marca o tempo apenas quando a partícula está na região de tunelamento. Para isso, consideram o relógio de precessão de Larmor, discutido no apêndice D, e ilustrado na Fig. F.1, onde partículas com *spin* 1/2 na direção x entram na região onde há a presença do campo magnético (que é justamente a região da barreira de potencial). Os ângulos $\theta_y \in \theta_z$, os que o *spin* da partícula precessiona nos planos $x - y \in x - z$ respectivamente, são relacionados aos tempos de Larmor como $\tau_j = \theta_j/\omega_L$, onde τ_j (j = y ou z) são os tempos discutidos na Eq. (D.15), e ω_L é a frequência de Larmor no campo. Trabalhando no limite de campo fraco (ou ω_L pequeno), como discutido anteriormente no apêndice D, a interferência da medição no sistema pode ser reduzida, de maneira que o campo magnético não perturba a partícula de maneira substancial.

O experimento é construído fazendo uso de comprimento de onda de de Broglie longas, possíveis em condensados de Bose-Einstein atômicos, com grau de controle muito bom, tanto para desenhar o potencial óptico quanto para manipular e medir *spin*. A resolução espacial dos potenciais é limitada apenas pelo comprimento de onda da luz do laser utilizado, e na escala de energia utilizada pelos autores (da ordem de centenas de feV, ou $k_{\rm B} \times 1$ nK, onde $k_{\rm B}$ é a constante de Boltzmann), a probabilidade de tunelamento é grande, e a



Figura F.1: Um campo magnético fraco *B* apontando na direção *z* está localizado na região da barreira de potencial. Uma partícula com *spin* 1/2, inicialmente apontando na direção *x*, chega à barreira (pela esquerda na figura) e, ao atravessar a região da barreira, o *spin* precessiona no plano x - y com uma frequência de Larmor $\omega_{\rm L}$, inclinado em direção ao eixo *z*, como mostrado na esfera de Bloch. Os estados $|\uparrow\rangle e |\downarrow\rangle$ são os autoestados do sistema na presença do campo magnético na direção *z*. Os tempos de precessão são definidos como $\tau_y = \theta_y/\omega_{\rm L}$ e $\tau_z = \theta_z/\omega_{\rm L}$.

escala temporal, de milissegundos, é conveniente para ser medida experimentalmente. O mapeamento para o relógio é feito ao criar um sistema com pseudo-*spin* 1/2, utilizando dois dos estados hiperfinos do sistema estudado. Os dois estados são então acomplados através de uma transição de Raman¹ [110] de dois fótons, fornecidas pela própria barreira, gerando, então, um campo pseudo-magnético. A frequência de Larmor $\omega_{\rm L}$ efetiva é dada pela frequência Ω da transição de Rabi² [111]. Com essa configuração, é possível determinar o tempo de travessia da barreira ao medirmos o estado final de *spin* dos átomos transmitidos.

¹Técnica onde a luz, geralmente de um laser, interage com, por exemplo, vibrações moleculares, resultando numa mudança na energia dos fótons incidentes. A partir da análise dessa mudança, podemos obter informações sobre os modos vibracionais do sistema.

²A frequência de Rabi Ω é a frequência com a qual as amplitudes de probabilidade de dois níveis atômicos de energia flutuam em um campo eletromagnético.

Os autores preparam um gás degenerado de aproximadamente 8000 atómos de ⁸⁷Rb no estado $5S_{1/2} | F = 2, m_F = 2 \rangle$ ($F \in m_F$ representam os números quânticos hiperfino e de Zeeman, respectivamente) em uma armadilha de dipolo cruzado. Um dos feixes da armadilha é desligado e os átomos são soltos para se mover longitudinalmente em um guia de onda quase unidimensional. Os autores reduzem a temperatura efetiva dos átomos usando colimação de ondas de matéria³, resultando numa dispersão de velocidade r.m.s. de 0,45(15) mm/s, ou, equivalentemente, uma temperatura efetiva de 2(1) nK. Então, os átomos são empurrados em direção a uma barreira gaussiana de 1,3 µm, formada por um feixe de laser focado, explorando o momento magnético dos átomos e acelerando-os momentaneamente usando um pulso magnético gradiente para ajustar a velocidade.

Enquanto os átomos se aproximam da barreira de potencial, passagem adiabática rápida⁴ é usada para transferir os átomos do seu estado inicial de *spin* para o estado $|2,0\rangle$ [112]. Um *spin*-1/2 efetivo é codificado nos estados de relógio hiperfinos $|2,0\rangle \rightarrow$ $|+x\rangle = (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)/\sqrt{2}$ e $|1,0\rangle \rightarrow |-x\rangle = (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)/\sqrt{2}$, como mostrado na Fig. F.2. A barreira de luz é modulada na fase na frequência hiperfina de 6,8 GHz, criando, então, um par de feixes de Raman que acopla os estados $|\pm x\rangle$. Após o término da colisão com a barreira, os autores fazem uma varredura final de passagem adiabática rápida de $|-x\rangle$ a $|2,-1\rangle$. Uma medida subsequente de Stern-Gerlach separa os dois estados de *spin*, permitindo determinar as populações dos estados $|\pm x\rangle$.

Após a interação com a barreira e os feixes de Raman, cada átomo vai ser ou transmitido, ou refletido, com seu *spin* em uma superposição dos estados $|\pm x\rangle$, como mostra a F.3(a). Para altas energias, a barreira tem pouco efeito nos átomos e o tratamento semiclássico é uma aproximação boa. Com isso, os autores deduzem a frequência de Rabi das medidas de alta energia (veja a seção F). Eles realizam as medidas de tunelamento com uma barreira de altura 135(8) nK, correspondente a uma velocidade de 5,1 mm/s e uma frequência de Rabi de $\Omega = 2\pi \times 225(4)$ Hz. Os tempos são investigados realizando uma tomografia completa do *spin* das partículas transmitidas. Rotações após o espalhamento permitem medir as componentes de *spin* nas direções $x, y \in z$ da esfera de Bloch [F.3(b)]. Das diferentes projeções, os tempos τ_y (associado com o tempo de travessia) e τ_z (asso-

³Do inglês, matter-wave lensing em tradução livre.

⁴Passagem adiabática rápida, ou no inglês, *adiabatic rapid passage*, é um processo coerente que depende de emissão estimulada, controlada pelas propriedades do laser usado. A técnica é utilizada para transferência eficiente de população entre estados quânticos.



Figura F.2: Os autores criam um condensado de Bose-Einstein no estado $|F = 2, m_F = 2\rangle$ em uma armadilha de dipolo cruzado formada por um guia de onda óptico e um feixe que o intersecta perpendicularmente (armadilha de dipolo óptico). Na figura da esquerda, temos a configuração experimental, na figura da direita, o esquema dos níveis atômicos. (1) Após abaixar a temperatura efetiva da nuvem, os átomos são empurrados por um campo magnético gradiente pulsado no sentido do guia de onda na direção z, em direção ao feixe que gera a barreira de potencial e o par de feixes de Raman. (2) Enquanto os átomos viajam em direção à barreira, os autores usam passagem adiabática rápida para transferir os átomos para o estado $|2,0\rangle$ [o estado $|+x\rangle$]. (3) Durante a interação com a barreira, o par de feixes de Raman acopla os estados $|+x\rangle e |-x\rangle$, separados pela frequência hiperfina de 6,8 GHz. (4) Para realizar a sequência de medidas, os átomos que foram acoplados ao estado $|-x\rangle$ são transferidos para o estado $|2,1\rangle$. Após a medida, os autores aplicam um campo magnético gradiente B' para realizar medidas de Stern-Gerlach e separadamente fazer a tomografia de ambos os estados.

ciado com o recuo do medidor) podem ser obtidos [F.3(c)]. Para a velocidade incidente mais baixa (4,1 mm/s), é observada uma probabilidade de transmissão de 0,03. Dada a dependência na energia da transmissão, os autores calculam que os átomos transmitidos possuíam uma distribuição de velocidade com pico em 4,8 mm/s correspondendo a $\kappa L \simeq 3$. Cerca de 3/4 desta distribuição correspondem a energias abaixo da altura da barreira. O tempo τ_y medido é de 0,61(7) ms.

Métodos

Configuração experimental

Como dito anteriormente, os autores utilizam 8000 átomos de ⁸⁷Rb em uma armadilha cruzada de dipolo de 1064 nm. A armadilha é composta de dois feixes: um feixe alongado



Figura F.3: (a). Imagens de absorção das densidades atômicas após a interação com uma barreira de 135 nK e feixes de Raman para energias incidentes de 400 nK (em cima) e 140 nK (embaixo). Um pulso Stern-Gerlach é usado para separar as duas componentes de *spin*; um ângulo de aproximadamente 45° existe entre o campo magnético gradiente e a direção de propagação. Os ângulos de precessão dos átomos transmitidos são obtidos fazendo a tomografia completa no sistema de spin 1/2. (b) Projeções de spinobtidas para diferentes velocidades de incidência. As figuras à direita mostram os cortes através dos planos $x - y \in x - z$. Os dados são codificados de modo que vermelho representa velocidades mais baixas e verde velocidades mais altas. (c) Dados experimentais para os tempos τ_y (pontos laranja) e τ_z (pontos azuis) em função da velocidade incidente. A linha vertical corresponde à velocidade equivalente à altura da barreira (5,1 mm/s). Regiões laranja e azul são obtidas através de simulações através da equação de Schrödinger, e as bandas representam um desvio padrão na frequência de Rabi medida. As linhas tracejadas são previsões obtidas através da teoria de medidas fracas para ondas monocromáticas para τ_y (laranja), τ_z (azul), e o tempo semiclássico (verde). As curvas sólidas correspondentes são calculadas levando em conta a largura da distribuição de velocidades do pacote de onda inicial (0.45 mm/s). A figura inserida possui os dados de probabilidade de transmissão (azul) e as simulações através da equação de Schrödinger (laranja).

que os autores se referem como o guia de onda do átomo (com largura de 15 µm e um alcance de Rayleigh de $z_0 \simeq 600$ µm), e um feixe ortogonal que intersecta o guia de onda cerca de 150 µm de distância do seu centro. Os átomos começam na intersecção dos dois feixes. O guia de onda possui frequências radial e longitudinal de $\nu_r = 220$ Hz e $\nu_l = 2.7$ Hz. O feixe da barreira, formado por um laser de 421 nm focado a 1,3 µm intersecta o guia de onda próximo ao seu centro. A frequência longitudinal da armadilha é quem define a velocidade mínima com a qual os átomos chegam à barreira, uma vez que a curvatura do guia de onda produz uma aceleração de 5×10^{-2} m/s².

Colimação de ondas de matéria

Os autores utilizam resfriamento delta-kick, também conhecido como colimação de onda de matéria, para reduzir a temperatura efetiva dos átomos de 15 nK a 2(1) nK, correspondendo a uma dispersão de velocidade r.m.s. de 0,45(15) mm/s. A temperatura efetiva é dada por $T_{\rm efe}=m\Delta v^2/k_{\rm B},$ on de Δv é a largura r.m.s. da distribuição de velocidades dos átomos e m é a massa atômica. Após o resfriamento, os átomos possuem um comprimento de onda de la Broglie térmico $\lambda_{dB} = 4(1)$ µm. O procedimento de resfriamento é: os átomos estão inicialmente na armadilha de dipolo cruzada, e então são soltos de um dos feixes (armadilha de dipolo óptico) e se expandem no guia de onda por 9 ms (para aproximadamente 4 vezes o tamanho inicial da nuvem). Então, uma armadilha quaseharmônica de frequência $\omega = 2\pi \times 50(5)$ Hz, criada pela armadilha de dipolo óptico, é piscada⁵ por 1,1 ms para colimar o pacote de onda atômico. O tamanho da expansão é limitado pelo raio do feixe $(1/e^2$ raios de 100 µm); este tempo de expansão é mantido pequeno o suficiente tal que os átomos permanecem dentro da região harmônica do potencial gaussiano. O condensado, então, tem um raio longitudinal r.m.s. de 15 µm. Ao reduzir o número inicial de átomos, os autores conseguem obter temperaturas de 0,9 nK usando esta técnica, mas para trabalhar com um número grande de átomos, o experimento é realizado a 2 nK.

Barreira de potencial e feixes de Raman

A luz para os feixes Raman e da barreira é criada por um laser de diodo de cavidade externa ECDL⁶ em configuração Littrow⁷ [113]. Os autores colocam a frequência do feixe próximo a um dos comprimentos de onda do rubídio (421,07 nm), localizado entre as transições $5S_{1/2} \rightarrow 6P_{1/2}$ (421,7 nm) e $5S_{1/2} \rightarrow 6P_{3/2}$ (420,3 nm). Para gerar o par de feixes de Raman, o feixe passa por um modulador de fase eletro-óptico de 6,8 GHz, usando uma profundidade de modulação $\beta \simeq 0,3$, que cria um par de bandas laterais no espectro óptico. Cerca de 0,05 da potência óptica vai para as bandas laterais. As bandas laterais geradas possuem fases opostas e agem destrutivamente quando usadas em conjunto com

⁵Do inglês, *flashed*

⁶Do inglês, external cavity diode laser (ECDL)

⁷Configuração de sistemas ópticos contendo uma grade refletora onde a orientação da grade é tal que a ordem de interesse (por exemplo, difração de primeira ordem) viaja no na direção do feixe incidente.

o portador que produz as transições Raman. Um étalon⁸ com uma largura a meia altura de 12 GHz é usado para remover uma das bandas laterais. Os autores consegue controlar a frequência de Rabi sem modificar a potência dos feixes de Raman ao ajustar β .

A luz da barreira é enviada para uma câmara, onde é focada a $1/e^2$ raios de $\omega_z =$ 1,3 µm na direção z, e na direção y ela é escaneada com um defletor acústico-óptico para criar um potencial plano de 50 µm de largura. A taxa de escaneamento do potencial (133 kHz) é mais rápida que qualquer dinâmica atômica do sistema e garante que a nuvem sinta um potencial médio. O alcance de Rayleigh do feixe é 8 µm, maior que o raio transversal do condensado (~ 2,5 µm). É possível deixar o comprimento de onda em 421,38 nm, onde uma potência de aproximadamente 0,5 mW gera um potencial repulsivo tão alto quanto $V_0/k_b \simeq 180$ nK (dado, para os estados de relógio com $m_F = 0$, pela mudança escalar do efeito Stark a.c.). Um campo magnético apontando na direção de propagação do eixo dos feixes (direção x) nos fornece o eixo de quantização. Os feixes são polarizados circularmente para gerar transições de Raman $\sigma^+ - \sigma^+$.

Para calibrar a frequência de Rabi, os autores estudaram átomos de alta velocidade (alta energia) atravessando a barreira. Para estas velocidades, a aproximação semiclássica é válida, como mostra a Fig. F.3, e a calibração pode ser obtida através de

$$\theta = \Omega \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}z \, \frac{G(z)}{\sqrt{v^2 - v_{\mathrm{b}}^2 G(z)}},\tag{F.1}$$

sendo $G(z) = \exp\left(-2\frac{z^2}{w_z^2}\right)$ o envelope gaussiano do potencial, v é a velocidade dos átomos e $v_{\rm b}$ é a velocidade correspondente à altura da barreira.

Preparação de *spin*, rotação e leitura

Após acelerar os átomos usando um pulso magnético gradiente de 15 G/cm por um tempo variável (0 - 0,9 ms), o estado de *spin* dos átomos é preparado. Enquanto os átomos viajam em direção à barreira, os autores aumentam o campo magnético para aproximadamente 40 G. O campo magnético intenso causa uma diferença nas sucessivas divisões de energia da variedade F = 2 de 210 kHz, como resultado do efeito Zeeman quadrático. Isso permite a transferência dos átomos do estado $|2,2\rangle$ (o estado em que os átomos estão condensados) ao $|2,0\rangle$, usando uma passagem adiabática rápida de rádio-frequência de 1 ms. Uma

⁸Interferômetro de Fabry-Perot.

antena de multi-*loop* fornece o acoplamento da rádio-frequência com a frequência de Rabi de aproximadamente $\Omega_{RF} \simeq 2\pi \times 9$ kHz. A eficiência da transferência é maior que 0,95, e os átomos deixados para trás podem ser identificados e não afetam a dinâmica subsequente do experimento. A sequência total de preparação dura 9 ms. Devido à transição do relógio ter uma dependência do campo de 575 Hz/G², os autores abaixam a intensidade do campo para 1 G antes da interação com os feixes de Raman para reduzir a sensibilidade a ruído magnético.

Para a sequência de leitura, os autores novamente aumentam a intensidade do campo magnético para 40 G. Por causa do efeito Zeeman quadrático, a diferença de frequência das transições $|1,0\rangle$ para $|2,-1\rangle$ e $|1,-1\rangle$ para $|2,0\rangle$ é 110 kHz. Eles transferem os átomos por uma passagem adiabática rápida de $|1,0\rangle$ para $|2,-1\rangle$ em 1,5 ms. A eficiência da transferência é 0,90, e esta sequência dura 8,5 ms. Subsequentemente, os autores abaixam o campo magnético para 1 G e fazem uma expansão livre durante 5,5 ms com um gradiente magnético de 40 G/cm para implementar uma medida Stern-Gerlach e simultaneamente fazer a imagem dos estados finais.

Os autores conseguem medir diretamente apenas os estados hiperfinos $|+x\rangle$ $[|2,0\rangle]$ e $|+x\rangle$ $[|2,0\rangle]$, obtendo, então, $\langle S_x \rangle$. Para completar a tomografia, após a interação com a barreira, é aplicado um pulso de microondas para rodar por um ângulo de $\pi/2$ em torno do eixo z para obter $\langle S_y \rangle$. Similarmente, o sistema é rodado em $\pi/2$ em torno do eixo y, através de uma mudança de fase de $\pi/2$ no campo gerador, para medir $\langle S_z \rangle$. As rotações são feitas com uma antena de dipolo com frequência de Rabi de $\Omega_{\text{M-O}} = 2\pi \times 2.4$ kHz. Para identificar e considerar possíveis erros sistemáticos, como rotações imperfeitas de $\pi/2$, os autores também medem as projeções nas direções x, y e z. A fase entre a fonte de microondas e os feixes de Raman é periodicamente calibrada porque desvios na frequência do ECDL e mudanças no étalon devido a flutuações de temperatura podem ocorrer.