Gabriel Gulak Maia

Estudo da Difusão e Tunelamento Planares para a Equação de Dirac em Presença de Potenciais Eletrostáticos

Campinas
2013

Universidade Estadual de Campinas
Instituto de Física "Gleb Wataghin" - IFGW

Gabriel Gulak Maia

Estudo da Difusão e Tunelamento Planares para a Equação de Dirac em Presença de Potenciais Eletrostáticos

Dissertação apresentada ao *Instituto de Física "Gleb Wataghin" - IFGW* da *Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP* como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em Física

Orientador: Prof. Dr. Stefano De Leo

Co-Orientador: Prof. Dr. Marcelo Moraes Guzzo

Este exemplar corresponde à versão final da dissertação defendida pelo aluno Gabriel Gulak Maia e orientada pelo Prof. Dr.

Stefano de Leo

Campinas
2013

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas
Biblioteca do Instituto de Física Gleb Wataghin
Valkíria Succi Vicente - CRB 8/5398

M28e

Maia, Gabriel Gulak, 1988-

Estudo da difusão e tunelamento planares para a equação de Dirac em presença de potenciais eletrostáticos / Gabriel Gulak Maia. – Campinas, SP : [s.n.], 2013.

Orientador: Stefano De Leo.

Coorientador: Marcelo Moraes Guzzo.

Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física Gleb Wataghin.

1. Mecânica quântica relativística. 2. Barreiras de potencial. 3. Pacote de ondas. 4. Inversão de spin. I. De Leo, Stefano,1966-. II. Guzzo, Marcelo Moraes,1963-. III. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física Gleb Wataghin. IV. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Study of planar diffusion and tunneling for the Dirac equation in presence of electrostatic potentials
Palavras-chave em inglês:
Relativistic quantum mechanics
Potential barriers
Wave-packets
Spin flip
Área de concentração: Física
Titulação: Mestre em Física
Banca examinadora:
Stefano De Leo [Orientador]
Alex Eduardo de Bernardini
Arlene Cristina Aguilar
Data de defesa: 16-09-2013
Programa de Pós-Graduação: Física

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE **GABRIEL GULAK MAIA - RA 115273** APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA "GLEB WATAGHIN", DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 16 / 09 / 2013.

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Stefano de Leo - Orientador do Candidato
DMA/IMECC/UNICAMP

Prof. Dr. Alex Eduardo de Bernardini – DF/UFSCar

Profa. Dra. Arlene Cristina Aguilar – DRCC/IFGW/UNICAMP

Resumo

A interação de elétrons com barreiras de potencial é um problema bem conhecido da teoria quântica não-relativística de Schrödinger. O tratamento intrinsecamente relativístico do sistema, entretanto, por meio da teoria de Dirac, nos revela diferentes aspectos não fornecidos pela teoria precedente. Por exemplo, uma vez que a equação de Dirac contém naturalmente os graus de liberdade de *spin*, quatro coeficientes são necessários para descrever o processo e assim o fenômeno da inversão de *spin*, também chamado *spin flip*, surge. Com o objetivo de introduzir o formalismo teórico e a notação sobre a qual se sustenta este trabalho, o primeiro capítulo é dedicado a uma breve revisão da equação de Dirac, discutindo-se as propriedades de suas matrizes, a equação de continuidade e obtendo-se suas soluções livres. No capítulo 2 o sistema de interesse, a interação planar de partículas de Dirac com barreiras de potencial eletrostático, é apresentado e são destacados os aspectos que o diferenciam de seu equivalente não-relativístico. São definidos os potenciais escalar e eletrostático e as zonas cinemáticas estabelecidas para os casos unidimensional e bidimensional. O terceiro capítulo é reservado à obtenção dos coeficientes de reflexão e transmissão com e sem *spin flip* para partículas de Dirac difundindo planarmente através de uma barreira quadrada de potencial eletrostático. Este objetivo é alcançado através de dois métodos distintos de interpretações complementares: O método de degraus e o cálculo de barreira. Coeficientes não-nulos são obtidos para todos os casos, exceto para a transmissão através da barreira com inversão de *spin*, contrastando com o fato de que todos os degraus componentes da barreira apresentam coeficientes associados diferentes de zero. No quarto capítulo analisa-se o *spin* das partículas incidentes e o efeito da barreira sobre o *spin* das partículas refletidas. Ainda que o limite para baixas velocidades seja sempre 1/2, como esperado, em regimes relativísticos encontra-se uma dependência do valor médio deste operador com a energia e o ângulo de incidência no potencial. No quinto capítulo o formalismo de pacote de ondas é desenvolvido e a coerência dos pacotes em relação à barreira de potencial investigada, mostrando que a probabilidade de transmissão torna-se constante conforme a largura da barreira aumenta, o que caracteriza o regime incoerente de partículas. Ao fim do capítulo são derivadas as expressões para o *spin* incidente, refletido e transmitido nesse formalismo. Por fim, o sexto capítulo é reservado ao estudo introdutório do valor médio de autoestados do operador de *spin* através do formalismo desenvolvido no capítulo anterior como primeira mostra das possibilidades de trabalhos futuros. É mostrado que se o bispinor incidente não for um autoestado do Hamiltoniano de Dirac uma dependência temporal é verificada no valor médio.

Palavras-chave: Mecânica Quântica Relativística, barreiras de potencial, pacote de ondas, inversão de *spin*

Abstract

The interaction of electrons with potential barriers is a well-known problem of the Schrödinger's non-relativistic quantum theory. The intrinsically relativistic treatment of the problem, however, through the Dirac's theory, reveals us different aspects, do not provided by the preceding theory. For instance, since the Dirac equation naturally contains the spinorial degree of freedom, four coefficients are needed in order to describe the process and so the spin flip phenomenon emerges. To introduce the theoretical formalism and the notation upon which this work is sustained, the first chapter is devoted to a short review of the Dirac equation, discussing the properties of its matrices, the continuity equation and obtaining its free solutions. Chapter 2 presents the system of interest, the planar interaction of Dirac particles with electrostatic potential barriers. It also highlights the aspects that differentiate this system from its non-relativistic analogue. The scalar and electrostatic potentials are defined and the kinematic zones established for the one-dimensional and the two-dimensional cases. The third chapter is reserved for obtaining the spin flip and spin conserving transmission and reflection coefficients for Dirac particles diffusing two-dimensionally through a square electrostatic potential barrier. This goal is achieved by means of two distinct methods of complementary interpretations: The barrier calculation and the steps calculation. Non-zero coefficients are obtained in all the cases except for the spin flip transmission, contrasting with the fact that no coefficient of the individual steps that compose the barrier is null. In the fourth chapter the incident particles' spin is analysed as well as the effect of the barrier on the spin of the reflected particles. As expected the low velocities limits gives us a spin value of 1/2 but in relativistic regime there is a dependence of the spin with the energy and the incidence angle into the potential. In the fifth chapter the wave packet formalism is developed and the packets' coherence is investigated, showing that the transmission probability becomes constant as the barrier width becomes greater, characterizing the incoherence of the particle limit. At the end of the chapter the expressions for the incident, reflected and transmitted spin in the new formalism are derived. Finally, the sixth chapter is reserved to the introductory study of mean values of the spin operator eigenstates through the formalism developed in the previous chapter as an example of possibilities for future investigations. It is shown that if the incident bispinor is not a Dirac Hamiltonian eigenstate there is a time dependence in the expected value.

Key-words: Relativistic Quantum Mechanics, potential barriers, wave-packets, spin flip

Sumário

Agradecimentos

Agradeço primeiramente, ao professor Doutor Stefano de Leo, pelo apoio, paciência e instrução constante durante o processo de realização da pesquisa, sem o que não poderia eu ter avançado o quanto avancei em minha formação científica.

Agradeço também ao professor Doutor Marcelo Guzzo, pelo apoio e pelas conversas que me receberam na Unicamp e me ajudaram a escolher meu caminho.

Agradeço ao Instituto de Física Gleb Wataghin e à Unicamp pela estrutura oferecida assim como à Capes pelo apoio financeiro, essencial na concretização deste passo de minha educação científica e vida profissional.

Agradeço minha família pelo apoio perene, auxílio e suporte emocional.

Agradeço por fim Bárbara Camargo pelo incentivo incondicional durante os anos de graduação.

Capítulo 1

Introdução

1.1 A Equação de Dirac

A mecânica quântica, desenvolvida em termos da equação de ondas apresentada por Schrödinger em 1926, [1], utiliza-se da relação clássica energia-momento. Assim, para uma partícula livre temos

$$E_{NR} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}, \tag{1.1}$$

onde NR significa não-relativística. Ela é uma analogia à dinâmica clássica, não-relativística. Contudo, desde 1905 a Teoria da Relatividade Restrita apresentava não apenas uma nova relação energia-momento[1], [2],

$$E^2 = \mathbf{p}^2 + m^2, \tag{1.2}$$

que como o esperado se reduz, à menos de um fator constante (a chamada energia de repouso), à expressão clássica no limite de baixas velocidades,

$$E = \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2} \;\approx\; m\left(1 + \frac{\mathbf{p}^2}{2m^2} - \frac{\mathbf{p}^4}{8m^4} + ...\right), \tag{1.3}$$

como também dois novos postulados físicos, [3]:

I. *As leis de movimento válidas em um referencial inercial devem ser válidas em todos os referenciais inerciais.*

II. *A luz sempre se propaga no espaço vazio com velocidade definida c, a qual é independente do estado de movimento do corpo emissor.*

[1]Utilizando as unidades naturais: $c = \hbar = 1$. A menos que se explicite o contrário tal notação será utilizada como padrão.

Ainda que correções relativísticas possam ser contabilizadas perturbativamente através da expansão em série (1.3), [4], este é, como dito, um procedimento perturbativo, e logo, está confinado ao regime de energia associado aos termos considerados apreciáveis na expansão. Com o intuito, então, de se formular uma teoria intrinsecamente relativística dois requisitos são necessários: a nova teoria deve conter a expressão apropriada para a energia e deve, respeitando os postulados acima, ser formulada em uma forma covariante sob transformações de Lorentz. Além disso, uma característica desejável é a preservação dos postulados subjacentes à teoria quântica anterior [5, 6]. Em particular, a prescrição quântica usual deve relacionar as variáveis dinâmicas clássicas aos operadores diferenciais quânticos, como sugerido por Gordon[2]:

$$H \;\rightarrow\; i\frac{\partial}{\partial t}, \tag{1.4a}$$

$$\mathbf{p} \;\rightarrow\; -i\boldsymbol{\nabla}. \tag{1.4b}$$

O esforço em se construir uma teoria satisfazendo este último requerimento justifica-se no fato de que a bem sucedida (em seu regime de validade) teoria não-relativística deve ser um caso específico ao qual a nova teoria se reduz sob as condições apropriadas.

Neste cenário, com o intuito de preservar a interpretação de $|\psi(\mathbf{r},t)|^2$ como uma densidade de probabilidade, o físico britânico P.A.M. Dirac propôs uma equação temporalmente linear [14], nos moldes da equação de Schrödinger,

$$i\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = H_0\psi(\mathbf{r},t), \tag{1.5}$$

uma vez que a equação derivada da Hamiltoniana quadrática $H_0^2 = \mathbf{p}^2 + m^2$, a conhecida equação de Klein-Gordon, [7],

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + m^2\right]\psi(\mathbf{r},t) = 0, \tag{1.6}$$

fornece soluções tais que a fórmula a ser relacionada com a densidade de probabilidade não é positivo-definida, sendo a razão disto apontada por Dirac como devido à não-linearidade da dependência temporal em tal equação. Uma vez que a linearidade temporal, através da exigência de covariância, fixa a linearidade espacial, a equação desejada possui a forma

$$i\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -i\left(\alpha_x\frac{\partial}{\partial x} + \alpha_y\frac{\partial}{\partial y} + \alpha_z\frac{\partial}{\partial z} + i\beta m\right)\psi(\mathbf{r},t) \equiv H_0\psi(\mathbf{r},t). \tag{1.7}$$

Sendo H_0 o Hamiltoniano livre de Dirac. Agora, para que (1.2) seja satisfeita a hamilto-

[2]Como sugerido por Gordon em *Z. f. Physik*, vol. 40, página 117, publicação de 1926, conforme citação de Dirac em seu trabalho original *The Quantum Theory of the Electron*, de 1928.

niana de Dirac precisa ser capaz de remontar a equação de Klein-Gordon. Multiplicando então os operadores diferenciais em (1.7) por eles mesmos obtemos

$$
\begin{aligned}
-\frac{\partial^2}{\partial t^2} = -\left(\alpha_x\frac{\partial}{\partial x} + \alpha_y\frac{\partial}{\partial y} + \alpha_z\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(\alpha_x\frac{\partial}{\partial x} + \alpha_y\frac{\partial}{\partial y} + \alpha_z\frac{\partial}{\partial z}\right) \\
-im\left[\beta\left(\alpha_x\frac{\partial}{\partial x} + \alpha_y\frac{\partial}{\partial y} + \alpha_z\frac{\partial}{\partial z}\right) + \left(\alpha_x\frac{\partial}{\partial x} + \alpha_y\frac{\partial}{\partial y} + \alpha_z\frac{\partial}{\partial z}\right)\beta\right] \\
+\beta^2 m^2.
\end{aligned}
\tag{1.8}
$$

Como (1.7) considera uma partícula movendo-se no espaço vazio, todos os pontos no espaço-tempo são equivalentes e α_i e β devem ser independentes de x,y,z e t, comutando com todas as derivadas. Deste modo, uma vez que a equação de Klein-Gordon não apresenta derivadas de primeira ordem, da segunda linha da equação acima temos

$$\beta\alpha_i + \alpha_i\beta = 0. \tag{1.9a}$$

Da primeira linha da equação (1.8), utilizando-se do fato de que (1.6) também não apresenta produtos de derivadas de coordenadas distintas temos

$$\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = 0, \tag{1.9b}$$

para $i{\neq}j$. Por fim, como α_i e β são elementos introduzidos no contexto da equação de Dirac e não aparecem na equação de Klein-Gordon devemos ter

$$\alpha_i^2 = \beta^2 = 1. \tag{1.9c}$$

Devido às relações de anticomutação (1.9a) e (1.9b), necessárias à validade de (1.7), vemos claramente que os coeficientes α_i e β não podem ser números ordinários. Dirac propôs então que sua equação fosse matricial e deste modo $\psi(\mathbf{r},t)$ não seria apenas uma função e sim uma matriz cujas componentes seriam as funções. Esta estrutura matricial parece ser à princípio uma derivação natural e necessária, dentro da teoria relativística, dos chamados espinores, matrizes $2{\times}1$ construídas "manualmente" para contabilizar os graus de liberdade de *spin* na teoria de Schrödinger, [8]. Veremos, porém, que embora as soluções da equação de Dirac guardem informação sobre o *spin* das partículas elas não possuem a forma esperada da teoria não-relativística.

1.2 Propriedades das matrizes de Dirac

Avaliemos agora algumas propriedades das matrizes de Dirac de modo que possamos encontrar uma representação adequada. Afim de que H_0 seja Hermitiano α_i e β devem ser

Hermitianas. Além disso, de (1.9c) concluímos que os autovalores das matrizes são ± 1. Por fim, de (1.9a) e de (1.9b) temos que tais matrizes possuem traço nulo. Assim, uma vez que o traço de uma matriz corresponde à soma de seus autovalores, devemos ter o mesmo número de autovalores $+1$ e -1 em cada matriz. Isso reduz a classe de matrizes possíveis unicamente às de dimensão par. A menor dimensão par é 2×2 mas não podemos encontrar quatro matrizes 2×2 que anticomutem entre si. Podemos apenas acomodar como base as três matrizes de Pauli (que anticomutam entre si) e a identidade, não satisfazendo as características necessárias. A próxima dimensão par é 4×4 e neste caso o conjunto necessário pode ser construído.

Um conjunto de matrizes que satisfaz nossas necessidades é a chamada representação de Dirac, onde

$$\alpha_i = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{bmatrix}, \tag{1.10a}$$

$$\beta = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \tag{1.10b}$$

Sendo σ_i as matrizes de Pauli e 1 denotando a identidade 2×2. Note que qualquer conjunto de matrizes satisfazendo (1.9a-1.9c) é uma escolha aceitável, sendo a representação de Dirac apenas uma escolha em particular. De modo geral podemos afirmar que, dada uma transformação U, tal que $U^\dagger U = 1$, qualquer conjunto matricial na forma

$$\tilde{\alpha}_i = U\alpha_i U^\dagger, \tag{1.11a}$$

$$\tilde{\beta} = U\beta U^\dagger, \tag{1.11b}$$

é uma representação válida.

1.3 A Equação de Continuidade

Uma vez que a equação de continuidade é uma das motivações da equação de Dirac, acompanhemos sua derivação. Escrevamos, por simplicidade, a equação de Dirac como

$$i\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -i\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\nabla}\psi(\mathbf{r},t) + m\beta\psi(\mathbf{r},t). \tag{1.12}$$

Multiplicando-a pela esquerda por $\psi^\dagger(\mathbf{r},t)$ obtemos

$$i\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -i\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\nabla}\psi(\mathbf{r},t) + m\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\beta\psi(\mathbf{r},t) \tag{1.13a}$$

e multiplicando o Hermitiano conjugado de (1.12) por $\psi(\mathbf{r},t)$ pela direita

$$-i\frac{\partial\psi^\dagger(\mathbf{r},t)}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t) = i\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\nabla}\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t) + m\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\beta\psi(\mathbf{r},t). \tag{1.13b}$$

Subtraindo então (1.13b) de (1.13a) obtemos a relação

$$i\left[\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \frac{\partial\psi^\dagger(\mathbf{r},t)}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t)\right] = -i\left[\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\nabla}\psi(\mathbf{r},t) + \boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\nabla}\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)\right],$$

$$\frac{\partial(\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t))}{\partial t} = -\boldsymbol{\nabla}\cdot(\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\boldsymbol{\alpha}\psi(\mathbf{r},t)). \tag{1.14}$$

Identificando

$$\rho = \psi^\dagger(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t) \tag{1.15}$$

como uma densidade de probabilidade e

$$\mathbf{j} = \psi^\dagger(\mathbf{r},t)\boldsymbol{\alpha}\psi(\mathbf{r},t) \tag{1.16}$$

como uma corrente de probabilidade, temos a equação de continuidade das soluções da equação de Dirac como

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{j} = 0. \tag{1.17}$$

Tal equação guarda a forma de sua equivalente não-relativística e apresenta ρ positivo-definida, como desejado.

1.4 Soluções da Equação Livre de Dirac

Busquemos agora a estrutura matricial das soluções $\psi(\mathbf{r},t)$ da equação livre de Dirac quando seu movimento é descrito por ondas planas. Sabemos que a equação de Dirac satisfaz a relação (1.2) e logo existem duas raízes possíveis para a energia. Além disso, como α_i e β são matrizes 4×4 as soluções desejadas devem ser matrizes 4×1. Buscamos então soluções da forma

$$\psi(\mathbf{r},t) = u(\mathbf{p})e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}e^{\mp iEt}, \tag{1.18}$$

tal que $E > 0$ e

$$u(\mathbf{p}) = N\begin{bmatrix}\varphi(\mathbf{p})\\ \chi(\mathbf{p})\end{bmatrix}, \tag{1.19}$$

onde $\varphi(\mathbf{p})$ e $\chi(\mathbf{p})$ são matrizes 2×1 e N é um fator de normalização a ser definido. Utilizando estas considerações a equação (1.7) toma a forma de uma equação de autovalores para $u(\mathbf{p})$[3]

$$(\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{p} + \beta m)\, u(\mathbf{p}) = \pm E u(\mathbf{p}). \tag{1.20}$$

Explicitando a forma matricial subjacente temos

$$\begin{bmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p} \\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi(\mathbf{p}) \\ \chi(\mathbf{p}) \end{bmatrix} + m \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi(\mathbf{p}) \\ \chi(\mathbf{p}) \end{bmatrix} = \pm E \begin{bmatrix} \varphi(\mathbf{p}) \\ \chi(\mathbf{p}) \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} m & \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p} \\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p} & -m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi(\mathbf{p}) \\ \chi(\mathbf{p}) \end{bmatrix} = \pm E \begin{bmatrix} \varphi(\mathbf{p}) \\ \chi(\mathbf{p}) \end{bmatrix}. \tag{1.21}$$

Obtemos assim

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}\chi(\mathbf{p}) + m\varphi(\mathbf{p}) = \pm E\varphi(\mathbf{p}), \tag{1.22a}$$

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}\varphi(\mathbf{p}) - m\chi(\mathbf{p}) = \pm E\chi(\mathbf{p}). \tag{1.22b}$$

Dada a dimensão de $\psi(\mathbf{r},t)$ precisamos de quatro soluções linearmente independentes. Obtemos tais soluções fixando nas equações com $+E$

$$\varphi_1(\mathbf{p}) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \varphi_2(\mathbf{p}) = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \tag{1.23}$$

utilizando então (1.22b) para determinar $\chi(\mathbf{p})$. Analogamente, para o caso $-E$, fixamos

$$\chi_1(\mathbf{p}) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \chi_2(\mathbf{p}) = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \tag{1.24}$$

e determinamos $\varphi(\mathbf{p})$ através de (1.22a). Obtemos assim

$$u_{1,2}(\mathbf{p}) = N \begin{bmatrix} \varphi_{1,2}(\mathbf{p}) \\ \frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}}{E+m}\varphi_{1,2}(\mathbf{p}) \end{bmatrix}, \tag{1.25a}$$

$$u_{3,4}(\mathbf{p}) = N \begin{bmatrix} -\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}}{E+m}\chi_{1,2}(\mathbf{p}) \\ \chi_{1,2}(\mathbf{p}) \end{bmatrix}. \tag{1.25b}$$

Quanto à normalização dos bispinores $u_i(\mathbf{p})$ é conveniente, no que se segue, utilizar

$$u_i^\dagger(\mathbf{p})u_j(\mathbf{p}) = \delta_{ij}. \tag{1.26}$$

Assim, para todo $i = j$ temos

$$|N|^2 \left[1 + \frac{\mathbf{p}^2}{(E+m)^2}\right] = 1,$$

[3] A matriz coluna $u(\mathbf{p})$ é usualmente chamada de bispinor ou espinor de Dirac.

e portanto

$$N = \sqrt{\frac{E+m}{2E}}. \tag{1.27}$$

Onde utilizamos que $\mathbf{p}^2 = (E+m)(E-m)$. De (1.25a) e de (1.25b) temos ainda que determinar o produto $\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}$. Temos então que

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} p_x + \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} p_y + \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} p_z = \begin{bmatrix} p_z & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & -p_z \end{bmatrix}. \tag{1.28}$$

Logo

$$\begin{bmatrix} p_z & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & -p_z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_z \\ p_x + ip_y \end{bmatrix}, \tag{1.29a}$$

$$\begin{bmatrix} p_z & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & -p_z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_x - ip_y \\ -p_z \end{bmatrix}. \tag{1.29b}$$

Temos, finalmente, os bispinores

$$u_1(\mathbf{p}) = \frac{1}{\sqrt{2E(E+m)}} \begin{bmatrix} E+m \\ 0 \\ p_z \\ p_x + ip_y \end{bmatrix}, \tag{1.30a}$$

$$u_2(\mathbf{p}) = \frac{1}{\sqrt{2E(E+m)}} \begin{bmatrix} 0 \\ E+m \\ p_x - ip_y \\ -p_z \end{bmatrix}, \tag{1.30b}$$

$$u_3(\mathbf{p}) = \frac{1}{\sqrt{2E(E+m)}} \begin{bmatrix} -p_z \\ -(p_x + ip_y) \\ E+m \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{1.30c}$$

$$u_4(\mathbf{p}) = \frac{1}{\sqrt{2E(E+m)}} \begin{bmatrix} -(p_x - ip_y) \\ p_z \\ 0 \\ E+m \end{bmatrix}. \tag{1.30d}$$

Capítulo 2

O sistema de interesse

Quando uma partícula não-relativística movendo-se em uma dimensão adentra uma região finita na qual se aplica um potencial quadrado ($V(x) = V_0$), como esquematizado na figura 2.1, a teoria de Schrödinger fornece, como solução da equação de onda independente do tempo na região de potencial não-nulo, uma função de forma $\psi(x) = Fe^{iqx} + Ge^{-iqx}$, [9]. Funções análogas são obtidas pela equação de Schrödinger para as regiões externas à barreira sendo que os coeficientes multiplicando as exponenciais (e a partir deles os coeficientes de reflexão e transmissão) são determinados através das condições de continuidade de tais funções e de suas derivadas primeiras nas fronteiras em $x = 0$ e $x = L$.

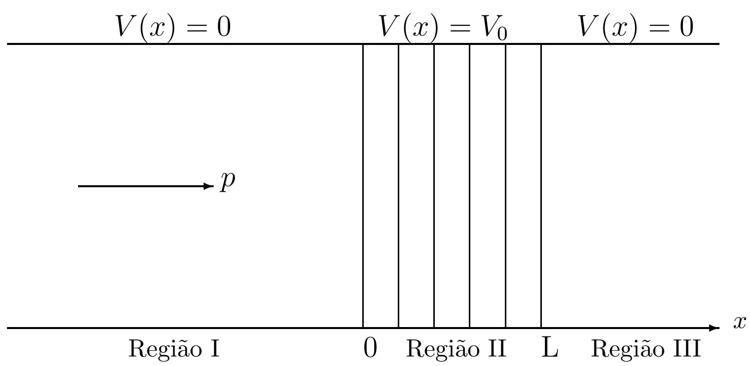

Figura 2.1: Incidência não-relativística unidimensional em uma barreira quadrada de potencial

O sistema no qual estamos interessados é a versão planar relativística deste bem conhecido problema. Através da teoria de Dirac, entretanto, duas novas características entram em foco, ambas associadas ao *spin* da partícula: Ainda estamos interessados nos coeficientes de reflexão e transmissão da barreira mas agora há uma probabilidade de que o *spin* da partícula incidente seja invertido na interação com o potencial. Este fenômeno, conhecido como *spin flip*, é caracterizado por quatro coeficientes (reflexão e transmissão com e sem *spin flip*). A outra característica refere-se ao modo como a interação com a barreira afeta o valor médio mensurado do *spin*. Os coeficientes para os casos unidimensional e planar (o potencial aplicado ainda é unidimensional sendo que o termo "planar"diz respeito ao movimento bidimensional da partícula) são resultados obtidos em [15, 16]. Os coeficientes tridimensionais e a análise de *spin* são presentes contribuições deste trabalho. Como dito, nosso interesse geral é direcionado ao movimento planar mas os coeficientes são calculados com todas as três componentes do momento para sua aplicação posterior no formalismo de pacotes de ondas (também uma contribuição deste trabalho), onde o movimento bidimensional é garantido através de uma distribuição gaussiana em torno de zero para p_x.

2.1 Potenciais eletrostáticos e escalares

Sendo nosso interesse o estudo da interação das soluções da equação de Dirac com uma barreira de potencial, faz-se necessária a distinção de dois tipos de potencial, o escalar e o eletrostático. Um potencial eletromagnético é contabilizado, assim como na Mecânica Clássica, através do acoplamento mínimo, [11]

$$\mathbf{p} \;\rightarrow\; \mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{r},t), \tag{2.1a}$$

$$i\frac{\partial}{\partial t} \;\rightarrow\; i\frac{\partial}{\partial t} - V_0(\mathbf{r},t). \tag{2.1b}$$

Sendo o potencial eletrostático obtido para $\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = 0$ e $V_0(\mathbf{r},t) = V_0(\mathbf{r})$. Uma vez que a dependência temporal das soluções de onda plana se dá através de $e^{\mp iEt}$, a presença de um potencial eletrostático na equação de Dirac torna-se equivalente a um deslocamento de energia:

$$\pm E \;\rightarrow\; \pm E - V_0(\mathbf{r}). \tag{2.2}$$

O potencial escalar, por sua vez, referido também como barreira de massa [17] é contabilizado como um deslocamento massivo [18], sendo equivalente a um termo de massa dependente da posição e não é, geralmente, equivalente ao eletrostático [19]:

$$m \;\rightarrow\; m + V_s(\mathbf{r}). \tag{2.3}$$

Onde o subíndice s denota a natureza escalar da interação.

Estas interações não são usualmente equivalentes porque estão conectadas a termos distintos na equação de Dirac. O Hamiltonino de Dirac para um potencial eletrostático pode ser escrito como

$$H = H_0 + V_0(\mathbf{r}), \tag{2.4}$$

enquanto o potencial escalar, estando ligado à massa, gera um hamiltoniano da forma

$$H = H_0 + \beta V_s(\mathbf{r}). \tag{2.5}$$

Esta diferença é, no entanto, de caráter relativístico, sendo os dois casos indistinguíveis no limite de baixas velocidades. Em tal limite as magnitudes das componentes das soluções da equação Dirac não são comparáveis, [7]. Ou seja, o bispinor

$$u_i(\mathbf{p}) = \begin{bmatrix} \varphi(\mathbf{p}) \\ \chi(\mathbf{p}) \end{bmatrix}$$

é tal que $|\varphi(\mathbf{p})|^2 >> |\chi(\mathbf{p})|^2$. Deste modo a componente que inverte de sinal no segundo termo da equação (2.5), escrito como

$$\begin{bmatrix} V_s(\mathbf{r}) & 0 \\ 0 & -V_s(\mathbf{r}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi(\mathbf{p}) \\ \chi(\mathbf{p}) \end{bmatrix} = V_s(\mathbf{r}) \begin{bmatrix} \varphi(\mathbf{p}) \\ -\chi(\mathbf{p}) \end{bmatrix}, \tag{2.6}$$

é desprezada e o Hamiltoniano para $V_s(\mathbf{r})$ torna-se equivalente ao para $V_0(\mathbf{r})$. No que se segue estamos interessados unicamente em potenciais eletrostáticos.

2.2 Zonas cinemáticas

Sabemos da Mecânica Quântica não-relativística que quando uma partícula adentra uma região de potencial não-nulo a função de onda que a descreve pode estar em um de dois regimes, de comportamentos bem distintos: tunelamento ou difusão. Ao tunelamento estão associadas ondas evanescentes ao passo que à difusão correspondem soluções oscilatórias, [9]. Como visto, as soluções da equação de Schrödinger unidimensional independente do tempo têm a forma $\psi(x) = Fe^{iqx} + Ge^{-iqx}$, de modo que o regime em que se encontram é determinado pelo argumento

$$q = \pm\sqrt{2m(E_{NR} - V_0)}. \tag{2.7}$$

Para $E_{NR} > V_0$, $q \in \Re$ e temos soluções oscilatórias. Para $E_{NR} < V_0$, $q \in i\Re$ e as soluções tornam-se evanescentes.

No caso relativístico unidimensional as soluções da equação de Dirac são também dadas em termos de ondas planas, (1.18), mas o momento q é escrito como

$$q = \pm\sqrt{(E - V_0)^2 - m^2}. \tag{2.8}$$

Soluções oscilatórias existem então para $(E - V_0)^2 > m^2$. Esta é, porém, uma condição dupla. Tomando a raiz obtemos

$$E > V_0 + m \rightarrow \text{Zona de difusão.}$$

$E < V_0 - m \rightarrow$ Zona Klein[1].

A forma das soluções é dada deste modo, esquematicamente em função do regime de energia, por

$$\begin{array}{lll}
\underline{\hspace{2em}\text{Soluções Oscilatórias}\hspace{2em}} & V_0 + m & (\mathcal{D}) \\[1em]
\hspace{2em}\text{Soluções Evanescentes} & & (\mathcal{T}) \\[1em]
\overline{\hspace{2em}\text{Soluções Oscilatórias}\hspace{2em}} & V_0 - m & (\mathcal{K})
\end{array}$$

onde $\mathcal{D}$, $\mathcal{T}$ e $\mathcal{K}$ denotam zonas de difusão, tunelamento e a zona Klein, respectivamente. Note que para $m = 0$, o chamado limite ultra-relativístico, não há tunelamento, apenas soluções oscilatórias.

No caso planar, aplicando o potencial na direção z, o momento correspondente é dado por

$$q_z = \pm\sqrt{(E - V_0)^2 - (p_y^2 + m^2)}. \tag{2.9}$$

Definimos então

$$p_y^2 + m^2 = m_*^2 \tag{2.10}$$

de modo que

$$q_z = \pm\sqrt{(E - V_0)^2 - m_*^2}. \tag{2.11}$$

Como o movimento é limitado ao plano $y - z$ (sendo z o eixo horizontal) as componentes do momento podem ser expressas em função de θ, o ângulo de incidência na região de potencial V_0, como

$$p_y = p \sin\theta, \tag{2.12a}$$

$$p_z = p \cos\theta. \tag{2.12b}$$

Podemos desta maneira escrever m_* unicamente em termos de m, E e de θ:

$$m_* = \sqrt{p_y^2 + m^2} = \sqrt{E^2 \sin^2\theta + m^2 \cos^2\theta}. \tag{2.13}$$

[1] A zona Klein diz respeito à zona de energia onde o paradoxo de Klein é verificado, [20]. O paradoxo refere-se ao inesperado resultado da corrente de probabilidade quando elétrons, por exemplo, adentram a referida zona, sendo a corrente refletida maior que a incidente. A interpretação do paradoxo se associa à produção de pares.

Deste modo, analogamente ao caso unidimensional temos

$$
\begin{array}{ccc}
\underline{\hspace{1.5em}\text{Soluções Oscilatórias}\hspace{1.5em}} & V_0 + m_* & (\mathcal{D}) \\
\text{Soluções Evanescentes} & & (\mathcal{T}) \\
\overline{\hspace{1.5em}\text{Soluções Oscilatórias}\hspace{1.5em}} & V_0 - m_* & (\mathcal{K})
\end{array}
$$

A energia, agora, não determina sozinha a zona cinemática em que a partícula se encontra, sendo também possível transitar entre as zonas variando-se o ângulo de incidência no potencial. Soluções evanescentes existem no limite ultra-relativístico, desde que a colisão com o potencial não seja frontal ($\theta \neq 0$). Neste caso, para o qual $m_* = 0$, apenas a zona de difusão e a zona Klein são verificadas. As variações das zonas cinemáticas para diferentes parâmetros estão representadas nas figuras A.1, A.2 e A.3. No que se segue não estaremos interessados na zona Klein, uma vez que a produção de pares foge ao escopo do trabalho.

Capítulo 3

Difusão e Tunelamento Planares de Dirac

Seja $\mathbf{p}$ o momento de um estado de onda plana de uma partícula polarizada de Dirac movendo-se no plano $y-z$ a partir de z negativo. Na região delimitada pelas fronteiras $z=0$ e $z=L$ é aplicado um potencial eletrostático quadrado unidimensional $V(z)=V_0$, no qual a partícula incide com ângulo θ. As demais regiões encontram-se sob potencial nulo (figura 3.1). Este potencial pode ser expresso como

$$V(z)=\begin{cases} 0 & \text{para } \ z<0 \\ V_0 & \text{para } \ 0<z<L \\ 0 & \text{para } \ z>L \end{cases} \tag{3.1}$$

Nas regiões $z<0$ e $z>L$ as soluções do problema satisfazem a equação livre de Dirac. Na região $0<z<L$ tratamento análogo é aplicável, uma vez que a barreira de potencial é constante. É necessário apenas considerar a translação da energia $E{\rightarrow}E-V_0$ e consequentemente computar a nova relação energia-momento[1]: $(E-V_0)^2=p_x^2+p_y^2+q_z^2+m^2$.

Nosso objetivo agora é determinar os coeficientes de reflexão e transmissão para onda plana incidente e contabilizar os termos que conservam e que invertem o *spin* em cada caso. Para tal dois métodos são utilizados: análise de barreira e o cálculo de degraus. O estudo do problema por dois métodos distintos justifica-se na complementaridade de suas interpretações. Em ambos os casos, sem perda de generalidade, consideramos como incidente o estado $u_1(\mathbf{p})$.

[1]Ainda que estejamos interessados no movimento planar, a terceira componente do momento será carregada nos cálculos para a obtenção de resultados gerais para a aplicação posterior do formalismo de pacotes do ondas. Destacaremos quando p_x for considerado zero para a derivação dos resultados válidos bidimensionalmente.

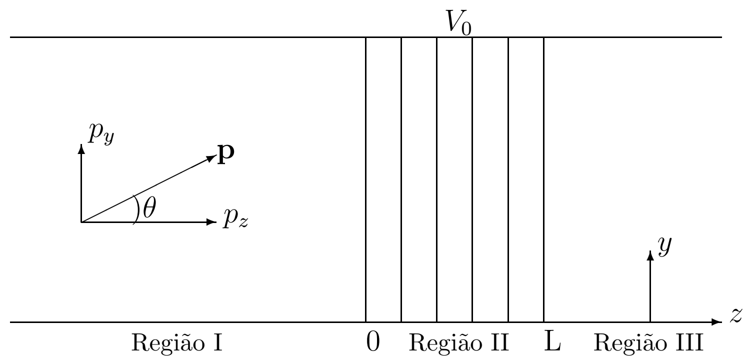

Figura 3.1: Esquematização do sistema de interesse: Uma partícula incidindo com momento $\mathbf{p}$ e ângulo θ em uma barreira de potencial unidimensional

3.1 Análise de Barreira

A análise de barreira é o mais próximo conceitualmente, para a equação de Dirac, do realizado com a equação de Schrödinger para a resolução da barreira de potencial. São escritas as funções de onda para as regiões I, II e III da figura 3.1, sendo então seus coeficientes determinados através da condição de continuidade nas fronteiras. Como, porém, a equação de Dirac é de primeira ordem, apenas a continuidade dos campos é necessária. A barreira é tomada como um todo e quaisquer processos que possam tomar parte em seu interior são contabilizados indiretamente. Sejam então as funções de onda dadas por

região I ($z < 0$):

$$\psi_I(z) = \begin{bmatrix} E+m \\ 0 \\ p_z \\ p_x + ip_y \end{bmatrix} e^{ip_z z} + \left\{ R_1 \begin{bmatrix} E+m \\ 0 \\ -p_z \\ p_x + ip_y \end{bmatrix} + R_2 \begin{bmatrix} 0 \\ E+m \\ p_x - ip_y \\ p_z \end{bmatrix} \right\} e^{-ip_z z}. \tag{3.2a}$$

Onde R_1 é o coeficiente de reflexão que conserva o *spin* e R_2 o coeficiente de *spin flip*[2].

região II ($0 < z < L$):

$$\psi_{II}(z) = \left\{ A_1 \begin{bmatrix} E-V_0+m \\ 0 \\ q_z \\ p_x + ip_y \end{bmatrix} + A_2 \begin{bmatrix} 0 \\ E-V_0+m \\ p_x - ip_y \\ -q_z \end{bmatrix} \right\} e^{iq_z z}$$

[2]Todos os coeficientes de subíndice 1 indicarão conservação de *spin* e os de subíndice 2 *spin flip*.

$$+\left\{B_1\begin{bmatrix}E-V_0+m\\0\\-q_z\\p_x+ip_y\end{bmatrix}+B_2\begin{bmatrix}0\\E-V_0+m\\p_x-ip_y\\-p_z\end{bmatrix}\right\}e^{-iq_zz}. \tag{3.2b}$$

Sendo A_1 e A_2 os coeficientes de transmissão na região II e B_1 e B_2 os de reflexão. Tais coeficientes contabilizam os processos a que a onda se sujeita no interior da região de potencial não-nulo.

região III ($z > L$):

$$\psi_{III}(z)=\left\{T_1\begin{bmatrix}E+m\\0\\p_z\\p_x+ip_y\end{bmatrix}+T_2\begin{bmatrix}0\\E+m\\p_x-ip_y\\-p_z\end{bmatrix}\right\}e^{ip_zz}. \tag{3.2c}$$

Por fim, os coeficientes T_1 e T_2 denotam os coeficientes de transmissão para conservação de *spin* e para *spin flip*, respectivamente. As condições de contorno da barreira nos informam que

$$\psi_I(0)=\psi_{II}(0), \tag{3.3a}$$

$$\psi_{II}(L)=\psi_{III}(L). \tag{3.3b}$$

Vamos então escrever a função de onda da região II, em suas fronteiras, como

$$\psi_{II}(0)=M_1\begin{bmatrix}A_1\\A_2\\B_1\\B_2\end{bmatrix}\quad \text{e}\quad \psi_{II}(L)=M_2\begin{bmatrix}A_1\\A_2\\B_1\\B_2\end{bmatrix},$$

onde M_1 e M_2 são matrizes $4{\times}4$ invertíveis. Deste modo as condições de contorno ficam

$$\psi_I(0)=M_1\begin{bmatrix}A_1\\A_2\\B_1\\B_2\end{bmatrix}, \tag{3.4a}$$

$$\psi_{III}(L)=M_2\begin{bmatrix}A_1\\A_2\\B_1\\B_2\end{bmatrix}. \tag{3.4b}$$

Agora, multiplicando (3.4b) por $M_1 M_2^{-1}$ temos

$$M_1 \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ B_1 \\ B_2 \end{bmatrix} = M_1 M_2^{-1} \psi_{III}(L). \tag{3.5}$$

Sendo que o lado esquerdo da equação acima é $\psi_I(0)$. Eliminamos assim A_1, A_2, B_1 e B_2, ficando com

$$\begin{aligned} \psi_I(0) &= M_1 M_2^{-1} \psi_{III}(L) \\ &= M \psi_{III}(L). \end{aligned} \tag{3.6}$$

$M = M_1 M_2^{-1}$ é a matriz que guarda a informação dos processos da barreira e pode ser determinada do seguinte modo:

Escritas explicitamente, as condições (3.3a) e (3.3b) ficam, respectivamente

$$\begin{bmatrix} (E+m)(1+R_1) \\ (E+m)R_1 \\ p_z(1-R_1) + (p_x - ip_y)R_2 \\ (p_x + ip_y)(1+R_1) + p_z R_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (E - V_0 + m)(A_1 + B_1) \\ (E - V_0 + m)(A_2 + B_2) \\ q_z(A_1 - B_1) + (p_x - ip_y)(A_2 + B_2) \\ (p_x + ip_y)(A_1 + B_1) - q_z(A_2 - B_2) \end{bmatrix} \tag{3.7a}$$

e

$$\begin{bmatrix} (E - V_0 + m)(A_1 e^{iq_z L} + B_1 e^{-iq_z L}) \\ (E - V_0 + m)(A_2 e^{iq_z L} + B_2 e^{-iq_z L}) \\ q_z(A_1 e^{iq_z L} - B_1 e^{-iq_z L}) + (p_x - ip_y)(A_2 e^{iq_z L} + B_2 e^{-iq_z L}) \\ (p_x + ip_y)(A_1 e^{iq_z L} + B_1 e^{-iq_z L}) - q_z(A_2 e^{iq_z L} - B_2 e^{-iq_z L}) \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} (E+m)T_1 \\ (E+m)T_2 \\ p_z T_1 + (p_x - ip_y)T_2 \\ (p_x + ip_y)T_1 - p_z T_2 \end{bmatrix} e^{ip_z L}. \tag{3.7b}$$

Buscamos expressar o lado direito de (3.7a) na forma (3.4a). Temos então que

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ B_1 \\ B_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (E - V_0 + m)(A_1 + B_1) \\ (E - V_0 + m)(A_2 + B_2) \\ q_z(A_1 - B_1) + (p_x - ip_y)(A_2 + B_2) \\ (p_x + ip_y)(A_1 + B_1) - q_z(A_2 - B_2) \end{bmatrix}, \tag{3.8}$$

onde a matriz de entradas a_{ij} é a matriz M_1. Igualando em ambos os lados da equação os termos multiplicados pelos mesmos coeficientes A_1, B_1, A_2 e B_2 obtemos

$$M_1 = \begin{bmatrix} (E-V_0+m) & 0 & (E-V_0+m) & 0 \\ 0 & (E-V_0+m) & 0 & (E-V_0+m) \\ q_z & (p_x-ip_y) & -q_z & (p_x-ip_y) \\ (p_x+ip_y) & -q_z & (p_x+ip_y) & q_z \end{bmatrix}. \tag{3.9}$$

Analogamente para o lado esquerdo de (3.7b) temos

$$\begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} & b_{14} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} & b_{24} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} & b_{34} \\ b_{41} & b_{42} & b_{43} & b_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ B_1 \\ B_2 \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} (E-V_0+m)(A_1e^{iq_zL}+B_1e^{-iq_zL}) \\ (E-V_0+m)(A_2e^{iq_zL}+B_2e^{-iq_zL}) \\ q_z(A_1e^{iq_zL}-B_1e^{-iq_zL})+(p_x-ip_y)(A_2e^{iq_zL}+B_2e^{-iq_zL}) \\ (p_x+ip_y)(A_1e^{iq_zL}+B_1e^{-iq_zL})-q_z(A_2e^{iq_zL}-B_2e^{-iq_zL}) \end{bmatrix}, \tag{3.10}$$

sendo a matriz de entradas b_{ij} a matriz M_2. Assim

$$M_2 = \begin{bmatrix} (E-V_0+m)e^{iq_zL} & 0 & (E-V_0+m)e^{-iq_zL} & 0 \\ 0 & (E-V_0+m)e^{iq_zL} & 0 & (E-V_0+m)e^{-iq_zL} \\ q_ze^{iq_zL} & (p_x-ip_y)e^{iq_zL} & -q_ze^{-iq_zL} & (p_x-ip_y)e^{-iq_zL} \\ (p_x+ip_y)e^{iq_zL} & -q_ze^{iq_zL} & (p_x+ip_y)e^{-iq_zL} & q_ze^{iq_zL} \end{bmatrix}. \tag{3.11}$$

Multiplicando então (3.9) pela inversa de (3.11) obtemos

$$M = \frac{1}{q_z} \begin{bmatrix} q_z\cos(q_zL) & i(p_x-ip_y)\sin(q_zL) & -i(E-V_0+m)\sin(q_zL) & 0 \\ -i(p_x+ip_y)\sin(q_zL) & q_z\cos(q_zL) & 0 & i(E-V_0+m)\sin(q_zL) \\ -i(E-V_0-m)\sin(q_zL) & 0 & q_z\cos(q_zL) & i(p_x-ip_y)\sin(q_zL) \\ 0 & i(E-V_0-m)\sin(q_zL) & -i(p_x+ip_y)\sin(q_zL) & q_z\cos(q_zL) \end{bmatrix}. \tag{3.12}$$

Agora, sabendo a forma da matriz M a equação (3.6) nos fornece a condição de continuidade envolvendo a barreira como um todo:

$$\begin{bmatrix} (E+m)(1+R_1) \\ (E+m)R_2 \\ p_z(1-R_1)+p_-R_2 \\ p_+(1+R_1)+p_zR_2 \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} (E+m)T_1 \\ (E+m)T_2 \\ p_zT_1+p_-T_2 \\ p_+T_1-p_zT_2 \end{bmatrix} e^{ip_zL}, \tag{3.13}$$

sendo

$$p_{\pm} = p_x \pm i p_y. \tag{3.14}$$

Resolvendo o sistema (3.13) os coeficientes tridimensionais da barreira são dados por

Coeficientes tridimensionais da barreira

$$R_1 = -i\left(m + \frac{p_x^2 + p_y^2}{E+m}\right) V_0 \frac{\sin(q_z L)}{p_z q_z \mathcal{F}}, \tag{3.15a}$$

$$R_2 = -i\frac{(p_x + ip_y)p_z}{E+m} V_0 \frac{\sin(q_z L)}{p_z q_z \mathcal{F}}, \tag{3.15b}$$

$$T_1 = \frac{e^{-ip_z L}}{\mathcal{F}}, \tag{3.15c}$$

$$T_2 = 0. \tag{3.15d}$$

Sendo $\mathcal{F}$ dado por

$$\mathcal{F} = \cos(q_z L) - i\frac{p_z^2 - EV_0}{p_z q_z} \sin(q_z L). \tag{3.16}$$

3.2 Cálculo de degraus

Antes de discutir os resultados obtidos na seção anterior vamos reobtê-los analisando o problema através do cálculo de degraus. Ao contrário da análise de barreira, o cálculo de degraus não considera a barreira de potencial como um todo mas, como o nome indica, analisa a condição de continuidade de cada degrau separadamente, determinando seus coeficientes de transmissão e de reflexão com e sem *spin flip*. Os coeficientes de transmissão e reflexão da barreira são obtidos então da adição de infinitas contribuições oriundas de interações da onda com os degraus internos da barreira, [21, 22].

3.2.1 Determinação dos coeficientes de transmissão e reflexão dos degraus

Dividindo a barreira em três degraus temos:

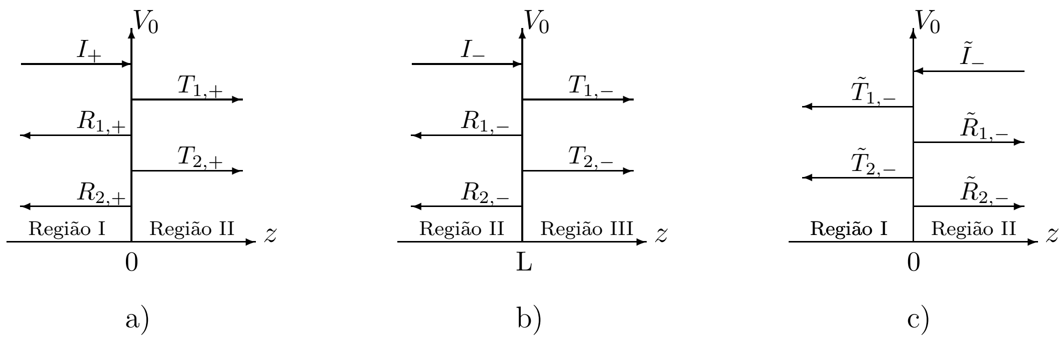

Figura 3.2: Degraus componentes da Barreira. a) Primeiro degrau, em $z = 0$. b) Segundo degrau, em $z = L$. c) Terceiro degrau, em $z = 0$ com incidência pela direita

Onde I denota o estado incidente. Os coeficientes R e T representam, como anteriormente, termos refletidos e transmitidos, respectivamente. Os índices $+$ e $-$ indicam se o degrau representa um aumento de potencial, o primeiro caso, ou uma diminuição, o segundo. Subíndices 1 denotam conservação de *spin* e 2 *spin flip*. Por fim, $\tilde{R}$ e $\tilde{T}$ indicam termos que refletem no, e transmitem através do degrau em $z = 0$ incidindo pela direita (o que denotamos como um terceiro degrau), respectivamente.

Consideremos então uma onda plana polarizada incidindo pela esquerda no primeiro degrau ($z = 0$) da barreira de potencial. A condição de continuidade da fronteira é dada por

$$\begin{bmatrix} E+m \\ 0 \\ p_z \\ p_x + ip_y \end{bmatrix} + \left\{ R_{1,+}(0) \begin{bmatrix} E+m \\ 0 \\ -p_z \\ p_x + ip_y \end{bmatrix} + R_{2,+}(0) \begin{bmatrix} 0 \\ E+m \\ p_x - ip_y \\ p_z \end{bmatrix} \right\}$$

$$= \frac{E+m}{E-V_0+m} \left\{ T_{1,+}(0) \begin{bmatrix} E-V_0+m \\ 0 \\ q_z \\ p_x + ip_y \end{bmatrix} + T_{2,+}(0) \begin{bmatrix} 0 \\ E-V_0+m \\ p_x - ip_y \\ -p_z \end{bmatrix} \right\}. \tag{3.17}$$

Esta pode ser reescrita como

$$\begin{bmatrix} (E+m)(1+R_{1,+}(0)) \\ (E+m)R_{2,+}(0) \\ p_z(1-R_{1,+}(0))+p_-R_{2,+}(0) \\ p_+(1+R_{1,+}(0))+p_zR_{2,+}(0) \end{bmatrix} = \frac{E+m}{E-V_0+m} \begin{bmatrix} (E-V_0+m)T_{1,+}(0) \\ (E-V_0+m)T_{2,+}(0) \\ q_zT_{1,+}(0)+p_-T_{2,+}(0) \\ p_+T_{1,+}(0)-q_zT_{2,+}(0) \end{bmatrix}, \tag{3.18}$$

sendo $p_\pm$ dado por (3.14). Resolvendo o sistema encontramos

Coeficientes tridimensionais do degrau de potencial em $z = 0$

$$R_{1,+}(0) = \frac{(p_x^2+p_y^2+m(E+m))V_0}{(E+m)(p_z^2+p_zq_z-EV_0)}, \tag{3.19a}$$

$$R_{2,+}(0) = \frac{(p_x+ip_y)p_zV_0}{(E+m)(p_z^2+p_zq_z-EV_0)}, \tag{3.19b}$$

$$T_{1,+}(0) = \frac{p_z^2(E-V_0+m)+p_zq_z(E+m)}{(E+m)(p_z^2+p_zq_z-EV_0)}, \tag{3.19c}$$

$$T_{2,+}(0) = \frac{(p_x+ip_y)p_zV_0}{(E+m)(p_z^2+p_zq_z-EV_0)}. \tag{3.19d}$$

Analogamente, a condição de continuidade para o degrau em $z = L$ pode ser escrita como

$$\begin{bmatrix} (E-V_0+m)(R_{1,-}(L)e^{-2iq_zL}+1) \\ (E-V_0+m)R_{2,-}(L)e^{-2iq_zL} \\ q_z(1-R_{1,-}(L)e^{-2iq_zL})+p_-R_{2,-}(L)e^{-2iq_zL} \\ p_+(1+R_{1,-}(L)e^{-2iq_zL})+q_zR_{2,-}(L)e^{-2iq_zL} \end{bmatrix}$$

$$= \frac{E - V_0 + m}{E + m} \begin{bmatrix} (E+m)T_{1,-}(L) \\ (E+m)T_{2,-}(L) \\ p_z T_{1,-}(L) + p_- T_{2,-}(L) \\ p_+ T_{1,-}(L) - p_z T_{2,-}(L) \end{bmatrix} e^{i(p_z - q_z)L}, \tag{3.20}$$

sendo as soluções deste sistema dadas por

Coeficientes tridimensionais do degrau de potencial em $z = L$

$$R_{1,-}(L) = -\frac{(p_x^2 + p_y^2 + m(E - V_0 + m))V_0}{(E - V_0 + m)(p_z^2 + p_z q_z - EV_0)} e^{2iq_z L}, \tag{3.21a}$$

$$R_{2,-}(L) = -\frac{(p_x + ip_y)q_z V_0}{(E - V_0 + m)(p_z^2 + p_z q_z - EV_0)} e^{2iq_z L}, \tag{3.21b}$$

$$T_{1,-}(L) = \frac{(q_z^2(E + m) + p_z q_z(E - V_0 + m))}{(E - V_0 + m)(p_z^2 + p_z q_z - EV_0)} e^{-i(p_z - q_z)L}, \tag{3.21c}$$

$$T_{2,-}(L) = -\frac{(p_x + ip_y)q_z V_0}{(E - V_0 + m)(p_z^2 + p_z q_z - EV_0)} e^{-i(p_z - q_z)L}. \tag{3.21d}$$

Finalmente, para o terceiro degrau ($z = 0$ incidindo-se pela direita) temos

$$\begin{bmatrix} (E - V_0 + m)(1 + \tilde{R}_{1,-}(0)) \\ (E - V_0 + m)\tilde{R}_{2,-}(0) \\ q_z(\tilde{R}_{1,-}(0) - 1) + p_-\tilde{R}_{2,-}(O) \\ p_+(1 + \tilde{R}_{1,-}(0)) - q_z\tilde{R}_{2,-}(0) \end{bmatrix} = \frac{E - V_0 + m}{E + m} \begin{bmatrix} (E+m)\tilde{T}_{1,-}(0) \\ (E+m)\tilde{T}_{2,-}(0) \\ -p_z\tilde{T}_{1,-}(0) + p_-\tilde{T}_{2,-}(0) \\ p_+\tilde{T}_{1,-}(0) + p_z\tilde{T}_{2,-}(0) \end{bmatrix}, \tag{3.22}$$

de onde obtemos

Coeficientes tridimensionais do degrau de potencial em $z = 0$ com incidência pela direita

$$\tilde{R}_{1,-}(0) = -\frac{(p_x^2 + p_y^2 + m(E - V_0 + m))V_0}{(E - V_0 + m)(p_z^2 + p_z q_z - EV_0)}, \tag{3.23a}$$

$$\tilde{R}_{2,-}(0) = \frac{(p_x + ip_y)q_z V_0}{(E - V_0 + m)(p_z^2 + p_z q_z - EV_0)}, \tag{3.23b}$$

$$\tilde{T}_{1,-}(0) = \frac{q_z^2(E + m) + p_z q_z (E - V_0 + m)}{(E - V_0 + m)(p_z^2 + p_z q_z - EV_0)}, \tag{3.23c}$$

$$\tilde{T}_{2,-}(0) = \frac{(p_x + ip_y)q_z V_0}{(E - V_0 + m)(p_z^2 + p_z q_z - EV_0)}. \tag{3.23d}$$

Antes de reobtermos os resultados (3.15) é interessante compará-los com o obtido para os degraus. No caso unidimensional ($p_x = p_y = 0$), equivalente a uma colisão frontal, todos os coeficientes de *spin flip* são identicamente nulos, tanto para a barreira quanto para cada degrau individualmente, concordando com [15]. Permitindo à partícula mover-se bidimensionalmente (fazendo apenas $p_x = 0$) passa a existir um termo reflexivo de *spin flip* para a barreira, (3.15b), mas o fenômeno não é observado para partículas que a atravessam, (3.15d), contrastando com o fato de que nenhum degrau apresenta coeficientes identicamente nulos[3], como obtido em [16]. O método dos degraus, desenvolvido na próxima seção, faz a esperada conexão entre os resultados dos degraus e da barreira, visto serem os primeiros componentes da última, e mostra não ser a ausência de transmissão com *spin flip* um fenômeno de ressonância.

[3] O mesmo vale para a forma tridimensional dos coeficientes.

3.2.2 Cálculo dos coeficientes da barreira a partir dos resultados dos degraus

Passemos agora para o cálculo dos coeficientes da barreira pelo cálculo de degraus propriamente dito. Para as partículas que a atravessam, após a colisão em $z = 0$ duas contribuições se propagam para $0 < z < L$, uma conservando o *spin* inicial, representada por $T_{1,+}(0)$ e outra o invertendo, representada por $T_{2,+}(0)$. Após a colisão com o segundo degrau, cada uma destas contribuições gera outras duas que se propagam em $z > L$. Estes quatro termos transmitidos podem ser agrupados em duas amplitudes, uma que conserva o *spin* incidente,

$$A_{T,1} = T_{1,+}(0)T_{1,-}(L) + T_{2,+}(0)T_{2,-}(L), \tag{3.24a}$$

e outra que o inverte,

$$A_{T,2} = T_{1,+}(0)T_{2,-}(L) + T_{2,+}(0)T_{1,-}(L). \tag{3.24b}$$

Utilizando então os resultados obtidos anteriormente para os coeficientes dos degraus obtemos

$$A_{T,1} = \frac{2p_z q_z}{p_z^2 + p_z q_z - EV_0} e^{i(q_z - p_z)L}, \tag{3.25a}$$

$$A_{T,2} = 0. \tag{3.25b}$$

Estas são, entretanto, contribuições de primeira ordem da onda transmitida através da barreira. Termos de ordens superiores são obtidos por múltiplas reflexões internas. As amplitudes reflexivas de primeira ordem consideram que a partícula, após ser transmitida através do primeiro degrau reflete em $z = L$ e, incidindo pela direita, torna a refletir em $z = 0$. Tais amplitudes são dadas por

$$A_{R,1} = R_{1,-}(L)\tilde{R}_{1,-}(0) + R_{2,-}(L)\tilde{R}_{2,-}(0) = \frac{(E^2 - p_z^2)V_0^2}{(p_z^2 + p_z q_z - EV_0)^2} e^{2iq_z L}, \tag{3.26a}$$

$$A_{R,2} = R_{1,-}(L)\tilde{R}_{2,-}(0) + R_{2,-}(L)\tilde{R}_{1,-}(0) = 0. \tag{3.26b}$$

Vemos assim que a contribuição de segunda ordem para a amplitude de *spin flip* é identicamente nula:

$$A_{T,1}A_{R,2} + A_{T,2}A_{R,1} = 0. \tag{3.27}$$

As ordens superiores são construídas como uma série de potências nos termos reflexivos, uma vez que a onda é transmitida apenas duas vezes (uma em cada degrau) mas pode refletir indefinidamente dentro da zona de potencial não-nulo. Deste modo vemos que a amplitude total para transmissão com *spin flip*, que corresponde ao coeficiente de transmissão com inversão de *spin*, é

$$T_2 = A_{T,2} + (A_{T,1}A_{R,2} + A_{T,2}A_{R,1}) \sum_{i=0}^{\infty} A^i_{R,1} = 0. \tag{3.28}$$

Para as contribuições que conservam o *spin* temos

$$A_{T,1}A_{R,1} + A_{T,2}A_{R,2} = A_{T,1}A_{R,1}. \tag{3.29}$$

A série conservante é então

$$T_1 = A_{T,1} \sum_{i=0}^{\infty} A^i_{R,1} = \frac{A_{T,1}}{1 - A_{R,1}} \tag{3.30}$$

$$= \frac{e^{-ip_z L}}{\mathcal{F}}. \tag{3.31}$$

Quanto às partículas refletidas pela barreira, o primeiro termo de cada série é dado pelo coeficiente de reflexão do primeiro degrau: $R_{1,+}(0)$ para conservação de *spin* e $R_{2,+}(0)$ para a inversão. O segundo termo, por sua vez, é o resultado de uma transmissão pelo primeiro degrau, uma reflexão no segundo e finalmente uma transmissão pelo terceiro:

$$\begin{aligned} A_{\tilde{T},1} &= \left[T_{2,+}(0)R_{1,-}(L) + T_{1,+}(0)R_{2,-}(L)\right]\tilde{T}_{2,-}(0) \\ &+ \left[T_{1,+}(0)R_{1,-}(L) + T_{2,+}(0)R_{2,-}(L)\right]\tilde{T}_{1,-}(0), \end{aligned} \tag{3.32a}$$

$$\begin{aligned} A_{\tilde{T},2} &= \left[T_{2,+}(0)R_{2,-}(L) + T_{1,+}(0)R_{1,-}(L)\right]\tilde{T}_{2,-}(0) \\ &+ \left[T_{2,+}(0)R_{1,-}(L) + T_{1,+}(0)R_{2,-}(L)\right]\tilde{T}_{1,-}(0). \end{aligned} \tag{3.32b}$$

Como no caso dos coeficientes de transmissão, termos de ordens superiores devem-se aos *loops* internos e deste modo as séries dos coeficientes reflexivos são escritas como

$$R_1 = R_{1,+}(0) + A_{\tilde{T},1} \sum_{i=0}^{\infty} A^i_{R,1}, \tag{3.33}$$

$$R_2 = R_{2,+}(0) + A_{\tilde{T},2} \sum_{i=0}^{\infty} A^i_{R,1}. \tag{3.34}$$

E disto, obtemos

$$R_1 = -i\left(m + \frac{p_x^2 + p_y^2}{E + m}\right) V_0 \frac{\sin(q_z L)}{p_z q_z \mathcal{F}}, \tag{3.35}$$

$$R_2 = -i\frac{(p_x + ip_y)p_z}{E+m}V_0\frac{\sin(q_zL)}{p_zq_z\mathcal{F}}. \tag{3.36}$$

As equações (3.28), (3.31), (3.35) e (3.36), obtidas pelo cálculo de degraus, são as mesmas equações (3.15), obtidas pela análise de barreira, como esperado. Da série somada de transmissão conservante, (3.31), utilizando a equação (3.16), podemos determinar a probabilidade de transmissão sem inversão de *spin* como

$$|T_1|^2 = \left[\cos^2(q_zL) + \left|\frac{p_z^2 - EV_0}{p_zq_z}\right|^2 \sin^2(q_zL)\right]^{-1}. \tag{3.37}$$

Esta é uma função oscilante na largura da barreira para valores de E e θ na zona de difusão e podemos assim observar ressonâncias no sistema. Para

$$q_zL = n\frac{\pi}{2}, \tag{3.38}$$

com n positivo e ímpar, ela atinge seu valor mínimo:

$$|T_1|^2 = \frac{p_z^2q_z^2}{[p_z^2 - EV_0]^2}. \tag{3.39}$$

Já para

$$q_zL = n\pi, \tag{3.40}$$

com n inteiro positivo, $|T_1|^2 = 1$ e, de (3.35) e (3.36), R_1 e R_2 se anulam. Para valores de energia e ângulo de incidência na zona de tunelamento, q_z torna-se complexo puro e as funções trigonométricas tornam-se hiperbólicas, fazendo a probabilidade de transmissão cair rapidamente.

Poderia-se pensar que ressonância também é encontrada no caso de transmissões com inversão de *spin*, sendo de fato a razão pela qual $|T_2|^2 = 0$. O cálculo de degraus, entretanto, nos fornece os coeficientes da barreira em forma de séries, permitindo assim a soma incoerente das probabilidades a eles associadas. Somas coerentes e incoerentes de uma série dizem respeito à maneira como o módulo quadrado da série é calculado. Se computado coerentemente ele é equivalente ao módulo quadrado da soma ao passo que se computado incoerentemente equivale à soma dos módulos quadrados de cada termo na série. No primeiro caso originam-se termos mistos e podemos dizer que cada termo da série, correspondente a uma ordem de transmissão (ou reflexão), "interfere" com os demais. Esta "interferência" é característica do fenômeno ondulatório possibilitando ressonâncias no sistema. No segundo caso cada termo é independente não havendo interferências. Assim, uma vez que $|T_2|^2 = 0$ independentemente de ser somado coerentemente ou incoerentemente, vemos que a ausência de transmissão com *spin flip* não é um fenômeno ressonante.

Capítulo 4

Análise de *spin*

Estamos agora interessados no efeito da barreira de potencial sobre o valor esperado do *spin* das ondas planas que transmitem através dela ou são por ela refletidas. Sendo S_z o operador de *spin* ao longo da direção z, seu valor esperado pode ser calculado como

$$\langle S_z \rangle = \frac{1}{2} \frac{u^\dagger \Sigma_z u}{u^\dagger u}, \tag{4.1}$$

onde

$$\Sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}. \tag{4.2}$$

Uma vez que a definição dada pela equação (4.1) é normalizada, toda análise realizada para a onda plana incidente se aplica à transmitida (devido à ausência de transmissões com *spin flip*).

4.1 *Spin* do estado incidente

Sendo $u_1(\mathbf{p})$ o estado incidente, a equação (4.1) fica

$$\begin{aligned}
\langle S_z \rangle_{in} &= \frac{1}{4E(E+m)} \begin{bmatrix} E+m, & 0, & p_z, & p_x - ip_y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E+m \\ 0 \\ p_z \\ p_x + ip_y \end{bmatrix} \\
&= \frac{1}{4E(E+m)} \left[(E+m)^2 + p_z^2 - (p_x^2 + p_y^2) \right] \\
&= \frac{1}{4E(E+m)} \left[(E+m)^2 + \mathbf{p}^2 - 2(p_x^2 + p_y^2) \right]
\end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2} - \frac{p_x^2 + p_y^2}{2E(E+m)}. \tag{4.3}$$

Considerando então p_x tendendo a zero, de modo que o movimento se restrinja ao plano $y - z$, temos que $p_y = |\mathbf{p}| \sin\theta$ e assim

$$\boxed{\langle S_z \rangle_{in} = \frac{1}{2} - \frac{(E-m)\sin^2\theta}{2E}. \qquad (4.4)}$$

Conduzindo o mesmo procedimento com $u_2(\mathbf{p})$ obtemos, como esperado

$$\boxed{\langle S_z \rangle_{in} = -\frac{1}{2} + \frac{(E-m)\sin^2\theta}{2E}. \qquad (4.5)}$$

A dependência de $\langle S_z \rangle_{in}$ com a razão E/m é uma característica relativística, sendo o limite não-relativístico da expressão (4.4) independente do ângulo de incidência:

$$\lim_{E \to m} \langle S_z \rangle_{in} = \frac{1}{2}. \tag{4.6}$$

O limite ultra-relativístico, por sua vez, é

$$\lim_{m \to 0} \langle S_z \rangle_{in} = \frac{\cos^2\theta}{2}. \tag{4.7}$$

Curvas de nível para (4.4) com valores fixos de *spin* médio encontram-se em na figura A.4.

Afim de melhor apreciarmos o comportamento de $\langle S_z \rangle_{in}$ em (4.4) vamos analisar a equação como uma função de duas variáveis (E/m e $\sin\theta$) cujos domínios são

$$E/m \;\in\; [0{,}\infty[\;\;, \tag{4.8}$$

$$\sin\theta \;\in\; [0{,}1[\;\;. \tag{4.9}$$

Rearranjando $\langle S_z \rangle_{in}$ como

$$\langle S_z \rangle_{in} = \frac{1 - \sin^2\theta}{2} + \frac{\sin^2\theta}{2E/m} \tag{4.10}$$

notamos que, uma vez que $\sin\theta < 1$ é sempre válido (para $\theta = \pi/2$ não há colisão) o *spin* médio é positivo definido, ou seja, mesmo que uma série de medidas de $\langle S_z \rangle_{in}$ varie com a energia e com o ângulo entre o eixo de movimento da partícula e o eixo da medida, não há inversão do sinal do *spin*. Além disso pode-se mostrar que não apenas $\langle S_z \rangle_{in} \in \Re^+$ como também que $\langle S_z \rangle_{in} \neq 0$:

Assumindo que $\langle S_z \rangle_{in} = 0$ temos

$$\sin^2\theta = 1 + \frac{\sin^2\theta}{E/m},$$

$$\sin^2\theta = \frac{E/m}{E/m - 1} > 1. \tag{4.11}$$

Logo $\langle S_z \rangle_{in} \neq 0$ necessariamente.

4.2 *Spin* do estado refletido

O estado refletido, por sua vez, é dado por

$$u(\tilde{\mathbf{p}}) = R_1 u_1(\tilde{\mathbf{p}}) + R_2 u_2(\tilde{\mathbf{p}}) \tag{4.12}$$

$$= \frac{R_1}{\sqrt{2E(E+m)}} \begin{pmatrix} E+m \\ 0 \\ -p_z \\ p_x + ip_y \end{pmatrix} + \frac{R_2}{\sqrt{2E(E+m)}} \begin{pmatrix} 0 \\ E+m \\ p_x - ip_y \\ p_z \end{pmatrix}. \tag{4.13}$$

Onde $\tilde{\mathbf{p}} = (p_x, p_y, -p_z)$. O valor esperado do *spin* é então

$$\langle S_z \rangle_{ref} = \frac{1}{|R_1|^2 + |R_2|^2} \left\{ \left(\frac{1}{2} - \frac{p_x^2 + p_y^2}{2E(E+m)} \right) (|R_1|^2 - |R_2|^2) \right.$$

$$\left. + \frac{1}{2} \left(R_1^* R_2 u_1^\dagger(\tilde{\mathbf{p}}) \Sigma_z u_2(\tilde{\mathbf{p}}) + h.c. \right) \right\}, \tag{4.14}$$

com

$$u_1^\dagger(\tilde{\mathbf{p}}) \Sigma_z u_2(\tilde{\mathbf{p}}) = -\frac{p_z(p_x - ip_y)}{E(E+m)}, \tag{4.15a}$$

$$u_2^\dagger(\tilde{\mathbf{p}}) \Sigma_z u_1(\tilde{\mathbf{p}}) = -\frac{p_z(p_x + ip_y)}{E(E+m)}. \tag{4.15b}$$

Escrevendo então

$$|R_1|^2 - |R_2|^2 = |R_1|^2 + |R_2|^2 - 2|R_2|^2, \tag{4.16}$$

obtemos

$$\langle S_z \rangle_{ref} = \langle S_z \rangle_{in} - \frac{|R_2|^2}{|R_1|^2 + |R_2|^2} \frac{E+m}{E}. \tag{4.17}$$

Note que na expressão acima $\langle S_z \rangle_{in}$ corresponde ainda à versão da equação (4.3). Fazendo então $p_x = 0$ temos

$$\boxed{\langle S_z \rangle_{ref} = \left(\frac{1}{2} - \frac{(E-m)\sin^2\theta}{2E} \right) - \left[\frac{(E-m)^2 \sin^2\theta \cos^2\theta}{m^2 + (E^2 - m^2)\sin^2\theta} \right] \frac{E+m}{E}. \qquad (4.18)}$$

O valor esperado do *spin* refletido é escrito como o valor do *spin* incidente menos um termo dependente de θ e da energia. Este termo, porém, tende a zero no limite não-relativístico[1] e assim

$$\lim_{E \to m} \langle S_z \rangle_{ref} = \langle S_z \rangle_{in} = \frac{1}{2}. \tag{4.19}$$

Já no limite ultra-relativístico temos

$$\lim_{m \to 0} \langle S_z \rangle_{ref} = -\frac{\cos^2\theta}{2}. \tag{4.20}$$

Note, porém, que a equação (4.20) é válida apenas para $\theta \neq 0$. Como dito na seção 2.2, no limite ultra-relativístico não há tunelamento para colisões frontais. Isto pode ser verificado diretamente dos coeficientes de reflexão, (3.15a) e (3.15b), os quais se anulam nesse caso. Deste modo a medida do *spin* refletido sob estas circunstâncias não é física, visto que nenhuma partícula está sendo refletida.

As restrições sobre os valores do *spin* encontradas no estado incidente não são mais aplicáveis ao estado refletido, como mostram as curvas de nível na figura A.5.

4.3 Comparações entre os estados incidente e refletido

De (4.6) e (4.19) vemos que, no limite não-relativístico, $\Delta \langle S_z \rangle = \langle S_z \rangle_{in} - \langle S_z \rangle_{ref}$ é identicamente nulo. Deste modo é interessante saber sob quais condições existe a máxima separação entre os valores esperados do *spin* incidente e do *spin* refletido, como um modo de detectar efeitos relativísticos no sistema. Uma vez que o ângulo de incidência e a energia de um feixe de partículas são usualmente parâmetros controláveis experimentalmente, a pergunta a ser respondida é "para quais combinações de ângulo e energia $\Delta \langle S_z \rangle$ é maximizado?". Temos que

$$\Delta \langle S_z \rangle = \left[\frac{(E-m)^2 \sin^2\theta \cos^2\theta}{m^2 + (E^2 - m^2)\sin^2\theta} \right] \frac{E+m}{E}. \tag{4.21}$$

[1] Isso ocorre pois, de acordo com (3.15b), para $p_x = 0$, $R_2 \propto \mathbf{p}^2 \sin\theta \cos\theta$ e no limite não-relativístico $\mathbf{p}^2 = E^2 - m^2$ tende à zero.

Assim, sendo $\sin\theta_{max\Delta\langle S_z\rangle}$ o seno do ângulo para o qual a separação entre os *spins* é máxima, temos

$$\sin\theta_{max\Delta\langle S_z\rangle} = \sqrt{\frac{m}{E+m}}. \tag{4.22}$$

Analogamente, o seno do ângulo para o qual $\langle S_z\rangle_{ref}$ é minimizado é dado por

$$\sin\theta_{min\langle S_z\rangle_{ref}} = \sqrt{\frac{(\sqrt{2}E-m)m}{E^2-m^2}}. \tag{4.23}$$

Os valores de $\sin\theta_{max\Delta\langle S_z\rangle}$ e $\sin\theta_{min\langle S_z\rangle_{ref}}$, para diferentes razões E/m, estão representados na tabela (4.1). Gráficos de *spin* incidente e *spin* refletido como função de $\sin\theta$ encontram-se na figura A.6. Curvas de nível para $\Delta\langle S_z\rangle$ são representadas nas figuras A.7 e A.8.

E/m	$\sin\theta_{max\Delta\langle S_z\rangle}$	$\sin\theta_{min\langle S_z\rangle_{ref}}$
1.5	0.632	0.947
3	0.5	0.637
5	0.408	0.503
10	0.302	0.364

Tabela 4.1: Ângulos que maximizam a separação entre *spins* e minimizam o *spin* refletido para diferentes razões energia/massa

Capítulo 5

O Formalismo dos Pacotes de Ondas

5.1 Construção do Pacote de Ondas

Ondas planas possuem momento bem definido e consequentemente se estendem infinitamente pelo espaço de coordenadas. Elas são, entretanto, abstrações teóricas, em bom acordo com a realidade apenas para larguras do pacote de ondas muito grandes em relação à largura da barreira, [16]. O formalismo de pacotes de ondas nos permite então uma abordagem mais geral, construindo soluções da equação de Dirac localizadas espacialmente. O pacote de ondas de Dirac mais genérico que podemos construir é uma superposição de estados de ondas planas de partículas e antipartículas, moduladas por uma distribuição de momentos, [6, 12]

$$\psi(\mathbf{r},t) = N \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \sum_{j=1}^{2} \left[b(\mathbf{p},j) u_j(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-iEt} + d^*(\mathbf{p},j) v_j(\mathbf{p}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}+iEt} \right]. \qquad (5.1)$$

Afim, porém, de se estabelecer um grau de comparação com os resultados obtidos anteriormente para ondas planas, utilizaremos apenas os estados apropriados de partículas. O estado incidente será então escrito simplesmente como

$$\psi(\mathbf{r},t) = N \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} G(\mathbf{p}) u_1(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-iEt}, \qquad (5.2)$$

onde $G(\mathbf{p})$ é uma distribuição de momentos a ser escolhida.

5.1.1 A Escolha Estacionária da Distribuição de Momentos

A energia, como aparece na equação (5.2), não é uma quantidade fixa. Ela é dada pela relação

$$E^2 = \mathbf{p}^2 + m^2 \tag{5.3}$$

e varia juntamente com o momento na integração, tornando o processo não-estacionário. É, entretanto, de nosso interesse estudar um cenário onde a energia seja constante, como no caso de um *laser* de elétrons relativísticos. Podemos alcançar este objetivo através de uma escolha estacionária da distribuição de momentos, utilizando a delta de Dirac. Seja então $G(\mathbf{p})$ escrita na forma

$$G(\mathbf{p}) = \delta\left(p_z - \sqrt{\mathbf{p}^2 - p_x^2 - p_y^2}\right) g(p_x,p_y), \tag{5.4}$$

sendo $\mathbf{p}^2$ um valor fixo. Essa escolha permite que p_z seja expresso em termos das outras componentes do momento de modo que p_x e p_y possam variar continuamente em (5.2) mas a soma $p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$ permaneça constante, fixando também a energia.

5.1.2 Normalização

Dispondo p_z em uma distribuição tipo delta de Dirac a condição de normalização de $\psi(\mathbf{r},t)$ passa a ser dada por

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dxdy|\psi(\mathbf{r},t)|^2 = 1. \tag{5.5}$$

Utilizando então (5.2) temos que

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dxdydp_xdp_ydp'_xdp'_y g(p_x,p_y)g^*(p'_x,p'_y)$$

$$\times e^{i(p_x-p'_x)x}e^{i(p_y-p'_y)y}e^{i(p_z-p'_z)z}e^{-i(E-E')t}$$

$$\times \frac{|N|^2}{\sqrt{2E'(E'+m)}\sqrt{2E(E+m)}}\left[E'+m,\ 0,\ p'_z,\ p'_x - ip'_y\right]\begin{bmatrix} E+m \\ 0 \\ p_z \\ p_x + ip_y \end{bmatrix} = 1,$$

onde $p_z = \sqrt{\mathbf{p}^2 - p_x^2 - p_y^2}$. As integrais espaciais retornam

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dxdy e^{i(p_x-p'_x)x}e^{i(p_y-p'_y)y} = 4\pi^2\delta(p_x - p'_x)\delta(p_y - p'_y). \tag{5.6}$$

Desta maneira a condição de normalização fica

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y |N|^2 |g(p_x,p_y)|^2 \frac{(E+m)^2+\mathbf{p}^2}{2E(E+m)} = \frac{1}{4\pi^2},$$

$$|N|^2 \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y |g(p_x,p_y)|^2 = \frac{1}{4\pi^2}. \tag{5.7}$$

Escolhendo uma distribuição gaussiana para p_x e p_y temos

$$g(p_x,p_y) = e^{-p_x^2 \frac{\mathrm{w}_0^2}{4}} e^{-(p_y - |\mathbf{p}|\sin\theta)^{\mathbf{2}} \frac{\mathbf{w_0^2}}{\mathbf{4}}}, \tag{5.8}$$

onde w_0 é a abertura do pacote no espaço de coordenadas. Note que a distribuição de p_x é colocada ao redor de zero de modo que, como no caso de ondas planas, há uma restrição ao plano $y - z$. O fator de normalização fica

$$|N|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-p_x^2 \frac{\mathrm{w}_0^2}{2}} dp_x \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(p_y - |\mathbf{p}|\sin\theta)^2 \frac{\mathrm{w}_0^2}{2}} dp_y = \frac{1}{4\pi^2},$$

$$|N|^2 \frac{2\pi}{\mathrm{w}_0^2} = \frac{1}{4\pi^2},$$

$$N = \frac{\mathrm{w}_0}{2\pi\sqrt{2\pi}}. \tag{5.9}$$

5.1.3 O Pacote Normalizado

A forma integral do pacote de ondas normalizado é dada por

$$\psi(\mathbf{r},t) = \frac{\mathrm{w}_0}{2\pi\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y \frac{e^{-iEt}}{\sqrt{2E(E+m)}} \begin{bmatrix} E+m \\ 0 \\ p_z \\ p_x + ip_y \end{bmatrix} e^{-p_x^2 \frac{\mathrm{w}_0^2}{4}} e^{ip_x x} e^{-(p_y - |\mathbf{p}|\sin\theta)^2 \frac{\mathrm{w}_0^2}{4}} e^{ip_y y} e^{ip_z z}. \tag{5.10}$$

Afim de melhor abordar esta integral façamos a seguinte mudança de variável: Seja

$$\tilde{p}_y = p_y - |\mathbf{p}|\sin\theta, \tag{5.11}$$

tal que

$$d\tilde{p}_y = dp_y. \tag{5.12}$$

Esta mudança modifica o bispinor em (5.10) como

$$\begin{bmatrix} E+m \\ 0 \\ p_z \\ p_x+ip_y \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{bmatrix} E+m \\ 0 \\ p_z \\ p_x+i\tilde{p}_y+i|\mathbf{p}|\sin\theta \end{bmatrix}.$$

Além disso, a escolha estacionária estabelece p_z em termos de p_x e p_y. Deste modo

$$p_z = \sqrt{\mathbf{p}^2 - p_x^2 - p_y^2} = \sqrt{\mathbf{p}^2 - p_x^2 - (\tilde{p}_y + |\mathbf{p}|\sin\theta)^2}$$

$$= \sqrt{\mathbf{p}^2 - p_x^2 - \tilde{p}_y^2 - 2|\mathbf{p}|\tilde{p}_y\sin\theta - \mathbf{p}^2\sin^2\theta}$$

$$= \sqrt{\mathbf{p}^2\cos^2\theta - p_x^2 - \tilde{p}_y{}^2 - 2|\mathbf{p}|\tilde{p}_y\sin\theta}.$$

O que nos fornece

$$p_z = |\mathbf{p}|\cos\theta\sqrt{1 - \frac{2\tilde{p}_y\sin\theta}{|\mathbf{p}|\cos^2\theta} - \frac{(p_x^2+\tilde{p}_y^2)}{\mathbf{p}^2\cos^2\theta}}. \tag{5.13}$$

Em primeira ordem nas componentes do momento temos

$$p_z \;\simeq\; |\mathbf{p}|\cos\theta - \tilde{p}_y\tan\theta. \tag{5.14}$$

O pacote fica então

$$\psi(\mathbf{r},t) = \frac{\mathrm{w}_0}{2\pi\sqrt{2\pi}}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dp_x d\tilde{p}_y \frac{e^{-iEt}e^{i|\mathbf{p}|(y\sin\theta+z\cos\theta)}}{\sqrt{2E(E+m)}}\begin{bmatrix} E+m \\ 0 \\ |\mathbf{p}|\cos\theta - \tilde{p}_y\tan\theta \\ p_x+i\tilde{p}_y+i|\mathbf{p}|\sin\theta \end{bmatrix} e^{-p_x^2\frac{\mathrm{w}_0^2}{4}}e^{ip_xx}$$

$$\times e^{-\tilde{p}_y^2\frac{\mathrm{w}_0^2}{4}}e^{i\tilde{p}_yy}e^{-i\tilde{p}_yz\tan\theta}. \tag{5.15}$$

Note que $\psi(\mathbf{r},t)$ pode ser escrita da seguinte maneira

$$\psi(\mathbf{r},t) = \frac{e^{-iEt}e^{i|\mathbf{p}|(y\sin\theta+z\cos\theta)}}{\sqrt{2E(E+m)}}$$

$$\times \left\{ \begin{bmatrix} E+m \\ 0 \\ |\mathbf{p}|\cos\theta \\ i|\mathbf{p}|\sin\theta \end{bmatrix} \mathcal{G} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ i\tan\theta \\ 1 \end{bmatrix} \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial y} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -i \end{bmatrix} \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial x} \right\}. \tag{5.16}$$

Sendo

$$\mathcal{G} = \frac{\mathrm{w}_0}{2\pi\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dp_x e^{-p_x^2 \frac{\mathrm{w}_0^2}{4}} e^{ip_x x} \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{p}_y e^{-\tilde{p}_y^2 \frac{\mathrm{w}_0^2}{4}} e^{i\tilde{p}_y (y - z\tan\theta)},$$

$$\mathcal{G} = \frac{2}{\mathrm{w}_0\sqrt{2\pi}} e^{\frac{-x^2}{\mathrm{w}_0^2}} e^{\frac{-(y\cos\theta - z\sin\theta)^2}{\mathrm{w}_0^2\cos^2\theta}}. \tag{5.17}$$

Temos então que

$$\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial y} = -\frac{4(y\cos\theta - z\sin\theta)}{\mathrm{w}_0^3\sqrt{2\pi}\cos\theta} e^{\frac{-x^2}{\mathrm{w}_0^2}} e^{\frac{-(y\cos\theta - z\sin\theta)^2}{\mathrm{w}_0^2\cos^2\theta}} \tag{5.18}$$

$$= -\frac{4x}{\mathrm{w}_0^3\sqrt{2\pi}} e^{\frac{-x^2}{\mathrm{w}_0^2}} e^{\frac{-(y\cos\theta - z\sin\theta)^2}{\mathrm{w}_0^2\cos^2\theta}}. \tag{5.19}$$

5.2 Coerência e incoerência

Coerência e incoerência são termos relacionados a ondas e partículas, respectivamente. Uma transmissão coerente através de uma barreira é o resultado final de um processo de interferência em seu interior, um fenômeno tipicamente ondulatório. Por outro lado, no chamado limite de partículas as diferentes contribuições dos termos reflexivos não afetam umas às outras (incoerência), gerando várias transmissões de ordens crescentes com o número de reflexões internas. Estes regimes não são, entretanto, inerentes ao estado incidente mas sim construídos na relação entre o tamanho do pacote de ondas e as dimensões do experimento, no nosso caso a largura da barreira. No capítulo 3 encontramos a probabilidade de transmissão sem *spin flip* como uma função oscilante com a largura da barreira, apresentando ressonâncias para $q_z L = n\pi$, com n inteiro e positivo. Tendo sido este resultado derivado dentro do formalismo de ondas planas, ele considera válido $\mathrm{w}_0 >> L$ para todos os valores de L, permitindo à $|T_1|^2$ oscilar indefinidamente. Se, entretanto, em uma abordagem com maior sentido físico, modelarmos o problema através de pacotes de ondas, a soma coerente dos termos da série de probabilidade de transmissão, dada por

$$|T_1|^2 = \left| A_{T,1} \sum_{i=0}^{\infty} A_{R,1}^i \right|^2, \tag{5.20}$$

será apenas válida para valores de L menores ou comparáveis a w_0. Aumentando-se o tamanho da barreira, de modo que $\mathrm{w}_0 <<$ L, os diferentes termos da série se desacoplam e a probabilidade de transmissão passa a ser regida por uma soma incoerente:

$$|T_1|^2 = \sum_{i=0}^{\infty} \left|A_{T,1}A_{R,1}^i\right|^2 . \tag{5.21}$$

A ressonância é então observada apenas até um valor máximo de n. Valores superiores correspondem ao regime incoerente, no qual o fenômeno não mais se verifica. Temos então que para w_0 suficientemente pequeno em relação à barreira a probabilidade de transmissão é obtida como uma média sobre os termos dominantes da série e passa a ser independente de L. Esta discussão é válida na zona de transmissão (figura A.2). Para dados valores de energia e ângulo de incidência nesta zona, o comportamento esperado da probabilidade de transmissão como uma função de L é oscilatório de $L < \mathrm{w}_0$ até $L{\approx}\mathrm{w}_0$ tornando-se uma reta para $L >> \mathrm{w}_0$. O valor onde a probabilidade estaciona pode ser obtido dos termos dominantes de (5.21). Assim, por exemplo, para $\mathrm{w}_0 = 10m^{-1}$, $V_0 = 2m$, $E = 3.5m$ e $\sin\theta = 0.2$:

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y g^2(p_x,p_y)|T_1|^2 &\approx \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y g^2(p_x,p_y) \left[|A_{T,1}|^2 \left(1 + |A_{R,1}|^2 + |A_{R,1}^2|^2\right)\right] \\ &= 0.76. \end{aligned} \tag{5.22}$$

Para um potencial de $V_0 = 2m$, uma abertura de pacote de $\mathrm{w}_0 = 10m^{-1}$ e diversos valores de E e $\sin\theta$, a probabilidade de transmissão está graficada na figura A.9.

5.3 *Spin* médio do estado incidente

No formalismo de pacotes de onda o valor esperado do *spin* é dado por

$$\langle S_z \rangle = \frac{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dxdy \psi^\dagger S_z \psi}{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dxdy |\psi|^2}. \tag{5.23}$$

Utilizando a forma integral da função de onda incidente,

$$\psi_{inc}(\mathbf{r},t) = \frac{\mathrm{w}_0}{2\pi\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y u_1 e^{-iEt} e^{-p_x^2 \frac{\mathrm{w}_0{}^2}{4}} e^{ip_x x} e^{-(p_y - |\mathbf{p}|\sin\theta)^2 \frac{\mathrm{w}_0{}^2}{4}} e^{ip_y y} e^{ip_z z}, \tag{5.24}$$

o valor esperado do *spin* fica

$$\langle S_z \rangle_{in} = \frac{\mathrm{w}_0^2}{16\pi^3} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dxdy \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y dp'_x dp'_y e^{-p_x^2 \frac{\mathrm{w}_0^2}{4}} e^{-p_x'^2 \frac{\mathrm{w}_0^2}{4}} e^{i(p_x - p'_x)x}$$

$$\times e^{-(p_y - |\mathbf{p}| \sin\theta)^2 \frac{\mathrm{w}_0^2}{4}} e^{-(p'_y - |\mathbf{p}'| \sin\theta)^2 \frac{\mathrm{w}_0^2}{4}} e^{i(p_y - p'_y)y} e^{i(p_z - p'_z)z} e^{-i(E-E')t} \tag{5.25}$$

$$\times u_1^\dagger \Sigma_3 u_1.$$

As integrais espaciais são dadas por (5.6) e o produto $u_1^\dagger S_z u_1$ por (4.3). Temos então

$$\langle S_z \rangle_{in} = \frac{{\mathrm{w}_0}^2}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y e^{-p_x^2 \frac{\mathrm{w}_0^2}{2}} e^{-(p_y - |\mathbf{p}| \sin\theta)^2 \frac{\mathrm{w}_0^2}{2}} \left[1 - \frac{p_x^2 + p_y^2}{E(E+m)} \right]$$

$$= \frac{\mathrm{w}_0^2}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dp_x e^{-p_x^2 \frac{\mathrm{w}_0^2}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} dp_y e^{-(p_y - |\mathbf{p}| \sin\theta)^2 \frac{\mathrm{w}_0^2}{2}}$$

$$- \frac{\mathrm{w}_0^2}{4\pi E(E+m)} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dp_x p_x^2 e^{-p_x^2 \frac{\mathrm{w}_0^2}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} dp_y e^{-(p_y - |\mathbf{p}| \sin\theta)^2 \frac{\mathrm{w}_0^2}{2}} + \int_{-\infty}^{\infty} dp_x e^{-p_x^2 \frac{\mathrm{w}_0^2}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} dp_y p_y^2 e^{-(p_y - |\mathbf{p}| \sin\theta)^2 \frac{\mathrm{w}_0^2}{2}} \right\}$$

$$= \frac{1}{2} - \frac{1}{2\mathrm{w}_0^2 E(E+m)} - \frac{\mathrm{w}_0}{2\sqrt{2\pi} E(E+m)} \int_{-\infty}^{\infty} dp_y p_y^2 e^{-(p_y - |\mathbf{p}| \sin\theta)^2 \frac{\mathrm{w}_0^2}{2}}.$$

Utilizando a mudança de variáveis (5.11) na integral restante obtemos

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp_y p_y^2 e^{-(p_y - |\mathbf{p}| \sin\theta)^2 \frac{{\mathrm{w}_0}^2}{2}} = \mathbf{p}^2 \sin^2\theta \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{p}_y e^{-\tilde{p}_y^2 \frac{\mathrm{w}_0^2}{2}} + \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{p}_y \tilde{p}_y^2 e^{-\tilde{p}_y^2 \frac{\mathrm{w}_0^2}{2}} + 2p \sin\theta \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{p}_y \tilde{p}_y e^{-\tilde{p}_y^2 \frac{\mathrm{w}_0^2}{2}}$$

$$= \sqrt{\frac{2\pi}{\mathrm{w}_0^2}} \mathbf{p}^2 \sin^2\theta + \frac{\sqrt{2\pi}}{\mathrm{w}_0^3}$$

$$= \frac{\sqrt{2\pi}}{\mathrm{w}_0^3} \left[\mathrm{w}_0 \mathbf{p}^2 \sin^2\theta + 1 \right]. \tag{5.26}$$

E assim

$$\langle S_z \rangle_{in} = \frac{1}{2} - \frac{2 + \mathbf{p}^2 \mathrm{w}_0^2 \sin^2\theta}{2\mathrm{w}_0^2 E(E+m)}. \tag{5.27}$$

$$\boxed{\langle S_z \rangle_{in} = \frac{1}{2} - \frac{(E-m)\sin^2\theta}{2E} - \frac{1}{\mathrm{w}_0^2 E(E+m)}.} \tag{5.28}$$

No limite de onda plana ($\mathrm{w}_0 \to \infty$) obtemos

$$\langle S_z \rangle_{in} = \frac{1}{2} - \frac{(E-m)\sin^2\theta}{2E}, \tag{5.29}$$

como esperado. Entretanto, fazendo $\mathrm{w}_0 \to 0$ encontramos um limite aparentemente mais problemático. Conforme w_0 diminui, o terceiro termo de (5.28) aumenta, até que, eventualmente, $\langle S_z \rangle_{inc} < -\frac{1}{2}$. Isto é contornado pela argumentação de que o limite inferior da abertura de um pacote de ondas na Mecânica Quântica Relativística é o comprimento de onda Compton da partícula[1], [12]. Deste modo podemos escrever w_0 como

$$\mathrm{w}_0 = \frac{a}{m}, \tag{5.30}$$

sendo $a \geq 1$. Com esta restrição para o caso limite, o terceiro termo de (5.28) tende a zero no limite ultra-relativístico e a $(2a)^{-1}$ no limite não-relativístico, preservando a teoria. Curvas de nível para o *spin* incidente encontram-se na figura A.10.

Note ainda que a abertura do pacote pode ser determinada através de uma série de medidas do *spin* pela relação

$$\mathrm{w}_0 = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\left[E\cos^2\theta + m\sin^2\theta - 2E\langle S_z \rangle\right](E+m)}}. \tag{5.31}$$

5.4 *Spin* médio do estado refletido

O mesmo procedimento utilizado na seção 5.1 para construir o pacote de ondas incidente é aplicado para o estado refletido com a diferença que agora o bispinor a ser integrado é uma combinação de $u_1(\tilde{\mathbf{p}})$ e $u_2(\tilde{\mathbf{p}})$ sendo os coeficientes da soma os coeficientes de reflexão:

$$\psi_{ref}(\mathbf{r},t) = \frac{\mathrm{w}_0}{(2\pi)^{3/2}} \int d\mathbf{p} G(\tilde{\mathbf{p}})[R_1 u_1(\tilde{\mathbf{p}}) + R_2 u_2(\tilde{\mathbf{p}})] e^{i(\tilde{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{r} - Et)}. \tag{5.32}$$

Utilizando a escolha estacionária da distribuição $G(\tilde{\mathbf{p}})$ temos

$$\psi_{ref}(\mathbf{r},t) = \frac{\mathrm{w}_0 e^{-iEt}}{(2\pi)^{3/2}} \int dp_x dp_y g(p_x,p_y)[R_1 \tilde{u}_1(\tilde{\mathbf{p}}) + R_2 \tilde{u}_2(\tilde{\mathbf{p}})] e^{i(p_x x + p_y y - \sqrt{\mathbf{p}^2 - p_x^2 - p_y^2} z)}, \tag{5.33}$$

[1] $\lambda_c = m^{-1}$ em unidades naturais.

com $g(p_x,p_y)$ sendo a distribuição gaussiana (5.8). Devido à ortonormalidade dos bispinores, a normalização do estado refletido é escrita então como

$$\int dxdy|\psi_{ref}(\mathbf{r},t)|^2 = \frac{\mathrm{w}_0^2}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y g^2(p_x,p_y)[|R_1|^2 + |R_2|^2] \tag{5.34}$$

e o *spin* médio como

$$\langle S_z\rangle_{ref} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dxdy\psi_{ref}^{\dagger}(\mathbf{r},t)S_z\psi_{ref}(\mathbf{r},t)}{\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dxdy|\psi_{ref}(\mathbf{r},t)|^2} \tag{5.35}$$

$$= \frac{\mathrm{w}_0^2}{2\pi}\frac{\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y g^2(p_x,p_y)\left[|R_1|^2\tilde{u}_1^{\dagger}S_z\tilde{u}_1 + |R_2|^2\tilde{u}_2^{\dagger}S_z\tilde{u}_2 + (R_1^*R_2\tilde{u}_1^{\dagger}S_z\tilde{u}_2 + \mathrm{h.c.})\right]}{\frac{\mathrm{w}_0^2}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y g^2(p_x,p_y)[|R_1|^2 + |R_2|^2]}. \tag{5.36}$$

Sendo

$$\tilde{u}_1^{\dagger}S_z\tilde{u}_1 = \frac{1}{2}\left[1 - \frac{p_x^2 + p_y^2}{E(E+m)}\right], \tag{5.37a}$$

$$\tilde{u}_2^{\dagger}S_z\tilde{u}_2 = -\tilde{u}_1^{\dagger}S_z\tilde{u}_1, \tag{5.37b}$$

$$\tilde{u}_1^{\dagger}S_z\tilde{u}_2 = -\frac{1}{2}\frac{p_z(p_x - ip_y)}{E(E+m)}. \tag{5.37c}$$

Assim

$$\langle S_z\rangle_{ref} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y g^2(p_x,p_y)\left[\left(|R_1|^2 - |R_2|^2\right)\tilde{u}_1^{\dagger}S_z\tilde{u}_1 + \left(R_1^*R_2\tilde{u}_1^{\dagger}S_z\tilde{u}_2 + \mathrm{h.c.}\right)\right]}{\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y g^2(p_x,p_y)[|R_1|^2 + |R_2|^2]}. \tag{5.38}$$

Utilizando as equações (5.37) temos

$$\langle S_z\rangle_{ref} = \frac{1}{2}\frac{\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y g^2(p_x,p_y)\left[\left(|R_1|^2 + |R_2|^2\right)\left[1 - \frac{p_x^2 + p_y^2}{E(E+m)}\right]\right]}{\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y g^2(p_x,p_y)[|R_1|^2 + |R_2|^2]}$$

$$-\frac{1}{2}\frac{\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y g^2(p_x,p_y)|R_2|^2\left\{2-2\frac{p_x^2+p_y^2}{E(E+m)}+\left[\frac{R_1^*}{R_2^*}\frac{p_z(p_x-ip_y)}{E(E+m)}+\text{h.c}\right]\right\}}{\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y g^2(p_x,p_y)[|R_1|^2+|R_2|^2]}, \quad (5.39)$$

que pode ser reescrita como

$$\boxed{\langle S_z\rangle_{ref}=\frac{1}{2}\frac{\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y g^2(p_x,p_y)\left\{\left(|R_1|^2+|R_2|^2\right)\left[1-\frac{p_x^2+p_y^2}{E(E+m)}\right]-2|R_2|^2\frac{E+m}{E}\right\}}{\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y g^2(p_x,p_y)[|R_1|^2+|R_2|^2]}. \quad (5.40)}$$

No caso de reflexão total $|R_1|^2+|R_2|^2=1$ e assim

$$\langle S_z\rangle_{ref}=\langle S_z\rangle_{in}-\frac{E+m}{E}\int dp_x dp_y g^2(p_x,p_y)|R_2|^2, \quad (5.41)$$

onde $g(p_x,p_y)$ é uma distribuição gaussiana.

5.5 *Spin* médio do estado transmitido

Utilizando-se pacotes de onda na descrição do problema a onda transmitida não é igual necessariamente à incidente devido à necessidade de integração do coeficiente de transmissão. Nesse caso temos

$$\langle S_z\rangle_{tra}=\frac{\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y g^2(p_x,p_y)|T_1|^2 u_1^\dagger S_z u_1}{\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y g^2(p_x,p_y)|T_1|^2}. \quad (5.42)$$

Capítulo 6

Evolução temporal de operadores

6.1 O pacote de ondas mais geral

No capítulo 5 construímos pacotes de ondas utilizando apenas as soluções de energia positiva da equação de Dirac. Uma vez que estávamos interessados precisamente na forma de pacote de ondas destas soluções, elas nos foram, obviamente, suficientes. Se quisermos, entretanto, autoestados de S_z como estados incidentes, os pacotes de ondas precisam ser construídos a partir de todas as quatro soluções da equação de Dirac pois todas apresentam magnitudes comparáveis, [12]. Na seção 5.1 apresentamos a forma geral de um pacote de ondas como

$$\psi(\mathbf{r},t) = N \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \sum_{j=1}^{2} \left[b(\mathbf{p},j) u_j(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - iEt} + d^*(\mathbf{p},j) v_j(\mathbf{p}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} + iEt} \right], \tag{6.1}$$

onde $v_1(\mathbf{p})$ e $v_2(\mathbf{p})$ são bispinores positrônicos, soluções de antipartículas de energia positiva da equação de Dirac, relacionados aos bispinores eletrônicos de energia negativa $u_3(\mathbf{p})$ e $u_4(\mathbf{p})$ através de [13]

$$v_{2,1}(\mathbf{p}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} + iEt} = u_{3,4}(-\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} + iEt}. \tag{6.2}$$

Como as soluções (1.30) foram escritas inteiramente através de bispinores eletrônicos vamos utilizá-los para reescrever o pacote de ondas como

$$\psi(\mathbf{r},t) = N \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \sum_{j=1}^{2} \left[b(\mathbf{p},j) u_j(\mathbf{p}) e^{-iEt} + b(\mathbf{p},j+2) u_{j+2}(\mathbf{p}) e^{+iEt} \right] e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}, \tag{6.3}$$

onde

$$b(\mathbf{p},n) = u_n^\dagger u_0 G(\mathbf{p}), \tag{6.4}$$

$G(\mathbf{p})$ sendo uma distribuição de momentos e n variando de 1 até 4. Deste modo (6.3) fica

$$\psi(\mathbf{r},t) = N \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p}G(\mathbf{p}) \left[\left(u_1 u_1^\dagger + u_2 u_2^\dagger \right) e^{-iEt} + \left(u_3 u_3^\dagger + u_4 u_4^\dagger \right) e^{iEt} \right] u_0 e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}, \tag{6.5}$$

onde u_0 é um bispinor satisfazendo

$$u_0^\dagger u_0 = 1. \tag{6.6}$$

Utilizando a fórmula de Euler para escrever as exponenciais temporalmente dependentes como senos e cossenos obtemos

$$\psi(\mathbf{r},t) = N \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p}G(\mathbf{p}) \left[\left(u_1 u_1^\dagger + u_2 u_2^\dagger + u_3 u_3^\dagger + u_4 u_4^\dagger \right) \cos(Et) \right.$$

$$\left. - \left(u_1 u_1^\dagger + u_2 u_2^\dagger - u_3 u_3^\dagger - u_4 u_4^\dagger \right) i \sin(Et) \right] u_0 e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}, \tag{6.7}$$

sendo que os termos produto entre bispinores retornam

$$u_1 u_1^\dagger + u_2 u_2^\dagger = \frac{1}{2E} \begin{bmatrix} E+m & \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p} \\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p} & E-m \end{bmatrix} \tag{6.8a}$$

e

$$u_3 u_3^\dagger + u_4 u_4^\dagger = \frac{1}{2E} \begin{bmatrix} E-m & -\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p} \\ -\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p} & E+m \end{bmatrix} \tag{6.8b}$$

e então

$$u_1 u_1^\dagger + u_2 u_2^\dagger + u_3 u_3^\dagger + u_4 u_4^\dagger = 1, \tag{6.9a}$$

$$u_1 u_1^\dagger + u_2 u_2^\dagger - u_3 u_3^\dagger - u_4 u_4^\dagger = \frac{1}{E} \begin{bmatrix} m & \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p} \\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p} & -m \end{bmatrix} = \frac{H_0}{E}. \tag{6.9b}$$

Onde H_0 é a Hamiltoniana livre de Dirac. O pacote de ondas é então escrito como

$$\psi(\mathbf{r},t) = N \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p}G(\mathbf{p}) \left[\cos(Et) - i\frac{H_0}{E} \sin(Et) \right] u_0 e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}. \tag{6.10}$$

Note que se u_0 for uma combinação de $u_1(\mathbf{p})$ e $u_2(\mathbf{p})$ ou de $u_3(\mathbf{p})$ e $u_4(\mathbf{p})$, utilizando a equação (1.20), os termos dependentes do tempo podem ser reagrupados em uma exponencial $e^{\mp iEt}$, de modo que, no cálculo de valores esperados de operadores matriciais como o *spin*, a dependência temporal é anulada. Se, entretanto, u_0 não for autoestado de H, o tempo não pode ser fatorizado deste modo e o valor esperado do operador em questão apresentará dependência temporal. Para verificar a forma desta dependência vamos assumir que $u_0 \neq u_0(\mathbf{p})$. Com esta condição o papel de u_0 fica claro, sendo ele o bispinor associado a $\psi(\mathbf{r},0)$.

6.1.1 Normalização

Escolhendo como antes uma distribuição de momentos estacionária,

$$G(\mathbf{p}) = \delta\left(p_z - \sqrt{\mathbf{p}^2 - p_x^2 - p_y^2}\right) g(p_x,p_y), \tag{6.11}$$

temos como condição de normalização

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dxdy|\psi(\mathbf{r},t)|^2 = 1. \tag{6.12}$$

Seguindo os passos da subseção 5.1.2 esta condição, em nosso presente caso, pode ser escrita como

$$|N|^2 \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y |g(p_x,p_y)|^2 \left[\cos^2(Et) + \frac{H_0^2}{E^2}\sin^2(Et)\right] u_0^\dagger u_0 = \frac{1}{4\pi^2}. \tag{6.13}$$

Como, porém,

$$H_0^2 = \begin{bmatrix} m & \sigma\cdot\mathbf{p} \\ \sigma\cdot\mathbf{p} & m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m & \sigma\cdot\mathbf{p} \\ \sigma\cdot\mathbf{p} & m \end{bmatrix} = E^2, \tag{6.14}$$

temos

$$|N|^2 \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y |g(p_x,p_y)|^2 = \frac{1}{4\pi^2}, \tag{6.15}$$

como anteriormente. Utilizando novamente a distribuição gaussiana (5.8) para p_x e p_y temos uma vez mais

$$N = \frac{\mathrm{w}_0}{2\pi\sqrt{2\pi}}. \tag{6.16}$$

6.1.2 O pacote normalizado

A forma integral do pacote de onda normalizado é

$$\psi(\mathbf{r},t) = \frac{\mathrm{w}_0}{2\pi\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y \left[\cos(Et) - i\frac{H_0}{E}\sin(Et)\right] u_0 e^{-p_x^2\frac{\mathrm{w}_0^2}{4}} e^{ip_x x} e^{-(p_y - |\mathbf{p}|\sin\theta)^2\frac{\mathrm{w}_0^2}{4}} e^{ip_y y} e^{ip_z z}. \tag{6.17}$$

Agora, $H_0 = \boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{p} + \beta m$. Utilizando a mudança de variáveis $\tilde{p} = p_y - |\mathbf{p}|\sin\theta$ em (6.17) H_0 fica

$$H_0 = \alpha_x p_x + \alpha_y \tilde{p}_y + \alpha_y |\mathbf{p}|\sin\theta + \alpha_z p_z + \beta m. \tag{6.18}$$

Expandindo então p_z em primeira ordem,

$$p_z \;\approx\; |\mathbf{p}|\cos\theta - \tilde{p}_y \tan\theta, \tag{6.19}$$

temos

$$H_0 = \alpha_x p_x + \alpha_y \tilde{p}_y + \alpha_y |\mathbf{p}|\sin\theta + \alpha_z |\mathbf{p}|\cos\theta - \alpha_z \tilde{p}_y \tan\theta + \beta m. \tag{6.20}$$

Os termos proporcionais a p_x e a $\tilde{p}_y$ dão origem a integrais ímpares sob limites de integração simétricos e logo podem ser descartados. Temos assim o pacote

$$\psi(\mathbf{r},t) = \frac{\mathrm{w}_0}{2\pi\sqrt{2\pi}} e^{i|\mathbf{p}|(y\sin\theta + z\cos\theta)} \left[cos(Et) - \frac{i\sin(Et)}{E}(\alpha_y|\mathbf{p}|\sin\theta + \alpha_z|\mathbf{p}|\cos\theta + \beta m)\right] u_0$$

$$\times \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dp_x d\tilde{p}_y e^{-p_x^2\frac{\mathrm{w}_0^2}{4}} e^{ip_x x} e^{-\tilde{p}_y^2\frac{\mathrm{w}_0^2}{4}} e^{i\tilde{p}_y\frac{(y\cos\theta - z\sin\theta)}{\cos\theta}}, \tag{6.21}$$

de onde obtemos finalmente

$$\psi(\mathbf{r},t) = \frac{2}{\sqrt{2\pi}\mathrm{w}_0} e^{-\frac{x^2}{\mathrm{w}_0^2} - \frac{(y - z\tan\theta)^2}{\mathrm{w}_0^2}} e^{i|\mathbf{p}|(y\sin\theta + z\cos\theta)}$$

$$\times \left[cos(Et) - \frac{i\sin(Et)}{E}(\alpha_y|\mathbf{p}|\sin\theta + \alpha_z|\mathbf{p}|\cos\theta + \beta m)\right] u_0. \tag{6.22}$$

6.2 *Spin* médio

Uma vez que u_0 não é função do momento é mais fácil calcular o *spin* a partir da forma final (6.22) do pacote de ondas do que de sua forma integral, como feito no capítulo 5. Temos assim

$$\langle S_z\rangle = \frac{1}{\pi\mathrm{w}_0^2}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dxdy e^{-\frac{2x^2}{\mathrm{w}_0^2}} e^{-\frac{2(y - z\tan\theta)^2}{\mathrm{w}_0^2}}$$

$$\times u_0^\dagger \left[\cos(Et) + \frac{i\sin(Et)}{E}(\alpha_y|\mathbf{p}|\sin\theta + \alpha_z|\mathbf{p}|\cos\theta + \beta m)\right] \Sigma_z$$

$$\times \left[\cos(Et) - \frac{i\sin(Et)}{E}(\alpha_y|\mathbf{p}|\sin\theta + \alpha_z|\mathbf{p}|\cos\theta + \beta m)\right] u_0. \tag{6.23}$$

Como a integral gaussiana está normalizada, o valor esperado do *spin* é dado por

$$\langle S_z \rangle = \frac{1}{2} u_0^\dagger \left[\cos(Et) + \frac{i\sin(Et)}{E} (\alpha_y |\mathbf{p}| \sin\theta + \alpha_z |\mathbf{p}| \cos\theta + \beta m) \right] \Sigma_z$$

$$\times \left[\cos(Et) - \frac{i\sin(Et)}{E} (\alpha_y |\mathbf{p}| \sin\theta + \alpha_z |\mathbf{p}| \cos\theta + \beta m) \right] u_0. \tag{6.24}$$

Agora, sabendo que

$$[\Sigma_z, \alpha_z] = [\Sigma_z, \beta] = 0 \tag{6.25a}$$

e que

$$\{\Sigma_z, \alpha_y\} = 0, \tag{6.25b}$$

onde $\{,\}$ denota o anticomutador, temos que

$$\langle S_z \rangle = \frac{1}{2} u_0^\dagger \left[cos(Et) + \frac{i\sin(Et)}{E} (\alpha_y |\mathbf{p}| \sin\theta + \alpha_z |\mathbf{p}| \cos\theta + \beta m) \right]$$

$$\times \left[cos(Et) - \frac{i\sin(Et)}{E} (-\alpha_y |\mathbf{p}| \sin\theta + \alpha_z |\mathbf{p}| \cos\theta + \beta m) \right] \Sigma_z u_0$$

$$\langle S_z \rangle = \frac{1}{2} u_0^\dagger \left[cos^2(Et) + \frac{\sin^2(Et)}{E^2} (\mathbf{p}^2 (\cos^2\theta - \sin^2\theta) + m^2 + 2\mathbf{p}^2 \sin\theta \cos\theta \alpha_y \alpha_z + 2|\mathbf{p}| m \sin\theta \alpha_y \beta) \right.$$

$$\left. + \frac{2i|\mathbf{p}| \sin\theta \cos(Et) \sin(Et)}{E} \alpha_y \right] \Sigma_z u_0, \tag{6.26}$$

o que é mais facilmente analisável separando as dependências de diferentes produtos matriciais. Temos assim

$$\langle S_z \rangle = \frac{1}{2} \left[cos^2(Et) + \frac{\sin^2(Et)}{E^2} (E^2 - 2\mathbf{p}^2 \sin^2\theta) \right] u_0^\dagger \Sigma_z u_0$$

$$+ \frac{\mathbf{p}^2 \sin\theta \cos\theta \sin^2(Et)}{E^2} u_0^\dagger \alpha_y \alpha_z \Sigma_z u_0 \tag{6.27}$$

$$+ \frac{|\mathbf{p}| m \sin\theta \sin^2(Et)}{E^2} u_0^\dagger \alpha_y \beta \Sigma_z u_0 + \frac{i|\mathbf{p}| \sin\theta \cos(Et) \sin(Et)}{E} u_0^\dagger \alpha_y \Sigma_z u_0.$$

Seja então u_0 um autoestado de Σ_z:

$$u_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}. \tag{6.28}$$

Temos que

$$u_0^\dagger \Sigma_z u_0 = 1 \tag{6.29a}$$

e

$$u_0^\dagger \alpha_y \alpha_z \Sigma_z u_0 = u_0^\dagger \alpha_y \Sigma_z u_0 = u_0^\dagger \alpha_y \beta \Sigma_z u_0 = 0. \tag{6.29b}$$

O valor esperado do *spin* é finalmente expresso como

$$\langle S_z \rangle = \frac{1}{2} - \frac{(E^2 - m^2)}{E^2} \sin^2\theta \sin^2(Et). \tag{6.30}$$

Capítulo 7

Conclusões

Fenômenos interessantes surgem quando um sistema passa a ser estudado no caso relativístico: No limite de baixas velocidades não há diferença entre potenciais escalares e eletrostáticos mas em um regime relativístico estes potenciais não são mais equivalentes. Na equação de Dirac, o potencial escalar, estando associado à massa, é multiplicado pela matriz β enquanto o potencial eletrostático se comporta como a energia. As zonas cinemáticas tornam-se mais complexas com o surgimento da zona Klein. Na interação com uma barreira de potencial eletrostático, devido à natureza matricial das soluções da equação de Dirac, temos a possibilidade do fenômeno de *spin flip*, de modo que quatro coeficientes se fazem necessários para descrever o sistema: reflexão e transmissão com e sem inversão de *spin*. O valor esperado do *spin* também é modificado, dependendo agora, da energia da partícula e do ângulo de incidência na barreira de potencial, o ângulo de movimento da partícula em relação ao eixo da medida.

Diferenças significativas surgem também como fruto da análise planar do sistema de interesse, mostrando que análises unidimensionais, quando *spin* e relatividade são considerados, podem não ser suficientes. No caso ultra-relativístico unidimensional (equivalente a uma colisão frontal), por exemplo, a zona de tunelamento deixa de existir. Para ângulos de incidência $\theta \neq 0$, entretanto, tunelamento volta a ser possível. Isso se deve ao fato de que a energia não determina sozinha as zonas cinemáticas em um sistema bidimensional, sendo possível transitar pelas diferentes zonas variando-se o ângulo de incidência.

Os potenciais eletrostáticos foram trabalhados de duas formas: Obtivemos os coeficientes tridimensionais da barreira de potencial e dos degraus de potencial. Para $\theta = 0$ todos os coeficientes de *spin flip* são nulos, tanto da barreira quanto dos degraus. Para $\theta \neq 0$ a barreira passa a apresentar um coeficiente de reflexão com *spin flip* não-nulo, fenômeno este não verificado para a transmissão com *spin flip*. Uma vez que os degraus são constituintes da barreira espera-se alguma relação entre os resultados de uns e de outra, o que torna este um resultado surpreendente pois contrasta com o fato de que para ângulos diferentes de zero nenhum coeficiente de degrau é identicamente nulo. O cálculo de degraus obtém os resultados da barreira a partir dos resultados dos degraus e torna possível exprimi-los em forma de séries, o que nos permite calcular as probabilidades associadas aos coeficientes no limite incoerente de partículas. Este método nos mostra que a transmissão com *spin flip* é nula independentemente da coerência da soma, não sendo este, portanto, um fenômeno de ressonância. Ressonância é verificada, entretanto, para $q_z L = n\pi$, com n inteiro positivo. Neste caso, para E e θ na zona de difusão $|R_1|^2 + |R_2|^2 = 0$ e a transmissão é total. Para valores de E e θ na zona de tunelamento a probabilidade de transmissão torna-se rapidamente evanescente com o aumento da largura da barreira, como esperado.

O *spin* médio de um estado incidente $u_1(\mathbf{p})$ foi também calculado, assim como o efeito da barreira sobre o *spin* das partículas refletidas. Em ambos os casos há dependência do valor esperado com a energia da partícula e com o ângulo de incidência. Para colisões frontais tanto o *spin* incidente quanto o refletido resultam 1/2, o que é esperado, uma vez que para $\theta = 0$, $R_2 = 0$. No limite não-relativístico ambas as medidas retornam 1/2 novamente. Deste modo é interessante saber para quais escolhas particulares de θ e E a diferença entre o *spin* incidente e o refletido, $\Delta \langle S_z \rangle$, é maximizada. O valor de $\sin\theta$ que maximiza $\Delta \langle S_z \rangle$ foi obtido como uma função da energia, assim como o valor de $\sin\theta$ que minimiza o *spin* refletido. Como mostrado na figura A.6, o valor mínimo do *spin* refletido não corresponde à máxima separação entre os *spins*, mas tende a esse valor conforme a energia aumenta. A figura A.7 revela outro aspecto importante. Ela sobrepõe as curvas de nível de $\Delta \langle S_z \rangle$ às fronteiras das diferentes zonas cinemáticas, mostrando onde "procurar" resultados. Por exemplo, é tentador buscar um par (E,θ) que maximize $\Delta \langle S_z \rangle$, por exemplo, escolhendo parâmetros tais que $\Delta \langle S_z \rangle = 0.7$. A curva referente à 0.7 está, entretanto, na zona de difusão para todos os valores de V_0 considerados e muitíssimo poucas partículas seriam refletidas para se realizar a medida. O mesmo ocorre para as transmissões. Uma vez que o estado transmitido possui apenas o coeficiente que conserva o *spin*, temos que $\langle S_z \rangle_{tra} = \langle S_z \rangle_{in}$. Para $\langle S_z \rangle_{in}$ não existe, porém, qualquer restrição quanto às zonas cinemáticas ao passo que para valores de E e θ fora da zona de difusão, poucas partículas atravessarão a barreira para ter o *spin* medido.

Introduzimos, por fim, o formalismo de pacotes de ondas. Ondas planas são abstrações teóricas, em bom acordo com a realidade apenas para larguras de pacote de ondas muito superiores à largura da barreira. Deste modo a localização espacial proporcionada pelos pacotes de ondas se configura em uma abordagem mais realista. O efeito do formalismo pode ser verificado nas probabilidades de transmissão, como mostrado nas figuras A.9. Conforme a largura da barreira aumenta, os termos da série de probabilidade se desacoplam e ela entra no limite incoerente de partículas, diminuindo a oscilação até se tornar constante para $L >> \mathrm{w}_0$.

O *spin* no formalismo de pacotes de ondas foi também avaliado. Encontramos expressões para o *spin* incidente, refletido e transmitido, sendo que apenas o incidente retornou uma integral de solução analítica. Como nos mostra a figura A.10, o valor esperado de $\langle S_z \rangle_{in}$ para pacotes de ondas se aproxima muito de seu correspondente de onda plana para grades aberturas do pacote, como deve ser. Conforme o pacote diminui, entretanto, esses valores se distanciam.

O último capítulo foi dedicado a derivação de um pacote de ondas genérico, construído com todos os bispinores solução da equação de Dirac afim de se avaliar o comportamento do *spin* de um autoestado do operador $\langle S_z \rangle$. Obtivemos que, não sendo u_0 um autoestado de H_0, as dependências temporais da definição do pacote de ondas não se anulam no cálculo do valor esperado de $\langle S_z \rangle$, apresentando então o *spin* uma oscilação temporal.

Quanto à pesquisas futuras:

• Como vimos, em regimes relativísticos barreiras de potencial escalar e de potencial eletrostático não são equivalentes, de modo que a revisão deste trabalho com barreiras de massa figura como uma possibilidade de interesse.

• Este trabalho foi realizado dentro do escopo da Mecânica Quântica Relativística, sendo um próximo passo estender seus cálculos à Teoria Quântica de Campos.

• Há na literatura estudos sobre a evolução espaço-temporal de pacotes de ondas de Dirac livres, [23]. Utilizando o formalismo de pacotes de ondas aqui desenvolvido como uma pequena introdução para possíveis futuras pesquisas nestas área, pretendemos estudar a evolução de pacotes de onda sob a presença de potenciais.

• Finalmente, devido à sua natureza intrinsecamente bidimensional e à propriedade de elétrons de massa zero, [24, 25], o grafeno parece ser um cenário natural no qual prosseguir e aplicar o estudo da difusão e tunelamento planares de Dirac, bem como das medidas de *spin*.

Referências Bibliográficas

[1] Schrödinger, E. et al. – ***Collected Papers on Wave Mechanics***, Third edition, New York, Chelsea Publishing Company, 1982

[2] Forshaw, J.; Smith A. G. – ***Dymamics and Relativity***, First edition, West Sussex, John Wiley & Sons, 2009

[3] Einstein, A. – ***The Collected Papers of Albert Einstein, Vol. II***, New Jersey, Princeton University Press, 2009

[4] Shankar, R. – ***Principles of Quantum Mechanics***, Second edition, New York, Plenum Publishers, 1994

[5] Dirac, P.A.M. – ***The Principles of Quantum Mechanics***, Fourth Edition, Local, Oxford University Press, 1958

[6] Bjorken, J. D.; Drell, S. D. – ***Relativistic Quantum Mechanics***, edição, Local, McGraw-Hill Inc., 1964

[7] Greiner, W. – ***Relativistic Quantum Mechanics: Wave Equations***, Third Edition, Berlim, Springer-Verlag, 2000

[8] Merzbacher, E. – ***Quantum Mechanics***, Third Edition, New York, John Wiley & Sons, 1998

[9] Cohen-Tannoudji, C; Diu, B.; Laloë F. – ***Quantum Mechanics Vol. 1***, Edição, Local, Wiley-VCH, 2005

[10] Cohen-Tannoudji, C; Diu, B.; Laloë F. – ***Quantum Mechanics Vol. 2***, Edição, Local, Wiley-VCH, 2005

[11] Goldstein, H; Poole, C.; Safko, J. – ***Classical Mechanics***, Third edition, New York, Addison-Wesley, 2001

[12] Itzykson, C; Zuber, J-B. – ***Quantum Field Theory***, First edition Dover Reprint, New York, Dover Publications Inc., 2005

[13] Halzen, F.; Martin, A. D. – ***Quarks and Leptons: An Introductory Course in Modern Particle Physics***, First edition, New York, John Wiley & Sons, 1984

[14] Dirac, P.A.M. – ***The Quantum Theory of the Electron***, Proceedings of the Royal Society of London, Series A, Vol. 117, No. 778, 610-624 (1928)

[15] De Leo, S.; Rotelli, P. – ***Above barrier Dirac multiple scattering and resonances***, European Physical Journal C, Vol. 46, 551-558, (2006)

[16] De Leo, S.; Rotelli, P. – ***Planar Dirac diffusion***, European Physical Journal C, Vol. 63, 157-162, (2009)

[17] Matulius, A; Masir, M. R.; Peeters, F. M. – ***Scattering of a Dirac electron on a mass barrier***, Physical Review A, Vol. 86, 022101, (2012)

[18] Domínguez-Adame, F.; González, M. A. – ***Solvable Linear Potentials in Dirac Equation*** Europhysics Letters, Vol. 13 (3), 193-198, (1990)

[19] De Leo, S.; Rotelli, P. – ***Potential scattering in Dirac field theory***, European Physical Journal C, Vol. 62, 793-797, (2009)

[20] Klein, O.; – ***Die Reflexion von Elektronen an einem Potentialsprung nach der relativistischen Dynamik von Dirac***, Zeitschrift für Physik, Vol. 53, 157-165, (1929)

[21] Bernardini, A.; De Leo, S.; Rotelli, P. – ***Above Barrier Potential Diffusion***, Modern Physics Letters A, Vol. 19, 2717-2725, (2004)

[22] Anderson, A.; – ***Multiple scattering approach to one-dimensional potential problems***, American Journal of Physics, Vol. 57, 230-234, (1989)

[23] Demikhovskii, V. et al.; – ***Space-time evolution of Dirac wave packets***, arXiv:1007.1566v2 [quant-ph], (2010)

[24] Neto, A. C.; Guinea, F; Peres, N. M. – ***Drawing Conclusions from Graphene***, Physics World, physicsweb.org, Novembro de (2006)

[25] Wilson, M.; – ***Electrons in Atomically Thin Carbon Sheets Behave Like Massless Particles***, Physics Today, American Institute of Physics, Janeiro de (2006)

Apêndice A

Imagens

A.1 Zonas Cinemáticas

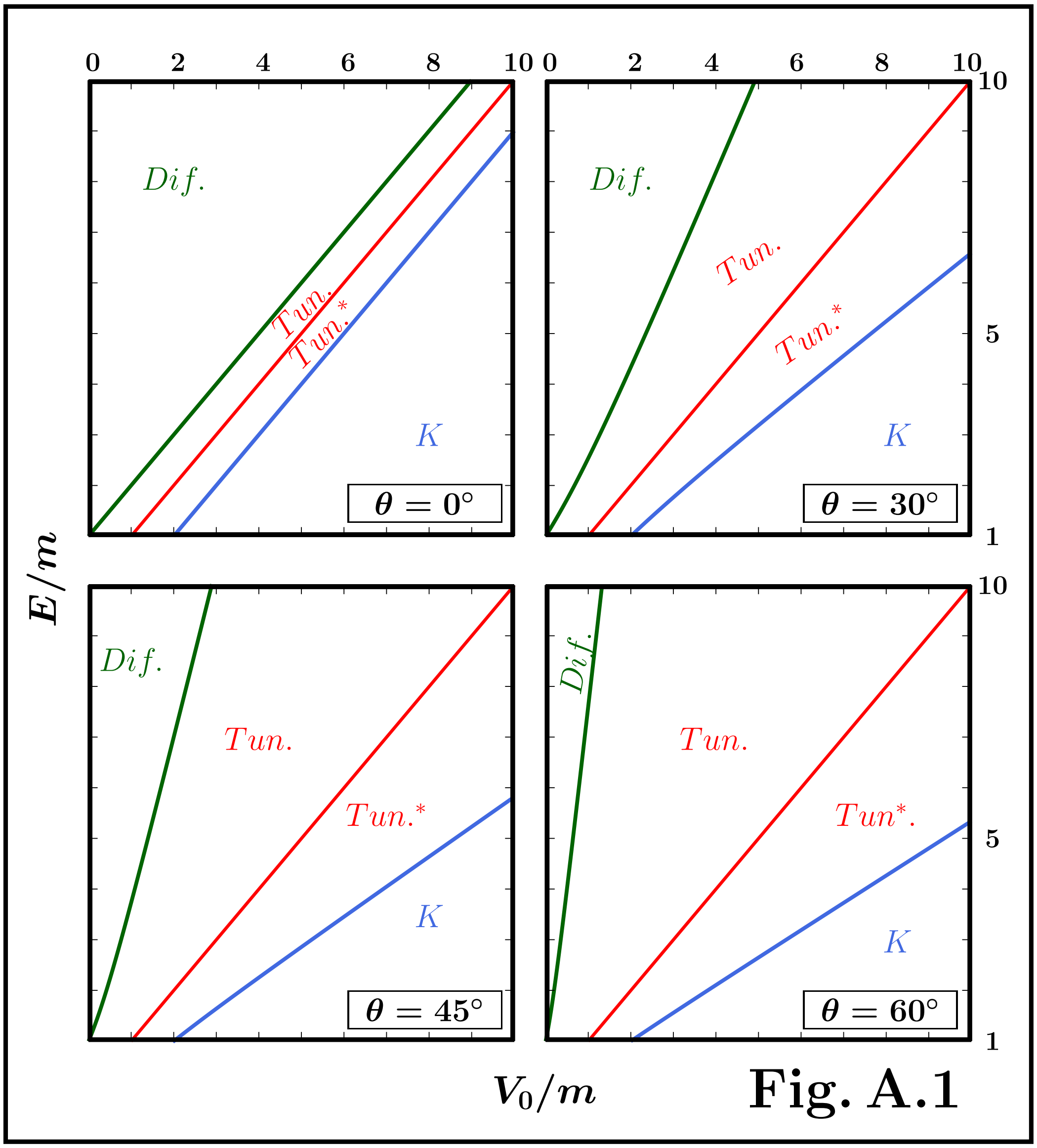

Figura A.1: Variação das zonas cinemáticas com a energia de incidência e o potencial aplicado. ângulos de incidência mantidos fixos. Note que 0° representa o caso unidimensional. $Dif.$, $Tun.$ e K denotam as zonas de difusão (transmissão), tunelamento e a zona Klein, respectivamente. $Tun.$ indica a zona de partículas, enquanto $Tun.^{*}$ a de antipartículas

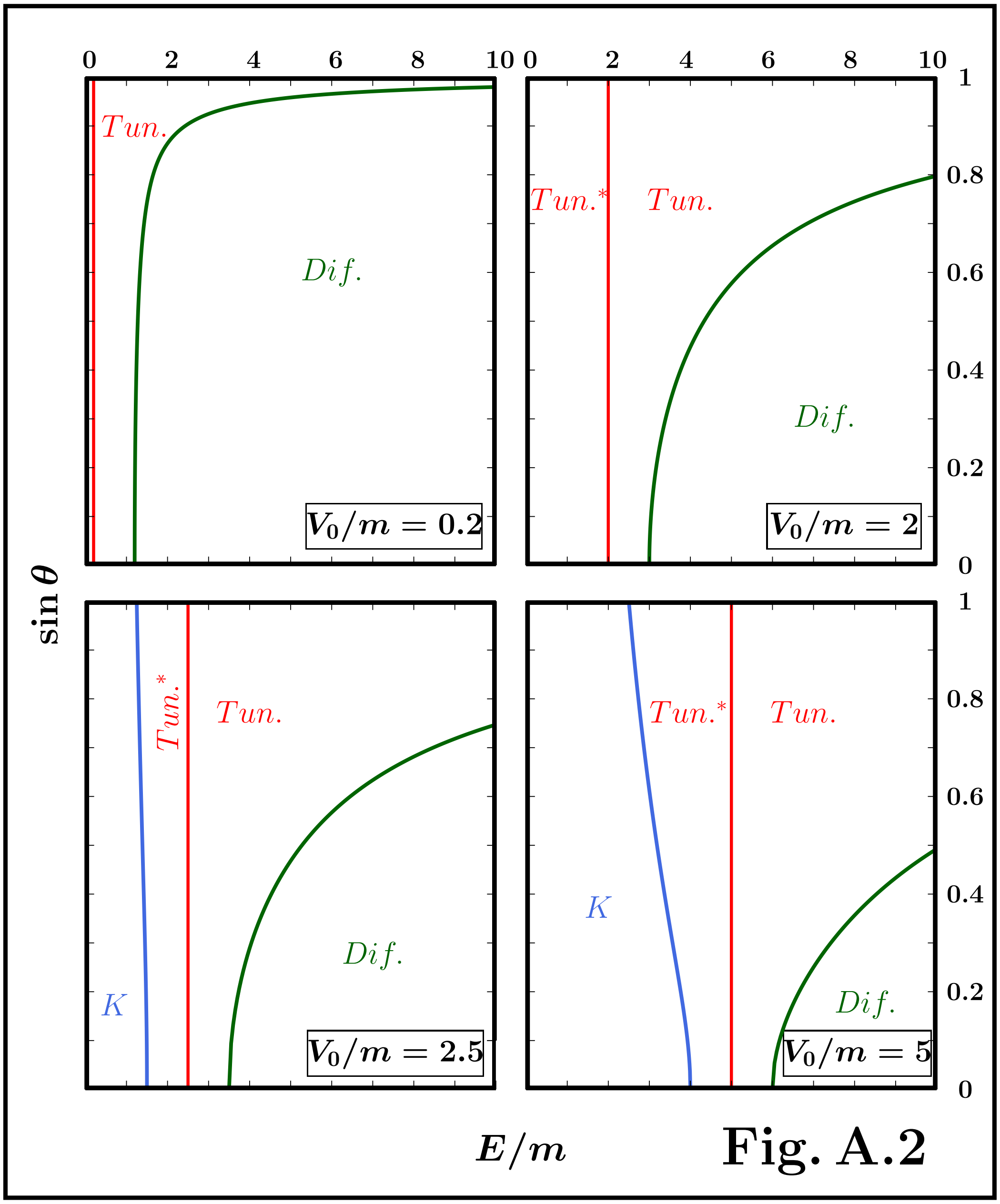

Figura A.2: Variação das zonas cinemáticas com ângulo e energia de incidência. Potenciais mantidos fixos. $Dif.$, $Tun.$ e K denotam as zonas de difusão (transmissão), tunelamento e a zona Klein, respectivamente. $Tun.$ indica a zona de partículas, enquanto $Tun.^*$ a de antipartículas

Para partículas sem massa (caso que também reproduz o limite ultra-relativístico) a razão de grandezas relevante é E/V_0 e neste caso as zonas cinemáticas são representadas pela figura A.3

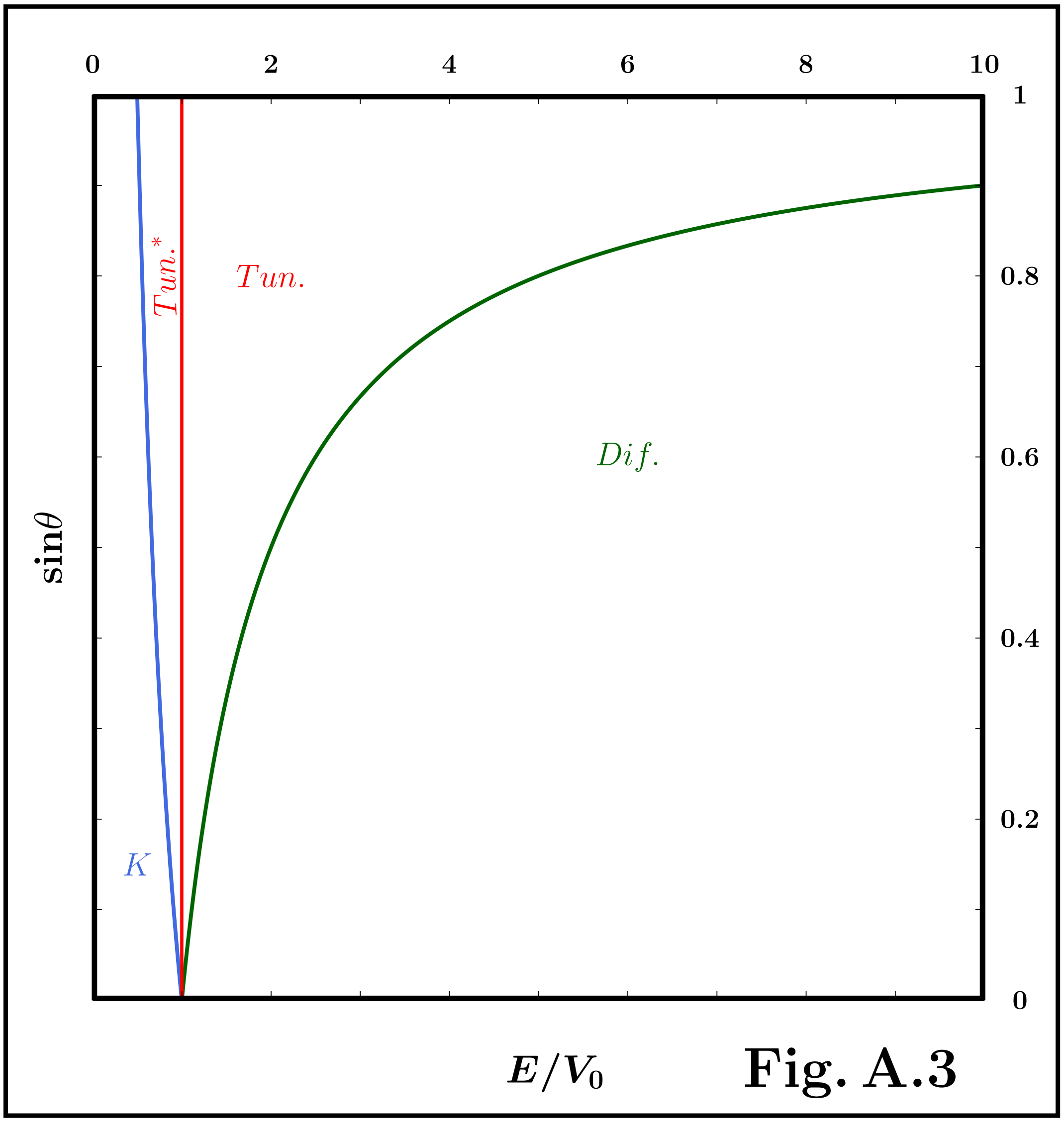

Figura A.3: Zonas cinemáticas no limite $m \to 0$. $Dif.$, $Tun.$ e K denotam as zonas de difusão (transmissão), tunelamento e a zona Klein, respectivamente. $Tun.$ indica a zona de partículas, enquanto $Tun.^*$ a de antipartículas. Note que conforme $\sin\theta \to 0$ a zona de tunelamento diminui, até o ponto em que $\sin\theta = 0$, no qual não existe

A.2 *Spin* incidente

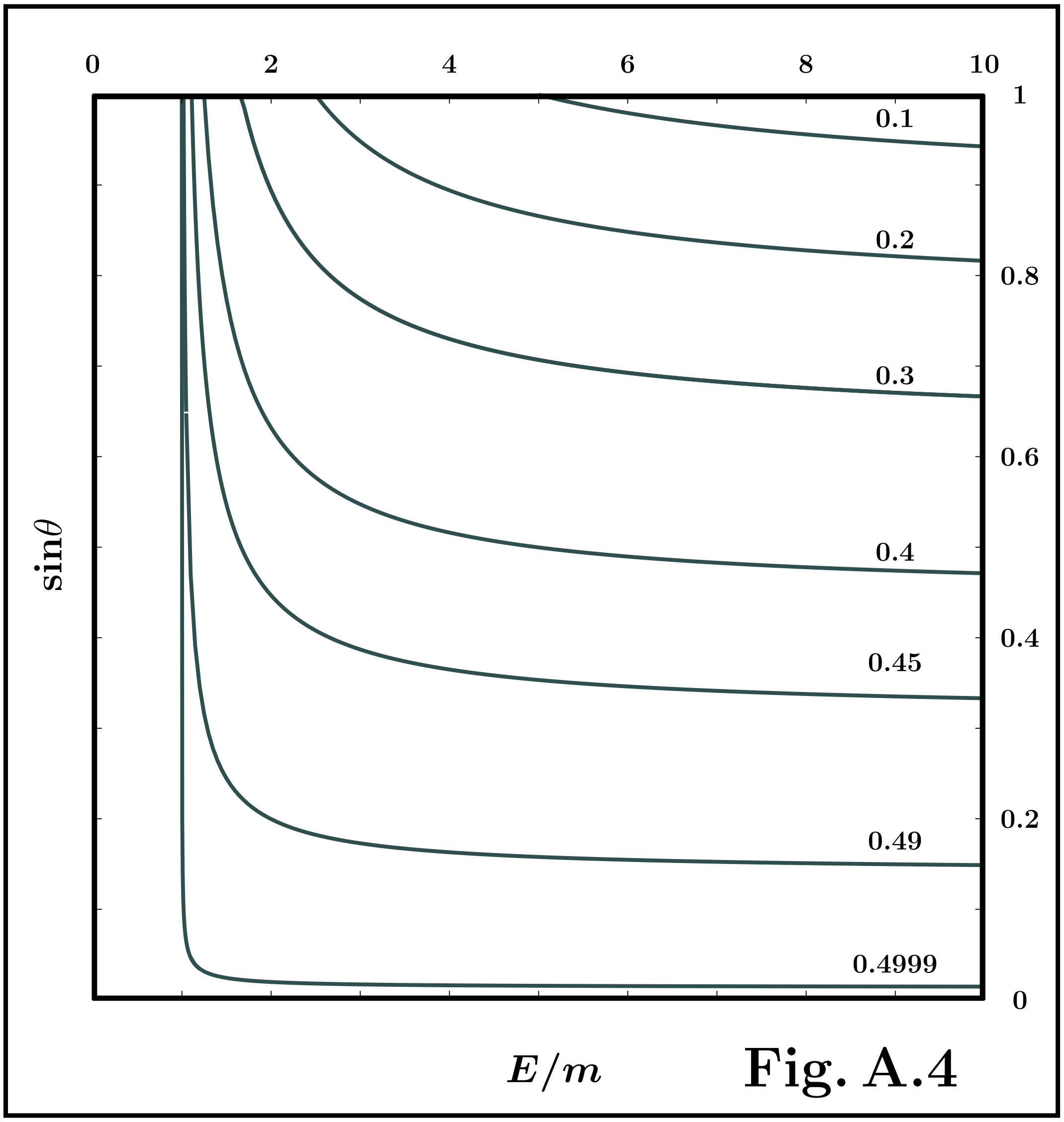

Figura A.4: Curvas de nível para *spin* incidente. $\langle S_z \rangle_{in} = 0.1$, 0.2, 0.3, 0.4, 0.45 e 0.4999

A.3 *Spin* refletido

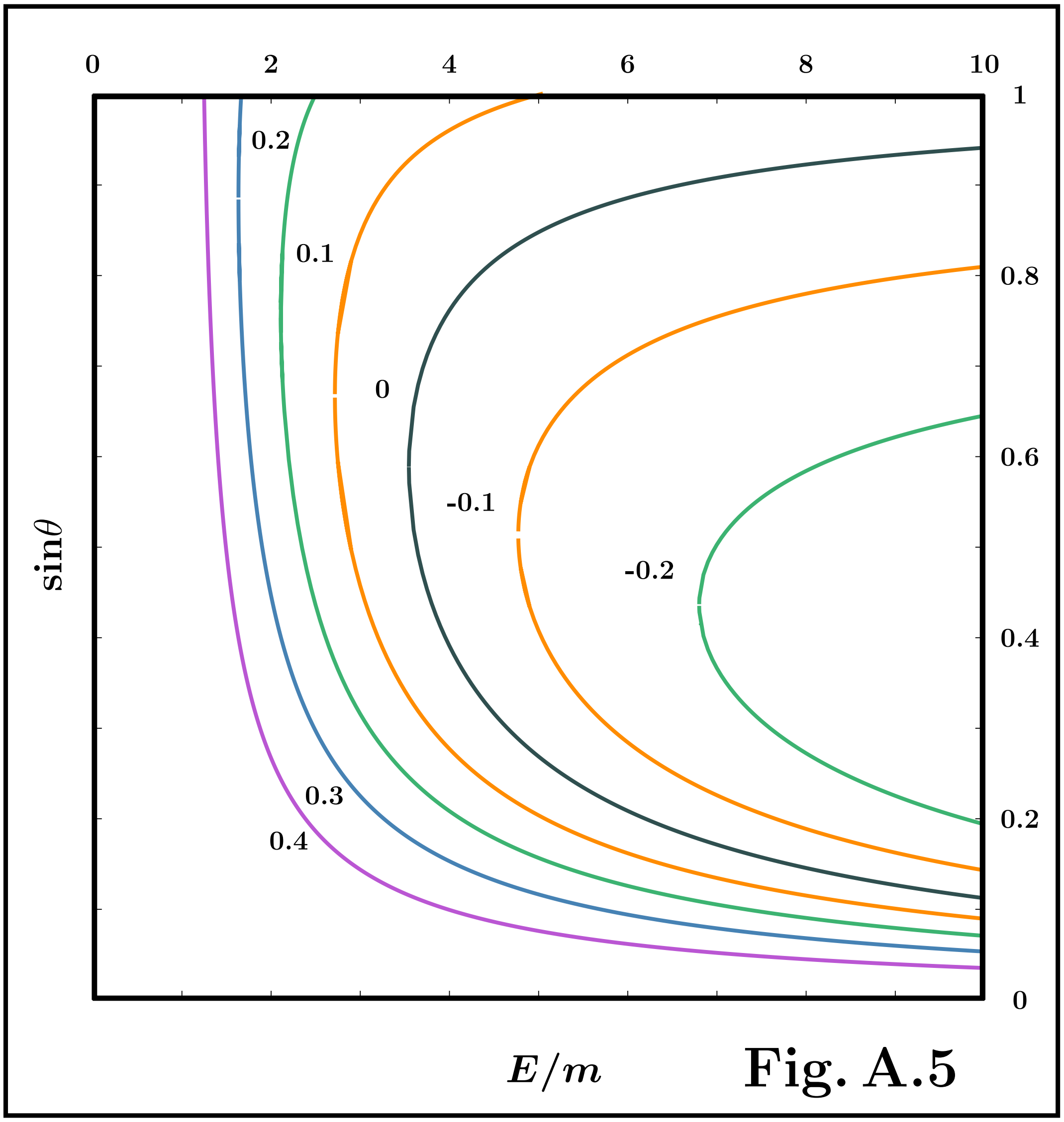

Figura A.5: Curvas de nível para *spin* refletido. $\langle S_z \rangle_{ref} = -0.2$, -0.1, 0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4

A.4 Correlações

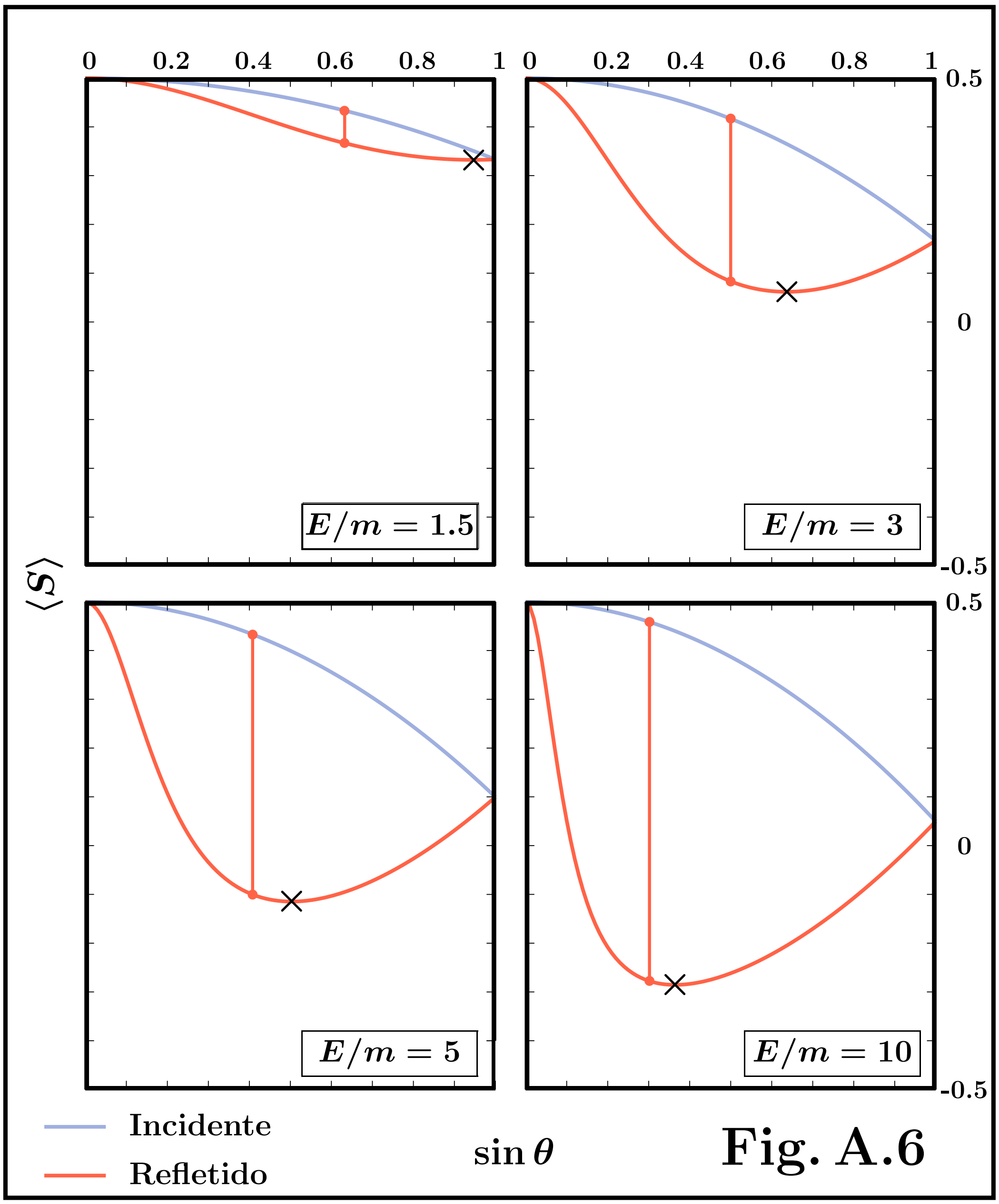

Figura A.6: Máxima separação entre as curvas de *spin* incidente e refletido (como função do seno do ângulo de incidência) e ponto mínimo do *spin* refletido para diferentes energias de incidência

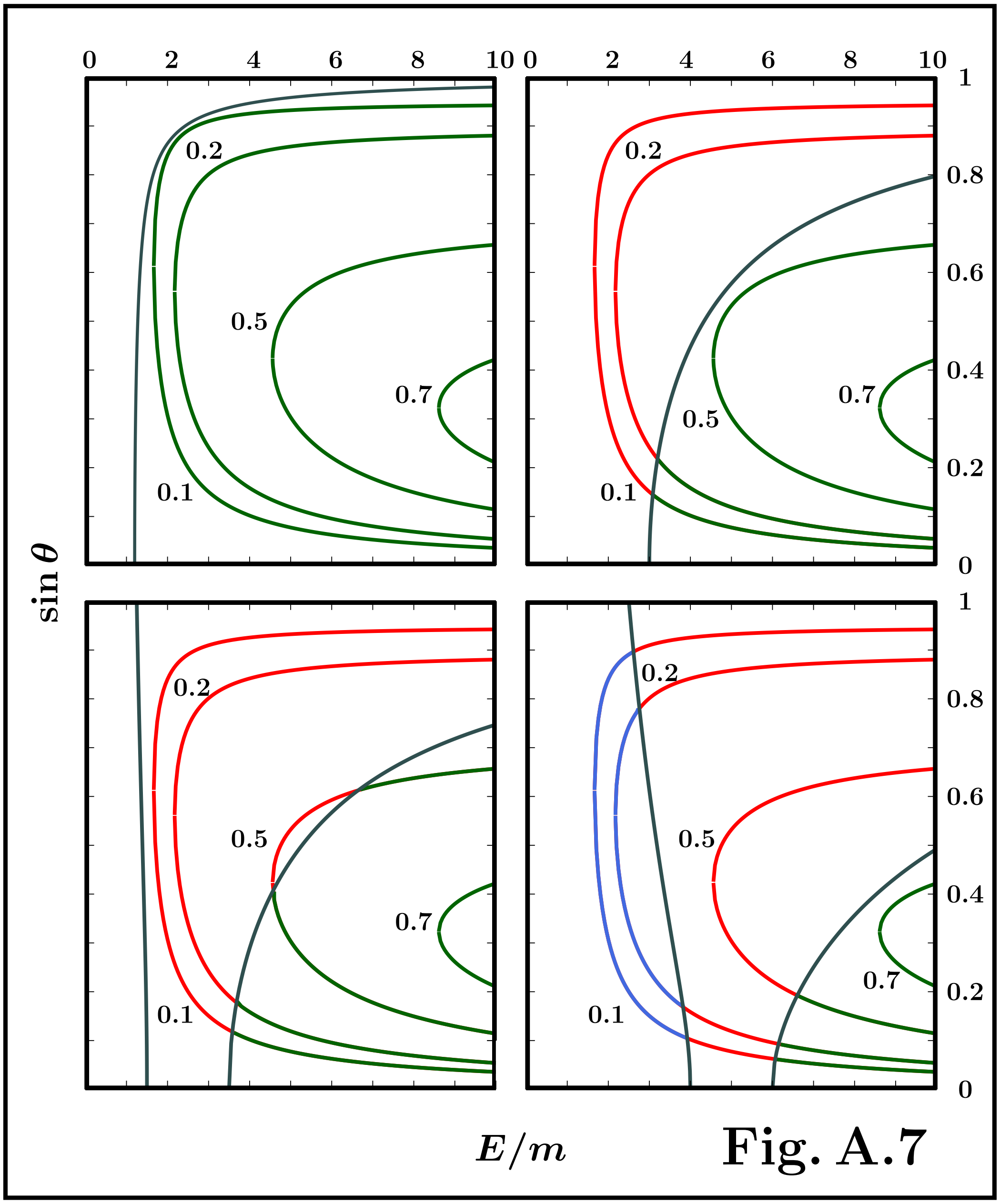

Figura A.7: Intersecções das curvas de nível $\Delta \langle S_z \rangle = \langle S_z \rangle_{inc} - \langle S_z \rangle_{ref}$ com as fronteiras das zonas de difusão, tunelamento e Klein para $V_0 = 0.2$, 2, 2.5 e 5

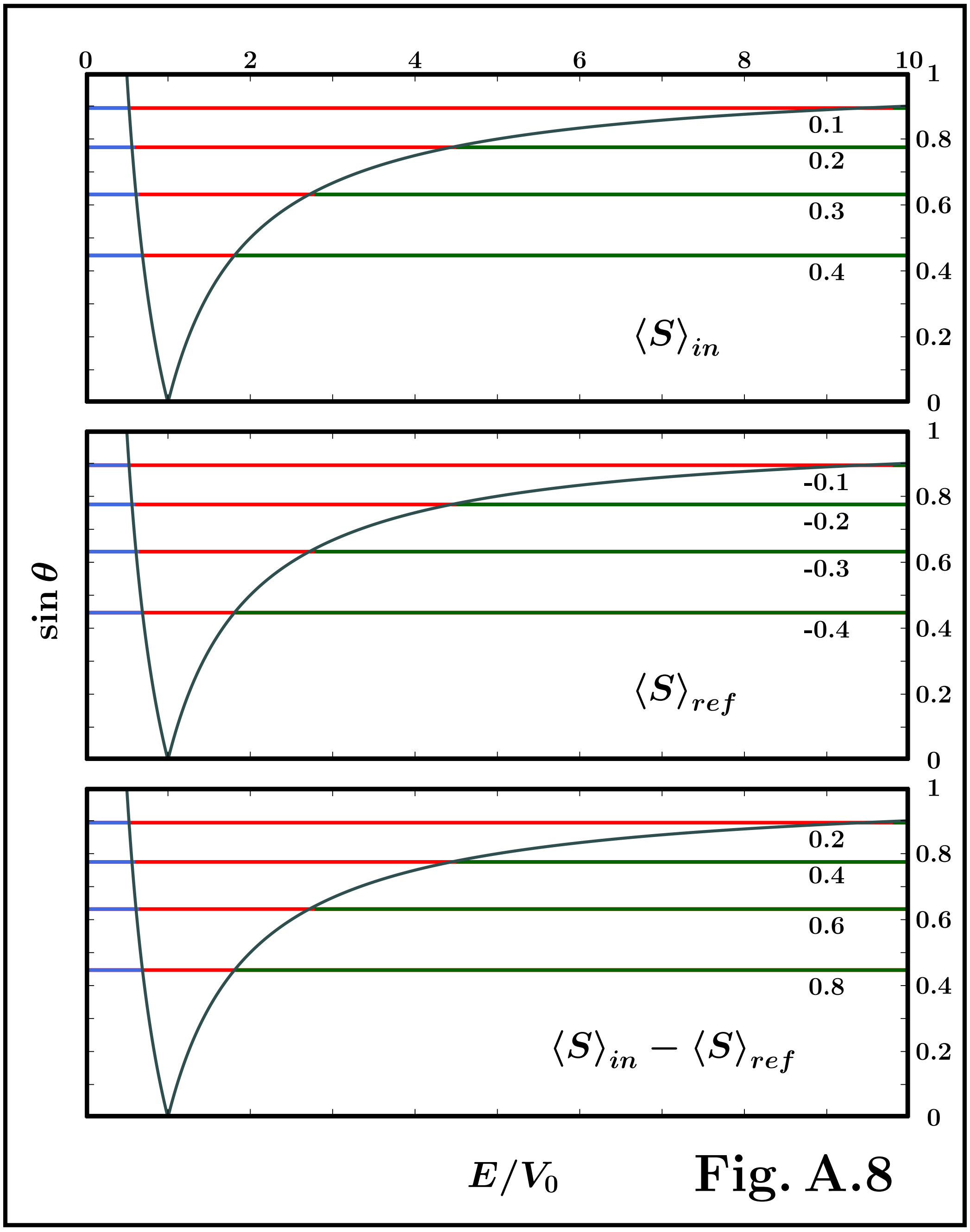

Figura A.8: $\langle S_z \rangle_{in}$, $\langle S_z \rangle_{ref}$ e $\Delta \langle S_z \rangle = \langle S_z \rangle_{inc} - \langle S_z \rangle_{ref}$ no limite de massa zero. Neste caso o parâmetro relevante para determinação das zonas cinemáticas é E/V_0. Sendo o *spin* dependente unicamente do ângulo de incidência, suas curvas de nível são retas horizontais no plano $E/V_0 - \sin\theta$

A.5 Coerência e incoerência na probabilidade de transmissão

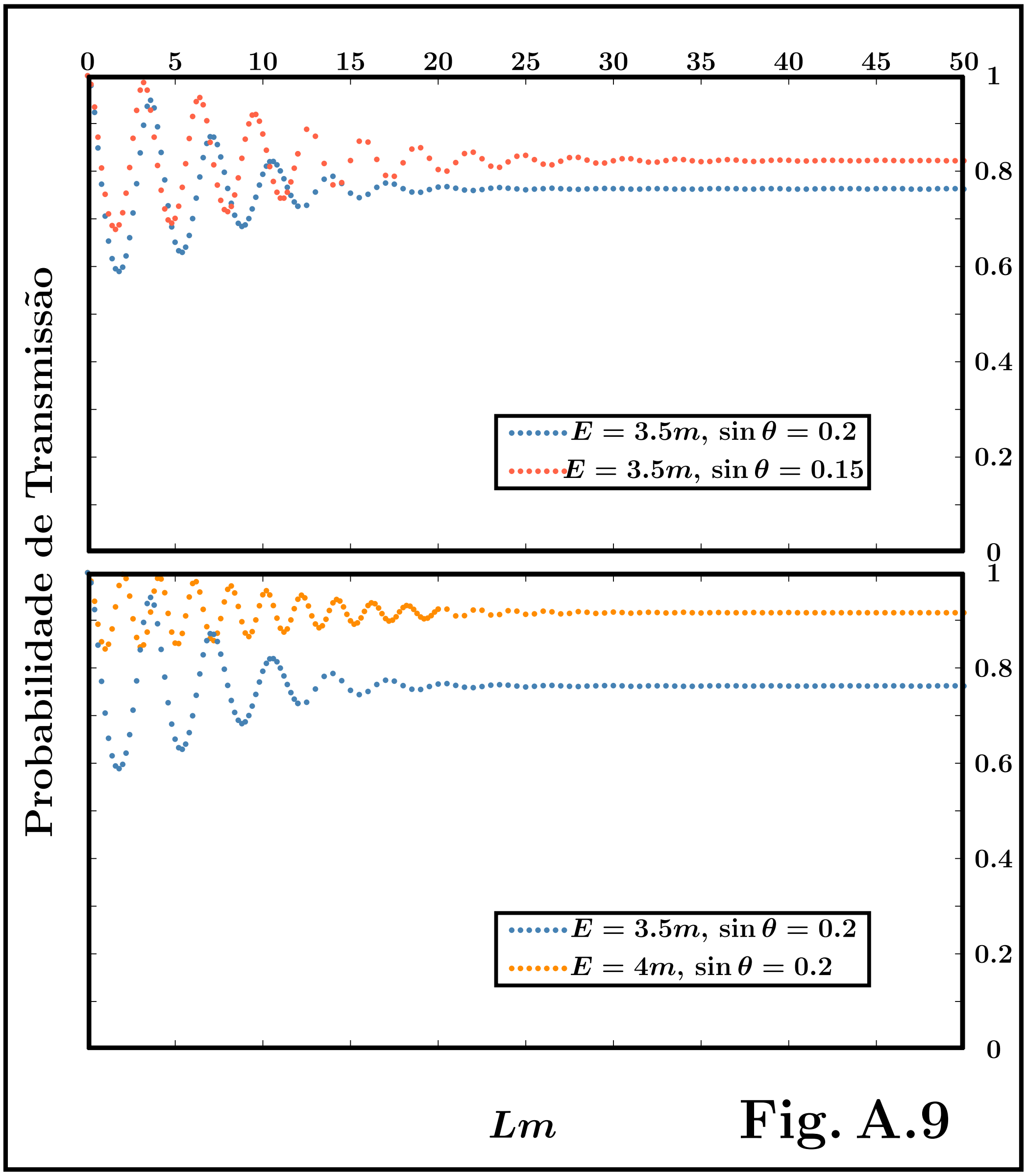

Figura A.9: Probabilidade de transmissão de um pacote de onda com $\mathrm{w}_0 = 10$ como função de L. Em todos os casos $V_0 = 2m$

A.6 *Spin* incidente para pacote de ondas

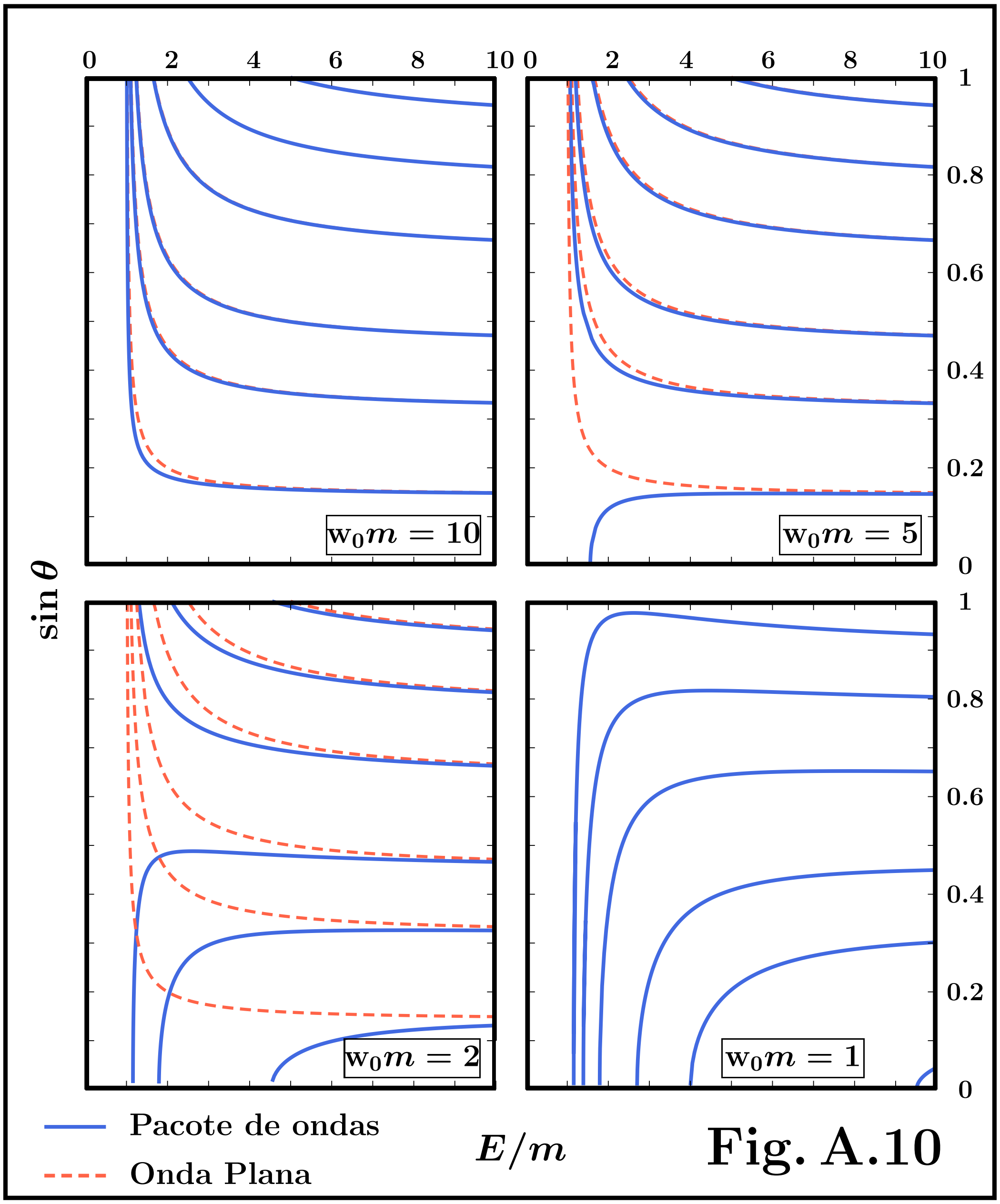

Figura A.10: Variação das curvas de nível para *spin* fixo com diferentes valores de w_0m. Das curvas superiores às inferiores: $\langle S_z \rangle_{in} = 0.1,\ 0.2,\ 0.3,\ 0.4,\ 0.45,\ 0.4999$