

**Abordagem Relativística para o Átomo de
Hidrogênio em um Cenário de Comprimento
Mínimo Introduzido pela Álgebra
Lorentz-Covariante de Quesne-Tkachuk**

Ronald Oliveira Francisco

Programa de Pós-Graduação em Física
Universidade Federal do Espírito Santo

2013

Ronald Oliveira Francisco

**Abordagem Relativística para o Átomo de
Hidrogênio em um Cenário de Comprimento
Mínimo Introduzido pela Álgebra
Lorentz-Covariante de Quesne-Tkachuk**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ciências Físicas do Centro de Ciências Exatas da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para obtenção do Grau de Doutor em Ciências Físicas.

Orientador: prof. Dr José Alexandre Nogueira.

Coorientador: prof. Dr Júlio César Fabris.

VITÓRIA

2013

Agradecimentos

O autor agradece:

- A Deus, pois acredito que em minha vida as coisas sem Ele simplesmente não acontecem. Por ter me dado capacidade e principalmente oportunidade na vida de um dia poder realizar este trabalho.
- Aos professores que contribuíram para minha vida acadêmica, especialmente àqueles que gentilmente aceitaram o convite para fazer parte da banca desta Tese de Doutorado, principalmente ao meu orientador, prof. Dr. José Alexandre Nogueira, que por ser a pessoa que é, por sua forma de lidar com o ser humano, me deu condições e motivação para alcançar mais um degrau em minha vida acadêmica jamais imaginado por mim e pela continuidade dos meus passos nela, até onde eu descobrir que posso chegar.
- Aos amigos que sempre me incentivaram, tanto os da Universidade como os de fora dela. Principalmente aqueles que conviveram comigo e me ajudaram na UFES, especialmente Jeniffer Ribeiro, Thiago Oakes e Bernardo Brunoro, com quem sempre pude contar, quer fosse nos estudos ou na vida pessoal.
- Aos amigos que tenho em Alegre - ES e que de alguma forma contribuíram direta ou indiretamente para a realização deste trabalho.
- Às famílias Oliveira e Francisco por sempre incentivarem os meus passos na vida acadêmica, por sempre se preocuparem comigo, em especial aos meus familiares que convivem comigo, minha mãe Euza,

meu irmão Laércio, meu irmão Leonardo e sua esposa Maria, meu tio Edson, minha tia Elisabeth, que são as pessoas que me dão amparo no dia a dia para não desanimar.

- À minha namorada Lídia Ribeiro, essa pessoa maravilhosa que está fazendo parte da minha vida, dividindo preocupações e alegrias de um momento importante como este.
- Aos meus pais, Jonas Francisco (in memorian) e Euza M. S. Oliveira Francisco, a quem dedico esse trabalho. Meu pai, por ter pensado e planejado meu futuro acadêmico antes mesmo de eu ter nascido e, por isso, embora eu o tenha perdido aos seis anos, pude contar com ele para que eu pudesse investir o que me deixou em estudos, me mantendo durante minha graduação. Minha mãe, pois mesmo sem nunca ter tido condições financeiras, resumiu sua vida a buscar condições para que eu pudesse dar meus passos acadêmicos, acreditando em mim e procurando sempre se mobilizar em busca dos caminhos que eu pudesse seguir.
- Ao CNPq, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, pelo apoio financeiro para a realização deste trabalho.

Resumo

Um dos motivos da gravitação não poder ser inclusa no modelo padrão é a sua não renormalizabilidade. Quase todas as propostas para a quantização da gravidade conduzem à existência de um comprimento mínimo que age como um regularizador natural. Tal efeito sugere uma relação de incerteza generalizada entre os operadores de posição e momento o que resulta em uma relação de comutação modificada desses operadores, e assim alterando toda a estrutura da mecânica quântica. Neste trabalho nós calculamos a ordem de grandeza deste comprimento mínimo através da energia do estado fundamental do átomo de hidrogênio na teoria de Dirac, baseado na relação de comutação de Quesne-Tkachuck. Comparando com dados experimentais, nós obtivemos que o valor do comprimento mínimo é de ordem de grandeza menor ou igual a $10^{-20}m$.

Abstract

One of the reasons for gravity can not be included in the standard model is its non-renormalizability. Almost all the proposals for the quantization of gravity leads to existence of a minimal length which acts as a natural regulator. That effect suggests a generalized uncertainty relations between position and momentum operators what results in a modified commutation relation between these operators, and thus changing the whole structure of quantum mechanics. In this work we calculate the magnitude of this minimum length through the energy of the ground state of the hydrogen atom in Dirac's theory, based on the Quesne-Tkachuck commutation relation. Comparing with experimental data, we obtained the value of the minimum length is orders of magnitude less than or equal to $10^{-20}m$.

Sumário

Resumo	vi
Abstract	vii
1 Introdução	9
1.1 Introdução	10
2 Mecânica quântica	15
2.1 Introdução	16
2.2 Os princípios da mecânica quântica	17
2.3 O princípio da incerteza	23
2.4 Operadores lineares e o espaço de Hilbert	26
2.5 O processo de medida e onda plana	31
2.6 A equação de Schroedinger	34
2.7 Mecânica quântica: Considerações finais	36
3 Comprimento mínimo na mecânica quântica	38
3.1 Introdução	39
3.2 A evidência teórica de um comprimento mínimo	41
3.3 O espaço de Hilbert	43
3.4 Recuperando a informação sobre a posição	49

3.5	Comprimento mínimo na mecânica quântica: Considerações finais	55
4	Mecânica quântica relativística	57
4.1	Introdução	58
4.2	A equação de Klein-Gordon	59
4.3	A equação de Dirac	63
4.4	O átomo de hidrogênio na teoria de Dirac	70
4.5	Mecânica quântica relativística: Considerações finais . .	78
5	Comprimento mínimo na teoria relativística do átomo H	79
5.1	Introdução	80
5.2	A álgebra covariante de Quesne-Tkachuk	81
5.3	O átomo de hidrogênio em um cenário de comprimento mínimo	84
5.4	Determinação de ΔX_{min}^i através do estado fundamental do átomo de hidrogênio	89
5.5	Comprimento mínimo na teoria relativística do átomo H: Considerações finais	92
6	Conclusão	95
6.1	Conclusão	96
7	Apêndices	98
7.1	Apêndice A	99
	Referências bibliográficas	102

Capítulo 1

Introdução

1.1 Introdução

Na descrição da essência básica da natureza, em seu caráter mais primordial, estão estabelecidas atualmente a existência de quatro interações fundamentais. São elas: a interação forte, responsável pela interação entre os quarks; a interação eletromagnética, responsável, por exemplo, pela força repulsiva entre elétrons; a interação fraca, comumente vista no decaimento beta e a interação gravitacional, entre outras situações, observada no movimento dos astros celestes. A interação forte é de uma magnitude de cerca de cem vezes maior que a eletromagnética que por sua vez, é de magnitude típica mil vezes maior que a fraca, essa última sendo da ordem de 10^{34} vezes mais intensa que a gravitacional. Essas interações são descritas por modelos que se baseiam na emissão e absorção de partículas mediadoras de spin inteiro (com ou sem massa), conhecidas como bósons, por partículas de spin semi-inteiros (também com ou sem massa), conhecidas por férmions, dentro de uma prescrição física consistente com a mecânica quântica e a relatividade restrita.

Uma vez que o alcance das interações forte e fraca é curtíssimo, em geral intranuclear, a maioria dos fenômenos que ocorrem a partir da escala atômica até a ordem do tamanho do universo pode ser descrita pela eletrodinâmica (distâncias interatômicas) e pela gravitação (distâncias de metros a anos-luz). A gravitação, até este momento, resiste a uma descrição compatível com a mecânica quântica, contudo essa incompatibilidade não se traduz em efeitos observacionais significativos, visto que, possíveis correções gravitacionais para fenômenos nos domínios atômico e sub-atômico são extremamente insignificantes. Todavia, a eletrodinâmica não pode descrever fenômenos nesses domínios sem o requerimento de que seja consistente com a mecânica quântica. Assim, historicamente surgiu a necessidade de se construir uma teoria que descrevesse fenômenos

eletromagnéticos obedecendo a essa exigência. A eletrodinâmica quântica surgiu dentro desse contexto, fundamentada sobre a união entre relatividade restrita e mecânica quântica, como a primeira teoria quântica de campos. O sucesso atingido foi tão notável que motivou a extensão de formulações de teorias de campos para os outros tipos de interações existentes. O formalismo da teoria quântica de campos acomoda situações em que o número de partículas não permanece constante, o que a torna extremamente conveniente para descrever, por exemplo, processos como a emissão e a absorção de fótons por átomos.

O maior desafio da física teórica nas últimas décadas, tem sido tentar descrever essas quatro interações de forma unificada em uma única conjectura teórica que seja uma teoria do tudo. O chamado modelo padrão consegue descrever essas interações unificadamente, através dos mesmos princípios matemáticos, por meio da teoria quântica de campos, a única exceção é a interação gravitacional. A aplicação dos princípios da teoria quântica de campos à gravitação faz com que essa se apresente não renormalizável, de modo que não é possível lhe atribuir sentido físico. Ao longo das últimas décadas, algumas teorias surgiram no intuito de tentar descrever a interação gravitacional quanticamente de maneira que essa possua sentido físico consistente. A teoria de cordas e a gravitação quântica de laços têm sido muito promissoras nesse sentido, embora ainda não possam ser comprovadas experimentalmente. Uma das mais interessantes consequências da tentativa de unificação das interações fundamentais é que teorias de quantização da gravitação têm conduzido à existência de um comprimento observável mínimo, da ordem da escala de Planck $l_p = \sqrt{\frac{G\hbar}{c^3}}$, algo em torno de 10^{-33} cm. O argumento plausível em favor da existência de um comprimento mínimo é baseado no raciocínio de que as altas energias utilizadas na tentativa de se resolver pequenas distâncias, perturbam significativamente a estrutura do

espaço-tempo através de efeitos gravitacionais, sendo assim, existiria um limite máximo de localizabilidade. Desse modo, a gravitação quântica é na verdade uma teoria que dispensa renormalização, pois esse comprimento mínimo age como um regularizador natural.

Surge, então, a questão de como o formalismo da teoria quântica deve ser reformulado ou generalizado para incorporar consistentemente o comprimento mínimo. É natural, embora não trivial, assumirmos o comprimento mínimo como uma incerteza mínima não nula em medidas da posição de uma partícula, $\Delta x_{min} > 0$. Sendo assim, nenhum ente físico que nós chamamos de partícula, pode ser descrito como pontual e bem localizado em um ponto do espaço. A existência de um comprimento mínimo, por sua vez, exige um princípio da incerteza generalizado, que em uma dimensão pode ser escrito como [24]

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2} [1 + \beta(\Delta p)^2 + \gamma], \quad (1.1)$$

o que será discutido no decorrer do trabalho. Isso difere do princípio da incerteza de Heisenberg da forma como o conhecemos. Naquele caso, o menor valor possível para Δx é zero (quando Δp tende a infinito), aqui, no princípio da incerteza generalizado, o menor valor possível é $\Delta x_{min} = \hbar\sqrt{\beta}$, o que implica imediatamente que não há autoestados físicos do operador de posição, visto que um autoestado, por definição, possui incerteza igual a zero. Há ainda muitas outras consequências, tanto conceituais como algébricas, para o formalismo da mecânica quântica quando generalizada por considerarmos um comprimento mínimo, o que vamos expor posteriormente, pois é um dos objetivos deste trabalho.

O objetivo principal deste trabalho é estimarmos um limite superior para o comprimento mínimo com base em algum dado experimental já conhecido. Para isso, vamos utilizar o sistema do átomo de hidrogênio e calcular a energia do seu estado fundamental através dessa teoria quântica modificada. O estado fundamental modificado pela teoria generalizada com comprimento mínimo (que, como veremos, é função de Δx_{min}) ao ser comparado com o que se conhece experimentalmente, fornecerá um limite superior para Δx_{min} . Correções para o espectro de energia do átomo de hidrogênio, devido à presença de um comprimento mínimo foram calculadas por muitos autores [14, 28, 30, 19, 12, 23]. F. Brau, citado na primeira referência, foi quem primeiro utilizou a correção devido ao comprimento mínimo no cálculo do estado fundamental do átomo de hidrogênio, para estimar um valor máximo para Δx_{min} . Ele obteve um valor da ordem de $10^{-17}m$ utilizando a teoria (que é não relativística) de Schroedinger. Surge daí a motivação do nosso trabalho. Nós fizemos o cálculo para o caso relativístico, generalizando a teoria de Dirac do átomo de hidrogênio no cenário em que se considera a existência do comprimento mínimo, utilizando a álgebra covariante de Quesne-Tkachuk [9, 10, 33] para redefinirmos os operadores de posição e momento dentro desse novo cenário. Esperamos que correções de estrutura fina da teoria relativística forneçam uma restrição maior para o comprimento mínimo do que aquela obtida por Brau.

Este trabalho está organizado da seguinte maneira: o capítulo 1, de introdução, visa situar o leitor sobre o panorama da física teórica atual e onde esse trabalho se encontra dentro disso. O capítulo 2 trata de uma revisão da mecânica quântica, abordando somente os aspectos principais que sofrem modificações quando incluímos o comprimento mínimo na teoria, como por exemplo o princípio da incerteza e o conceito de medida. No capítulo 3, começamos a discutir sobre os argumentos em favor da

existência de um comprimento mínimo e assumindo-o como existente, passamos a expor as principais modificações que isso traz para o formalismo da teoria quântica. O capítulo 4 é uma revisão da mecânica quântica relativística de uma partícula simples, ou seja, a teoria de Dirac aplicada ao átomo de hidrogênio, pois é nesse sistema que pretendemos aplicar as modificações causadas pelo comprimento mínimo a fim de calculá-lo. O capítulo 5 é o capítulo principal deste trabalho, onde aplicamos os princípios apresentados nos capítulos anteriores para obtermos o hamiltoniano de Dirac do átomo de hidrogênio modificado pelo comprimento mínimo e, por fim, calcularmos o estado fundamental modificado e comparando-o com dados experimentais, obtermos um valor para Δx_{min} . Por último, no capítulo 6 apresentamos a conclusão dos nossos resultados obtidos.

Capítulo 2

Mecânica quântica

2.1 Introdução

Até o século XIX toda descrição física dos fenômenos da natureza estava fundamentada sobre os pilares da mecânica newtoniana e do eletromagnetismo de Maxwell. A mecânica de Newton descrevia o movimento dos corpos, desde a queda de uma maçã na superfície da Terra às órbitas dos astros celestes. Eletricidade, magnetismo e óptica por sua vez, foram unificados com a teoria de Maxwell do eletromagnetismo que previu a existência de ondas eletromagnéticas, como a própria luz. Naquela conjectura, qualquer fenômeno físico que envolvesse transporte de momento linear e energia era descrito em termos de uma entre duas entidades físicas, as partículas ou as ondas. Enquanto as partículas eram entidades pontuais e bem localizadas no espaço, as ondas eram entidades que se propagavam em toda uma região espacial que matematicamente era descrita por um campo. Assim, os fenômenos ficaram caracterizados como fenômenos ondulatórios, ou fenômenos corpusculares. No início do século XX, exatamente em 1900, a interpretação de Max Planck do fenômeno da radiação de corpo negro deu início ao surgimento da física quântica. A partir daí, outros fenômenos começaram a revelar uma característica de dualidade para as ondas e as partículas. O efeito fotoelétrico, interpretado por Einstein, evidenciou um caráter corpuscular para a radiação. O experimento de difração com elétrons evidenciou um caráter ondulatório para as partículas. A teoria atualmente aceita nos diz que as entidades físicas possuem essa característica de dualidade, mas que apenas um dos aspectos, corpuscular ou ondulatório, se manifesta em uma dada situação.

A física quântica estuda os fenômenos que ocorrem na escala atômica ou subatômica para os quais a física clássica (que é como chamamos a física existente antes do surgimento da física quântica) falha na tentativa de

explicar. Embora alguns fenômenos quânticos tenham sido bem explicados por modelos teóricos elaborados por Planck, Einstein e outros, uma teoria quântica geral, no sentido de matematicamente englobar qualquer fenômeno quântico, só foi formulada a partir de 1925 por Schroedinger, Dirac e Heisenberg, dentre outros, a chamada mecânica quântica. O átomo de hidrogênio foi o primeiro sistema que ratificou o sucesso da mecânica quântica, sendo observada a concordância inquestionável entre previsão teórica e resultados experimentais.

Neste capítulo pretendemos apresentar as principais ideias que compõem as bases da mecânica quântica. Começamos com a descrição dos postulados que regem a mecânica quântica, sobre os quais está estruturada toda a teoria. Na seção seguinte, falamos sobre o princípio da incerteza de Heisenberg, assunto que será constante neste trabalho. Ainda comentamos sobre a estrutura matemática da mecânica quântica: espaço de Hilbert, bases, operadores lineares, função de onda, etc. Nossa abordagem é somente qualitativa em certos aspectos, pois este capítulo deve ser visto apenas como um pré-requisito necessário para a compreensão do enfoque principal deste trabalho, que é determinar a ordem de grandeza da escala de comprimento mínimo, Δx_{min} , que surge quando a mecânica quântica é reformulada levando em consideração uma incerteza mínima não nula na posição, que induz uma modificação da relação de comutação entre \hat{x} e \hat{p} e conseqüentemente sobre a estrutura da mecânica quântica.

2.2 Os princípios da mecânica quântica

Em mecânica clássica a descrição de um sistema se dá em termos de suas coordenadas generalizadas q_i e seus momentos conjugados p_i , que são chamadas variáveis dinâmicas, onde $i = 1, 2, \dots, n$, sendo n o número

de graus de liberdade do sistema. A lagrangiana L é usada para definir o momento conjugado,

$$p_i := \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}. \quad (2.1)$$

A especificação das variáveis dinâmicas como funções (reais) do tempo nos permite conhecer a posição e a velocidade de qualquer ponto do sistema em qualquer instante, se elas forem conhecidas em um instante inicial t_0 . Todas as grandezas físicas associadas ao sistema são descritas em termos de suas variáveis dinâmicas e o movimento do sistema pode ser determinado através das equações de Euler-Lagrange ou das equações canônicas de Hamilton,

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (2.2)$$

e

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}. \quad (2.3)$$

A energia total E do sistema, por exemplo, é dada pelo Hamiltoniano clássico, que no caso de uma partícula simples de massa m sujeita a um potencial escalar $V(\vec{r}, t)$ é dado por

$$H(\vec{r}, \vec{p}, t) = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}, t) \quad (2.4)$$

É fácil verificar, através das equações de Hamilton, que as equações que descrevem o movimento do sistema dado por esse hamiltoniano são bem conhecidas e dadas por

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{\vec{p}}{m} \quad (2.5)$$

e

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\vec{\nabla}V \quad (2.6)$$

Em suma, na descrição clássica de um sistema físico, temos então que:

1. O estado do sistema em um instante t_0 é definido especificando n coordenadas generalizadas $q_i(t_0)$ e seus momentos conjugados $p_i(t_0)$.
2. O valor em um dado instante de qualquer grandeza física mensurável é completa e exatamente determinado se o estado do sistema é conhecido naquele instante. Desse modo, conhecendo o estado do sistema, é possível prever com certeza o resultado de qualquer medida realizada naquele instante.
3. A evolução no tempo do estado do sistema é dada pelas equações de Hamilton. Como são equações diferenciais de primeira ordem, sua solução $q_i(t)$ e $p_i(t)$ é única e o estado do sistema é conhecido em qualquer instante se o seu estado inicial for conhecido.

Do ponto de vista da mecânica quântica o cenário é completamente diferente e a teoria, para que tenha interpretação física, ainda deve ser capaz de descrever:

1. Como o estado de um sistema quântico é descrito matematicamente em um dado instante?
2. Como prever resultados de medidas das grandezas físicas uma vez dado esse estado?
3. Como o estado do sistema pode ser conhecido em um instante t qualquer, se ele é conhecido em um instante t_0 ?

A mecânica quântica está fundamentada sobre alguns postulados que nos dão as respostas dessas perguntas. Vamos apresentá-los a partir de agora [7].

Postulado 1

Em um dado instante t_0 , o estado de um sistema físico é definido especificando um ket $|\psi\rangle$ pertencente ao espaço de estados \mathcal{E} .

A cada $|\psi\rangle$ pertencente a \mathcal{E} está associada uma função $\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle$ correspondente, pertencente ao espaço das funções quadrado-integráveis¹. Sendo \mathcal{E} um espaço vetorial, este postulado implica no princípio da superposição, pois uma combinação linear de vetores de estado desse espaço é um vetor de estado pertencente a ele. Em uma das seções que se seguem discutiremos algumas propriedades referentes a este espaço vetorial e suas implicações.

Postulado 2

Toda grandeza física mensurável A é descrita por um operador \hat{A} atuando em \mathcal{E} , este operador é um observável.

Diferente da mecânica clássica, na mecânica quântica as grandezas físicas são descritas por operadores atuando em um espaço vetorial, não por funções reais. Um observável é basicamente um operador auto-adjunto, portanto seus autovalores são números reais, tal que seus autovetores formam uma base do espaço de Hilbert², \mathcal{H} , o que é necessário para que os postulados possam ser aplicados consistentemente e a teoria descrita

¹São funções, em geral complexas, cuja integral do quadrado de seus módulos em todo o espaço é finita.

²Espaço de Hilbert é um espaço vetorial, com produto interno, completo, ao qual pertencem as funções quadrado-integráveis.

matematicamente tenha coerência física.

Postulado 3

O único resultado possível da medida de uma grandeza física A é um dos autovalores de seu observável \hat{A} correspondente.

Como a física é descrita no universo dos números reais, esse é o motivo pelo qual os operadores que representam as grandezas físicas devem ser auto-adjuntos, pois seus autovalores, como já dito anteriormente, são números reais. É válido notar que se o espectro de \hat{A} é discreto, os resultados que se podem obter ao realizarmos medidas de A são quantizados.

Postulado 4

A probabilidade de obter o autovalor a_n ao se realizar uma medida da grandeza física A é $P(a_n) = \langle u_n | \psi \rangle \langle \psi | u_n \rangle$, onde $|\psi\rangle$ é o estado (normalizado) do sistema antes da medida e $|u_n\rangle$ são os autovetores normalizados do operador \hat{A} , que por simplicidade, para nossos propósitos, consideramos ter um espectro discreto e não-degenerado.

As previsões que podemos obter ao realizarmos uma medida são apenas probabilísticas e não mais determinísticas como na física clássica, ou seja, não é possível prever exatamente que resultado será obtido ao se fazer uma medida de uma certa grandeza física do sistema em um estado geral arbitrário.

Postulado 5

Se a medida da grandeza física A do sistema no estado $|\psi\rangle$ dá o resultado a_n , o estado do sistema imediatamente após a medida é a projeção normalizada $\hat{P}_n |\psi\rangle$ sobre o autosubspaço associado a a_n .

Esse postulado significa dizer que o sistema sempre é perturbado ao se realizar uma medida, ou seja, não existe observador ideal, de modo que é impossível realizá-la sem interferir no estado do sistema antes da medida.

Postulado 6

A evolução temporal de um vetor de estado $|\psi(t)\rangle$ é regida pela equação de Schroedinger,

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle, \quad (2.7)$$

onde $\hat{H}(t)$ é o operador hamiltoniano do sistema.

A equação de Schroedinger desempenha um papel fundamental na mecânica quântica, pois ela é que determina a evolução temporal de um sistema físico. Através dela é possível determinarmos qual será a forma funcional do vetor de estado que descreve o sistema em um instante t qualquer, se ele é conhecido em um instante inicial t_0 . Assim é possível prever, dentro do contexto dos postulados anteriormente citados, o resultado de medidas de grandezas físicas realizadas no instante t .

Diferentemente das leis da mecânica clássica, os resultados previstos pelas leis da mecânica quântica fogem do nosso senso comum ou da nossa intuição. Os postulados apresentados acima constituem as bases da mecânica quântica. Todo e qualquer sistema de ordem de grandeza da escala atômica e subatômica, portanto, no domínio quântico, são governados por essas leis. Nas seções que se sucedem discutiremos com mais detalhes alguns dos aspectos e conceitos importantes associados a esses postulatos.

2.3 O princípio da incerteza

O princípio da incerteza é um enunciado da mecânica quântica que impõe restrição à precisão com que se pode conhecer simultaneamente o valor das medidas de um dado par de observáveis, por exemplo, os observáveis \hat{x} e \hat{p} , associados às grandezas x e p que representam a coordenada x da posição e do momento linear de uma partícula, respectivamente.

Intuitivamente, consideremos o seguinte exemplo: quando se deseja determinar a posição de um elétron, é necessário fazê-lo interagir com algum instrumento de medida. Por exemplo, fazendo-o interagir com algum tipo de radiação incidente. Para se determinar a posição do elétron, é necessário que a radiação tenha comprimento de onda da ordem de grandeza da incerteza com que se quer determinar a posição. Nesse caso, quanto menor for o comprimento de onda (maior frequência) maior é a precisão. No entanto, maior será a energia cedida pela radiação (onda ou fóton) em virtude da relação de Planck entre energia e frequência da radiação,

$$E = \hbar\omega. \quad (2.8)$$

Assim, o elétron sofrerá um “recuo”, que será maior quanto maior for essa energia, em virtude do efeito Compton. Consequentemente, a velocidade sofrerá uma alteração de modo não previsível, ao contrário do que afirmaria a mecânica clássica. Argumentos similares podem ser usados para mostrarmos que ao se tentar medir a velocidade com precisão, a posição sofrerá uma alteração de modo não totalmente previsível. Assim, podemos dizer que tudo acontece de maneira que quanto mais precisa for a medida de uma grandeza, mais imprecisa será a medida da grandeza canonicamente conjugada³ correspondente, se desejamos determiná-las

³Duas grandezas A e B são canonicamente conjugadas quando seu parênteses de Poisson é igual a

simultaneamente.

É possível, matematicamente, mostrarmos que dois observáveis que comutam possuem uma base de auto-vetores em comum. Se \hat{x} e \hat{p} comutassem haveria uma base formada por auto-vetores simultâneos de ambos que seriam também auto-vetores de todos os demais observáveis $\hat{A}(\hat{x}, \hat{p})$, desse modo, reobteríamos a mecânica clássica, apenas com uma outra formulação. Sendo assim, quanticamente devemos ter \hat{x} e \hat{p} não comutantes. A forma correta desse comutador, que implica em uma coerência entre experimentos e formulação teórica e que faz com que recuperemos a mecânica clássica num certo limite apropriado, chamado limite clássico, é a chamada relação de comutação de Heisenberg

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar\mathbb{I}. \quad (2.9)$$

Agora, em termos da formulação matemática da mecânica quântica, o princípio da incerteza pode ser visto da seguinte maneira. Consideremos dois operadores \hat{A} e \hat{B} , como o operador da posição e o operador do momento. Em geral, os autoestados de um operador não são os mesmos autoestados do outro operador. Conseqüentemente, de acordo com os postulados 3 e 5, se o sistema está em um estado quântico onde a grandeza A é bem definida, então, a grandeza B não será bem definida. Haverá uma incerteza na grandeza B . Mas, e se o sistema estiver num estado onde a grandeza A é bem definida e efetuarmos uma medida na grandeza B ? Pode-se pensar, então, que saberemos exatamente o valor de ambas as grandezas. Mas isso está errado. Devido ao postulado 5 da mecânica quântica, se uma medida de uma grandeza qualquer B revela o valor b_n , então o sistema “é perturbado pela medida” e passa para o autoestado $|b_n\rangle$ correspondente à grandeza B , de modo que a gran-

um, $\{A, B\} = 1$.

deza A deixa de ter seu valor bem definido. Então, supondo que dois operadores \hat{A} e \hat{B} não possuem os mesmos autoestados, se efetuarmos em um sistema qualquer a medida da grandeza A , e encontrarmos um certo valor, o sistema se torna um autoestado de \hat{A} , com um valor bem definido de A e uma incerteza no valor de B . Se, após isso, efetuarmos uma medida no valor de B , então lançamos o sistema num autoestado de \hat{B} , com um valor bem definido de B e uma incerteza no valor de A . Com isso, dizemos que é impossível saber simultaneamente o valor da grandeza A e da grandeza B . A incerteza entre a posição e o momento proposta por Heisenberg é, então, uma consequência dos postulados da mecânica quântica e não um postulado por si só.

Quantitativamente essa situação é expressa nas chamadas Relações de Incerteza da Mecânica Quântica. Como a norma de qualquer vetor pertencente ao espaço de Hilbert é positiva definida, devemos ter

$$\left\| \left[\Delta\hat{A} + \frac{\langle\psi|[\hat{A}, \hat{B}]|\psi\rangle}{2\langle\psi|(\Delta\hat{B})^2|\psi\rangle} \Delta\hat{B} \right] |\psi\rangle \right\| \geq 0 \quad (2.10)$$

onde $\Delta\hat{A} = \hat{A} - \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ e analogamente para \hat{B} . De onde podemos obter

$$\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle\langle(\Delta\hat{B})^2\rangle \geq \frac{|\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle|^2}{4}, \quad (2.11)$$

que será uma igualdade apenas se (2.10) também for uma igualdade, pois o único vetor cuja norma é igual a zero é o próprio vetor nulo. O valor de $\sqrt{\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle}$ é o desvio médio padrão de medidas realizadas do observável \hat{A} , isto é, a média de quanto essas medidas desviam do valor médio, o que pode ser interpretado como uma incerteza ΔA nas medidas desse observável.

A equação (2.11) expressa matematicamente o fato de que se os observáveis \hat{A} e \hat{B} não comutam, não será possível conhecer com precisão arbitrariamente grande, simultaneamente, os valores das grandezas A e B . Esse é o caso da grandeza x que determina a posição de uma partícula e da grandeza p que determina seu momento linear, cujos observáveis associados \hat{x} e \hat{p} não comutam. Para esse par de observáveis a equação (2.11) se torna

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (2.12)$$

Portanto, quanto mais preciso for o conhecimento sobre a posição de uma partícula, menos preciso será o conhecimento do seu momento e vice-versa. Entretanto, o princípio da incerteza não limita o conhecimento exato da posição ou do momento de uma partícula, isto é, não impossibilita que se tenha incerteza arbitrariamente próxima de zero para uma dessas grandezas. Podemos conhecer com incerteza arbitrariamente pequena o valor da posição da partícula, desde que tenhamos uma incerteza que tenda para infinito no seu momento linear e vice-versa, o que pode ser visto na equação (2.12). Contudo, veremos que um vetor de estado para o qual Δx ou Δp são exatamente nulos não pertence ao espaço de Hilbert, portanto, não representa um estado físico. Isso significa que embora a incerteza na posição ou no momento possam ser arbitrariamente próximas de zero, não podem ser exatamente nulas.

2.4 Operadores lineares e o espaço de Hilbert

Conforme o postulado 2, em mecânica quântica, uma variável dinâmica genérica A é representada por um operador (observável) \hat{A} que atua em vetores de um espaço vetorial particular, chamado espaço de Hilbert.

Aqui \hat{A} é um operador linear e portanto satisfaz a seguinte propriedade:

$$\hat{A}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1(\hat{A}\psi_1) + c_2(\hat{A}\psi_2). \quad (2.13)$$

O espaço de Hilbert é o espaço dos vetores cuja norma (ou produto interno) é finito, por conseguinte é composto por funções quadrado-integráveis

$$\langle f|f \rangle = \int_a^b f^*(x)f(x)dx < \infty, \quad (2.14)$$

seus vetores são ortogonais entre si e formam um conjunto completo, ou seja, uma base desse espaço. Isso significa que qualquer vetor pertencente a ele pode ser expandido como uma combinação linear dos demais (princípio da superposição).

Os operadores lineares atuam na função de onda (vetor) do sistema transformando-a em outra função também pertencente ao espaço de Hilbert. Aqui, no contexto da mecânica quântica, esses operadores são restritos à classe dos operadores hermitianos. Um operador hermitiano é aquele em que o seu adjunto resulta nele mesmo, $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$. Os autovalores de um operador hermiteano são reais e as autofunções associadas a esses autovalores são ortogonais, portanto, o produto escalar de duas funções que diagonalizam um operador hermitiano é nulo.

Em mecânica quântica x e p são representados por operadores de multiplicação e diferenciação que atuam em funções de onda quadrado-integráveis da posição $\psi(x) = \langle x|\psi \rangle$ e do momento $\psi(p) = \langle p|\psi \rangle$, onde $|x\rangle$ e $|p\rangle$ são “autoestados” da posição e do momento, respectivamente. Em outras palavras, $|x\rangle$ representa uma partícula exatamente localizada no ponto x (e que portanto tem incerteza $\Delta x = 0$) e $|p\rangle$ representa uma

partícula cujo momento linear é exatamente igual a p (analogamente $\Delta p = 0$), de modo que para esses estados temos,

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle \quad (2.15)$$

e

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle \quad (2.16)$$

Estritamente falando, $|x\rangle$ e $|p\rangle$ não são estados físicos, pois eles não são normalizáveis, portanto não pertencem ao espaço de Hilbert.

Conforme a interpretação probabilística, se $|x\rangle$ é o autovetor que representa uma partícula exatamente localizada na posição x , de acordo com o postulado 4, $\langle x'|x\rangle = 0$ para $x' \neq x$. O que é evidente, visto que $\langle x'|x\rangle$ é a amplitude de probabilidade de uma partícula localizada exatamente em x ser encontrada em $x' \neq x$. Porém, ainda de acordo com a interpretação probabilística tem-se $\int_{-\infty}^{\infty} |\langle x'|x\rangle|^2 dx' = 1$. Essas duas propriedades deixam claro que $\langle x'|x\rangle$ não pertence a \mathbb{R} e a norma de $|x\rangle$ não está bem definida. Portanto os vetores $|x\rangle$ não pertencem ao espaço de Hilbert e a expressão $\langle x|\psi\rangle$ não teria sentido físico no contexto da mecânica quântica. Contudo, é ainda possível contornarmos matematicamente essa situação, tratá-los como estados físicos e ainda aplicarmos consistentemente a eles a interpretação probabilística.

A fim de solucionarmos esse problema, observemos que os autovetores de \hat{x} e \hat{p} podem ser aproximados por sequências de estados físicos com incertezas arbitrariamente próximas de zero na posição e no momento. Por exemplo, no caso do operador \hat{x} , os seus autovetores $|x\rangle$ podem ser considerados como uma sequência de estados $|\xi_x^{\Delta x}\rangle$ para os quais o valor

esperado de \hat{x} é x e sua incerteza é $\Delta x \rightarrow 0$. Assim podemos definir a função de onda da posição de uma partícula como $\psi(x) \equiv \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \langle \xi_x^{\Delta x} | \psi \rangle$, onde primeiro efetua-se o produto interno e depois do resultado é que se toma o limite. Para uma sequência escolhida adequadamente esse limite está bem definido. Deste modo, contornamos o problema definindo-se uma sequência de estados aproximadamente localizados em x e tomando o limite em que essa aproximação é cada vez mais precisa. Uma vez que $\langle \xi_x^{\Delta x} | \psi \rangle$ é a amplitude de probabilidade de um sistema que se encontra no estado $|\psi\rangle$ estar localizado em torno de x com incerteza Δx , o limite desse termo quando $\Delta x \rightarrow 0$ representa a amplitude de probabilidade do sistema estar exatamente localizado em x , ou seja, a sua função de onda.

Quando $\Delta x \approx 0$ temos $\langle \xi_x^{\Delta x} | \xi_{x'}^{\Delta x} \rangle \approx 0$ para $x \neq x'$, de modo que os $|\xi_x^{\Delta x}\rangle$ formam, aproximadamente, um conjunto ortonormal completo, ou seja,

$$\int |\xi_x^{\Delta x}\rangle \langle \xi_x^{\Delta x}| \approx 1, \quad (2.17)$$

que pode ser usado para definirmos um produto interno de funções no espaço de Hilbert

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \int \langle \phi | \xi_x^{\Delta x} \rangle \langle \xi_x^{\Delta x} | \psi \rangle dx = \langle \phi | \psi \rangle, \quad (2.18)$$

ou

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int \phi^*(x) \psi(x) dx. \quad (2.19)$$

Essa é a mesma expressão que seria obtida se tivéssemos usado como base os auto-vetores do operador \hat{x} ignorando os problemas de sua não normalizabilidade. De fato, operacionalmente, os resultados que são obtidos por meio desse artifício de utilizarmos uma sequência de estados aproximadamente localizada em torno de x são os mesmos que seriam

obtidos se tivéssemos utilizado os auto-vetores de \hat{x} e suas propriedades de ortogonalidade e completeza sem precedentes. Assim, para um observável \hat{A} qualquer vale

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \langle \xi_x^{\Delta x} | \hat{A} | \psi \rangle = \langle x | \hat{A} | \psi \rangle. \quad (2.20)$$

Então, é comum utilizarmos a notação $\langle x | \hat{A} | \psi \rangle$ e tratarmos os auto-vetores de \hat{x} como se fossem, de fato, estados físicos, embora saibamos que por trás dessa simbologia exista o processo limite que já foi mencionado. Conseqüentemente, os auto-vetores de \hat{p} , que a princípio também não representam estados físicos, também podem ser tratados utilizando-se dos mesmos princípios que foram usados para os auto-vetores de \hat{x} .

Duas representações são possíveis para os operadores \hat{x} e \hat{p} , uma em termos dos auto-vetores de \hat{x} e outra em termos dos auto-vetores de \hat{p} . No primeiro caso temos

$$\langle x | \hat{x} | \psi \rangle = \hat{x} \psi(x) = x \psi(x) \quad (2.21)$$

e

$$\langle x | \hat{p} | \psi \rangle = \hat{p} \psi(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x). \quad (2.22)$$

No segundo caso temos

$$\langle p | \hat{x} | \psi \rangle = \hat{x} \psi(p) = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \psi(p) \quad (2.23)$$

e

$$\langle p | \hat{p} | \psi \rangle = \hat{p} \psi(p) = p \psi(p). \quad (2.24)$$

É fácil verificar que para qualquer uma dessas duas representações a relação de comutação de Heisenberg para os operadores \hat{x} e \hat{p} é satisfeita. A representação em termos de \hat{p} será particularmente útil, pois no próximo capítulo veremos que no cenário em que há uma incerteza mínima não nula na posição, não é possível existir autoestados físicos do operador de posição, \hat{x} . Portanto, a álgebra do espaço de Hilbert nesse caso será toda definida em termos da representação no espaço dos momentos.

2.5 O processo de medida e onda plana

O postulado 5 fala de uma perturbação fundamental existente em qualquer processo de medida realizado em um sistema quântico, essa “interferência” exercida pelo instrumento de medida sobre o sistema lança esse último, imediatamente após a medida, em um estado quântico que é a projeção normalizada da função de onda antes da medida sobre o subespaço gerado pelos auto-vetores associados ao autovalor obtido na medida. Essa é a situação no caso de um espectro discreto. No caso de um espectro contínuo, em que se deseja, por exemplo, determinar a localização espacial de uma partícula realizando uma medida de sua posição, deve-se levar em conta que medir exatamente o autovalor a dentre um contínuo de valores possíveis, seria realizar uma medida com resolução infinita (a resolução de uma medida é, por definição, o inverso da incerteza dessa medida), tal aparato na prática não existe e, além disso, o estado do sistema após a medida seria o auto-vetor $|a\rangle$ que não pertence ao espaço de Hilbert, portanto, não é um estado físico possível, devido às questões apresentadas na seção anterior. Assim, para o caso contínuo, o postulado 5 na verdade significa dizer que medir um autovalor a é medir um intervalo $I_a^{\delta a} = [a - \frac{\delta a}{2}, a + \frac{\delta a}{2}]$ centrado em a de largura δa . Esse

intervalo é mais próximo de zero quanto maior for a resolução do aparato utilizado para se realizar a medida, mas nunca poderá ser exatamente igual a zero.

Suponhamos que ao se realizar a medição da coordenada x de uma partícula o resultado tenha sido o intervalo $I_x^{\delta x}$. Imediatamente após a medida o estado quântico da partícula passa a ser $\hat{P}_x|\psi\rangle$, onde \hat{P}_x projeta $|\psi\rangle$ no subespaço gerado por todos os auto-vetores de \hat{x} associados aos autovalores x' pertencentes a $I_x^{\delta x}$. Nessas condições tem-se

$$\hat{P}_x = \int_{x-\frac{\delta x}{2}}^{x+\frac{\delta x}{2}} |x'\rangle\langle x'|dx'. \quad (2.25)$$

É como se o aparato medisse não diretamente os autovalores de \hat{x} , mas sim se o sistema encontra-se localizado em uma região espacial pré-determinada ou não. Não faz sentido perguntar se o sistema encontrasse em um único ponto, mas sim a probabilidade de sua distribuição ao longo de uma região determinada de tamanho δx , que pode ser próxima de zero, mas não exatamente igual a zero, o que seria um ponto no sentido matemático.

Podemos determinar a função de onda que representa uma partícula exatamente localizada em um ponto x , isto é, aquela para a qual $\Delta x = 0$ e portanto $\Delta p \rightarrow \infty$. Para isso, observe que da positividade da norma temos

$$\left\| \left[\Delta \hat{x} + \frac{\langle [\hat{x}, \hat{p}] \rangle}{2\langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle} \Delta \hat{p} \right] |\psi\rangle \right\| \geq 0. \quad (2.26)$$

Como vimos na seção 2.3 isso implica

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (2.27)$$

Portanto, um estado quântico para o qual $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$ deve satisfazer

$$\left[\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle + \frac{\langle [\hat{x}, \hat{p}] \rangle}{2\langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle} (\hat{p} - \langle \hat{p} \rangle) \right] |\psi\rangle = 0. \quad (2.28)$$

Projetando em $\langle p|$ temos

$$\langle p|\hat{x}|\psi\rangle = \left[\langle \hat{x} \rangle + \frac{\langle [\hat{x}, \hat{p}] \rangle}{2\langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle} \langle \hat{p} \rangle \right] \langle p|\psi\rangle - \frac{\langle [\hat{x}, \hat{p}] \rangle}{2\langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle} \langle p|\hat{p}|\psi\rangle, \quad (2.29)$$

ou

$$\frac{\partial}{\partial p} \psi = \left[-\frac{i\langle \hat{x} \rangle}{\hbar} + \frac{\langle \hat{p} \rangle}{2(\Delta p)^2} \right] \psi - \frac{p}{2(\Delta p)^2} \psi, \quad (2.30)$$

cuja solução, conhecida como função de onda Gaussiana, é dada por

$$\psi(p) \propto e^{\frac{-i\langle \hat{x} \rangle}{\hbar} p} \exp\left(-\frac{p^2}{4(\Delta p)^2} + \frac{\langle \hat{p} \rangle p}{2(\Delta p)^2}\right). \quad (2.31)$$

Então, essa é a função de onda que representa uma partícula cujo estado quântico satisfaz $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$. Tomando o limite quando $\Delta p \rightarrow \infty$, temos a função de onda da partícula para a qual $\Delta x = 0$

$$\psi(p) \propto e^{\frac{-i\langle \hat{x} \rangle}{\hbar} p}. \quad (2.32)$$

Assim, a função de onda que representa uma partícula exatamente localizada na posição $x = \langle \hat{x} \rangle$ é uma onda plana com vetor de onda dado por $k = p/\hbar$. Como já adiantamos, tal função não representa um estado físico possível, pois não pertence ao espaço de Hilbert, uma vez que ela não é quadrado-integrável, entretanto ela pode ser usada como base do espaço de Hilbert sem consequências devido ao que já foi discutido na seção precedente.

2.6 A equação de Schroedinger

Em 1926, Erwin Schroedinger propôs uma equação que descreve a evolução temporal do vetor de estado $|\psi(t_0)\rangle$, que representa o estado de um sistema quântico em um instante t_0 . Essa equação desempenha na mecânica quântica um papel similar ao da segunda lei de Newton na mecânica clássica. Mediante a equação de Schroedinger, conhecendo $|\psi(t)\rangle$ em todo t é possível fazermos previsões sobre os valores de uma grandeza física mensurável em um instante qualquer, dentro do contexto da mecânica quântica, ou seja, em termos de probabilidades, como já foi discutido nas seções antecedentes. Tal equação, que prevê uma descrição quantitativa da taxa de variação de $|\psi(t)\rangle$ em relação a t , é expressa por

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle. \quad (2.33)$$

Escrevendo o hamiltoniano explicitamente

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(t) \right] |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle. \quad (2.34)$$

Projetando sobre os autovetores do operador de posição, em três dimensões teremos

$$\langle \vec{x} | \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(t) \right] |\psi(t)\rangle = \langle \vec{x} | i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle. \quad (2.35)$$

Portanto, a equação de Schroedinger na representação dos autovetores do operador de posição, é dada por

$$\left[\frac{-\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} + V(\vec{x}, t) \right] \psi(\vec{x}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t). \quad (2.36)$$

Para uma dada função energia potencial $V(\vec{x}, t)$ a solução dessa equação é a função de onda $\psi(\vec{x}, t)$ que descreve a evolução temporal do sistema,

através da qual pode-se calcular os valores médios de qualquer observável em um instante qualquer. O grande sucesso da equação de Schroedinger como a equação que descreve a evolução temporal de um sistema quântico foi obtido em sua aplicação ao caso do átomo de hidrogênio. Ali foi possível determinar os níveis de energia quantizados do sistema, bem como os valores do momento angular do elétron e as transições possíveis para um elétron entre os níveis de energia quantizados.

Agora, vamos mostrar que assim como no eletromagnetismo, onde existe uma lei de conservação da carga elétrica através de uma equação que relaciona a densidade superficial de corrente \vec{J} e da densidade volumétrica de carga ρ , aqui existe uma lei de conservação similar onde a quantidade conservada é a probabilidade. Tomemos

$$\psi^*(\vec{x}, t) \left\{ \left[\frac{-\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} + V(\vec{x}, t) \right] \psi(\vec{x}, t) = i\hbar \frac{d}{dt} \psi(\vec{x}, t) \right\}. \quad (2.37)$$

Do mesmo modo, tomemos da equação de Schroedinger conjugada

$$\psi(\vec{x}, t) \left\{ \left[\frac{-\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} + V(\vec{x}, t) \right] \psi^*(\vec{x}, t) = -i\hbar \frac{d}{dt} \psi^*(\vec{x}, t) \right\}. \quad (2.38)$$

Subtraindo essas duas equações, temos

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\psi^*(\vec{x}, t) \vec{\nabla}^2 \psi(\vec{x}, t) + \psi(\vec{x}, t) \vec{\nabla}^2 \psi^*(\vec{x}, t) \right] = \\ & i\hbar \left[\psi^*(\vec{x}, t) \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) + \psi(\vec{x}, t) \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\vec{x}, t) \right]. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Que pode ser colocada na forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \cdot \left[\psi^*(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{x}, t) - \psi(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \psi^*(\vec{x}, t) \right] =$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [\psi^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t)]. \quad (2.40)$$

ou

$$\vec{\nabla} \cdot \frac{\hbar}{2mi} \left[\psi^*(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{x}, t) - \psi(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \psi^*(\vec{x}, t) \right] +$$

$$\frac{\partial}{\partial t} [\psi^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t)] = 0. \quad (2.41)$$

Assim

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J} + \frac{\partial}{\partial t} \rho = 0, \quad (2.42)$$

onde identificamos $\rho = \psi^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t)$ como a densidade de probabilidade e $\vec{J} = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^*(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{x}, t) - \psi(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \psi^*(\vec{x}, t)]$ como a densidade de corrente de probabilidade. Portanto, a função de onda $\psi(\vec{x}, t)$ que é solução da equação de Schoeredinger, a qual descreve a evolução temporal de um sistema quântico, possui atribuída a si uma interpretação probabilística e é consistente com uma equação de conservação. Analogamente ao eletromagnetismo, essa equação mostra que a probabilidade é conservada.

2.7 Mecânica quântica: Considerações finais

O objetivo principal deste trabalho é quantificar Δx_{min} , que surge quando a mecânica quântica é reformulada levando-se em consideração uma

incerteza mínima não nula na posição, ou seja, uma modificação do princípio da incerteza de Heisenberg. Para tal, aplicaremos essa mecânica quântica generalizada ao sistema do átomo de hidrogênio na teoria relativística. Este capítulo teve o intuito de ser o ponto de partida para a elaboração deste trabalho e portanto, de servir como uma revisão da mecânica quântica (não relativística), ou um pré-requisito, a fim de facilitar a nossa compreensão do objetivo principal. Nós apresentamos os postulados da mecânica quântica e suas implicações. Introduzimos os conceitos de espaço de Hilbert, bases, operadores lineares, observáveis, função de onda, etc. Na seção 2.3 falamos de princípio da incerteza de Heisenberg pois é um tema chave neste trabalho, visto que a existência de um Δx_{min} não nulo implica na modificação do princípio da incerteza, induzindo à elaboração de uma mecânica quântica generalizada, o que será visto no próximo capítulo. Encerramos o capítulo falando sobre a equação de Schroedinger e sua consistência com a conservação da probabilidade, o que se fez necessário, visto que a mecânica quântica relativística, que apresentaremos no capítulo 4, é construída baseada nessa mesma consistência. A mecânica quântica relativística modificada no cenário do comprimento mínimo será utilizada no capítulo 5 aplicada ao átomo de hidrogênio a fim de determinarmos o comprimento mínimo.

Capítulo 3

Comprimento mínimo na mecânica quântica

3.1 Introdução

Como se sabe, a mecânica quântica tem sua estrutura matemática fundamentada basicamente sobre a álgebra de Heisenberg, isto é, na relação de comutação entre os observáveis \hat{x} e \hat{p} . O cenário de um novo efeito quântico que se reflita em uma modificação na forma da relação de comutação afeta, por consequência, toda formulação teórica da mecânica quântica, o que poderia incluir até uma reformulação de seus conceitos.

Um dos maiores problemas na tentativa de unificar a gravidade com as outras interações fundamentais, portanto quantizá-la, num cenário da teoria quântica de campos, é que a gravidade quântica se apresenta não-renormalizável. Tem sido longamente sugerido que a teoria quântica da gravitação, por si própria, conduz a um “cut-off” efetivo no ultravioleta, isto é, a um comprimento mínimo observável. O argumento é baseado no raciocínio de que as altas energias utilizadas na tentativa de se sondar pequenas distâncias, perturbam significativamente a estrutura do espaço-tempo através de efeitos gravitacionais, sendo assim, existiria um limite máximo de localizabilidade, o que será explicado com mais detalhes no decorrer deste capítulo. É natural, embora não trivial, assumir que um comprimento mínimo deveria, teoricamente, do ponto de vista quântico, ser descrito como uma incerteza mínima não nula Δx_{min} em medidas da posição. Isso implicaria em uma relação de incerteza modificada (digamos generalizada) tal que no limite de baixas energias se tenha a relação de incerteza de Heisenberg. Ora, uma modificação na relação de incerteza implica em uma modificação na relação de comutação, o que por sua vez altera toda estrutura da mecânica quântica.

Contudo, a ideia da existência de um comprimento mínimo é anterior a qualquer tentativa de quantização da gravidade. Devido às divergências

que surgem na teoria quântica de campos, na década de 1930, W. Heisenberg concluiu que um comprimento fundamental deveria existir o qual agiria como um “cut-off” natural nas integrais divergentes [17, 38]. Heisenberg tentou, sem sucesso, introduzir um comprimento mínimo permitindo que as componentes do operador de posição não comutem. Só depois de 1947 foi que H. S. Snyder propôs uma álgebra covariante de Lorentz dos operadores de posição e momento na qual as componentes do operador de posição não comutam. Isso conduziu a um espaço-tempo não-contínuo e, deste modo, um comprimento mínimo é introduzido na teoria [16]. Em 1994, S. Majid e H Ruegg propuseram uma modificação para as relações de comutação das coordenadas do espaço-tempo que tornaram-se conhecidas como κ -Poincaré Algebra [34]. No mesmo ano A. Kempf, G. Mangano and R. B. Mann iniciaram um desenvolvimento da matemática básica da mecânica quântica em um cenário de comprimento mínimo [4]. M Bronstein foi o primeiro a perceber que a quantização da gravidade conduz a um limite para a precisão de uma medida, e conseqüentemente à existência de um comprimento mínimo [21], mas foi apenas em 1964 que C. A. Mead reconheceu a relevância do papel que a a gravidade desempenha na tentativa de sondar uma região cada vez menor do espaço-tempo [6]. A partir daí, ao longo dos anos, muitos trabalhos foram publicados sobre comprimento mínimo em diferentes contextos.

Neste capítulo nos propomos a apresentar as principais modificações que ocorrem na estrutura da mecânica quântica quando se leva em consideração o comprimento mínimo. Nosso ponto de partida será uma relação de comutação modificada que é coerente com a relação de incerteza modificada citada no parágrafo anterior, a qual conduz a uma incerteza mínima não nula na posição. Uma vez que não se pode tomar Δx tão pequeno quanto se queira, não é mais possível existir autoestados

físicos do operador de posição, visto que um autoestado deve ter $\Delta x = 0$. Contudo, ainda é possível uma representação em termos dos autoestados do operador \hat{p} . Vamos mostrar como o conceito de medida da posição de uma partícula apresentado no capítulo 2 deve ser modificado, no cenário do comprimento mínimo, em termos do que chamamos de estados de máxima localização.

3.2 A evidência teórica de um comprimento mínimo

Embora a teoria quântica de campos tenha tido sucesso ao unificar as interações fundamentais, exceto a gravitação, através do modelo padrão, o seu grande inconveniente é o fato de seus cálculos conduzirem a quantidades divergentes (infinitos) que a princípio não fornecem sentido físico ao que se deseja calcular. Na maioria dos casos, essa situação indesejável é satisfatoriamente contornada utilizando-se procedimentos de renormalização, através dos quais uma quantidade finita é extraída desses infinitos atribuindo-lhes significado físico. No entanto, tais procedimentos são criações “ad hoc” e “nossa confiança na correção de seus resultados é baseada somente em seus excelentes acordos com a experiência, não na consistência interna ou na ordenação lógica dos princípios fundamentais da teoria” [37]. Embora a renormalização forneça uma conexão bem sucedida entre os cálculos com resultados divergentes que surgem na teoria quântica de campos e os resultados experimentais, essas divergências têm sido algumas vezes interpretadas como evidências de, possivelmente, uma contradição interna da teoria, de alguma hipótese equivocada e/ou da ausência de alguma hipótese necessária para a consistência da teoria com ela própria num sentido mais geral. Por conseguinte, os bem sucedidos métodos de renormalização passaram a ser questionados durante a tentativa de se quantizar o campo gravitacional aplicando-lhe os mesmos princípios utilizados pela teoria quântica de campos às ou-

tras interações, com o intento de se construir uma teoria unificada entre mecânica quântica e relatividade geral. As divergências que surgiram na tentativa de quantização da gravitação apresentaram-se não renormalizáveis [22] e os infinitos, que antes podiam ser contornados, passaram a ser uma limitação da teoria. Esse impasse impulsionou a hipótese da existência de um comprimento mínimo que serviria de “cut-off”, agindo como um regularizador natural da teoria, uma vez que a inclusão da interação gravitacional, ao mesmo tempo que torna as divergências mais graves, torna também mais evidente a existência desse efeito regularizador.

Como argumento simples em favor da existência de um comprimento mínimo, vamos pensar no seguinte: de acordo com o princípio de incerteza, medir a posição de uma partícula com precisão cada vez maior tem como consequência uma imprecisão proporcionalmente, cada vez maior, no seu momento linear. Ora, de acordo com a relatividade geral, momento linear é capaz de proporcionar uma curvatura no espaço-tempo. Assim, incertezas na medida do momento linear da partícula produzem, como consequência, flutuações quânticas na geometria espaço-temporal (ou, o que significa dizer o mesmo, no campo gravitacional), o que implica em uma imprecisão na trajetória da partícula. Isso significa que ao se tentar determinar a posição de uma partícula com precisão cada vez maior, é produzida uma perturbação cada vez maior no campo gravitacional, que tem como consequência um maior desconhecimento sobre a posição dessa partícula, ao contrário do que se desejava. Então, hipoteticamente, tudo se passa como se em vez da relação de incerteza $\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$ existisse uma relação de incerteza efetiva que seria da forma

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2} [1 + \beta(\Delta p)^2 + \gamma], \quad (3.1)$$

onde β e γ são positivos e independentes de Δp e Δx (mas podem, em geral, depender dos valores médios de \hat{x} e \hat{p}). O primeiro termo do segundo membro corresponde ao princípio de incerteza puramente quântico, válido a escalas de energias baixas o suficiente para que se possa negligenciar a curvatura do espaço-tempo, enquanto o restante está associado ao efeito gravitacional mencionado e torna-se relevante a medida que se têm envolvidas energias cada vez mais altas.

Esse tipo de relação de incerteza generalizada tem surgido no contexto da gravidade quântica e da teoria de cordas [24], e permite expressar a ideia, não trivial, de que um comprimento mínimo na teoria quântica deveria ser descrito como uma incerteza mínima na medida da posição, Δx_{min} . Aqui não é mais possível trabalharmos com a representação dos autoestados do operador de posição $|x\rangle$, visto que um autoestado da posição deve ter, por definição, $\Delta x = 0$, o que não é mais permitido no cenário quântico em que se considera um comprimento mínimo. Em um caso mais geral, uma relação de incerteza da forma

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2} [1 + \alpha(\Delta x)^2 + \beta(\Delta p)^2 + \gamma], \quad (3.2)$$

conduziria a uma incerteza mínima em ambos, posição Δx_{min} e momento Δp_{min} , para α positivo. Nesse caso, na ausência de ambas as representações $|x\rangle$ e $|p\rangle$, uma alternativa é trabalharmos com a representação de Bargmann-Fock [2].

3.3 O espaço de Hilbert

Neste trabalho, vamos nos ater ao caso onde há incerteza mínima não nula somente na posição, portanto estamos lidando com a situação da

equação (3.1). Na seção 2.3 foi mostrado que da positividade da norma nós podemos obter

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{|\langle [\hat{x}, \hat{p}] \rangle|}{2}. \quad (3.3)$$

É fácil verificar, com o uso da inequação acima, que a relação de incerteza (3.1) é consistente com uma relação de comutação do tipo

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar[1 + \beta\hat{p}^2]. \quad (3.4)$$

Nós construiremos uma representação no espaço de Hilbert de tal relação de comutação. Antes de tudo, devemos deixar claro que, em geral, devemos requerer que vetores que representam estados físicos sejam normalizáveis e tenham valores médios bem definidos da posição e do momento, bem como incertezas bem definidas dessas quantidades. Isso implica que estados físicos sempre pertencem ao domínio comum, onde os operadores \hat{x} , \hat{p} , \hat{x}^2 , \hat{p}^2 são simétricos. A relação de incerteza correspondente a relação de comutação (3.4) é

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}[1 + \beta(\Delta p)^2 + \beta\langle \hat{p} \rangle^2]. \quad (3.5)$$

Para obtermos o valor mínimo de Δx , tomamos a igualdade e isolamos Δx no primeiro membro, escrevendo-o explicitamente como função de Δp , ou seja, $\Delta x = \Delta x(\Delta p)$, em seguida derivamos com relação a Δp para obtermos Δx_{min} em termos de $\langle \hat{p} \rangle$, assim temos

$$\Delta x_{min}(\langle \hat{p} \rangle) = \hbar\sqrt{\beta}\sqrt{1 + \beta\langle \hat{p} \rangle^2}. \quad (3.6)$$

Desse modo, a incerteza absolutamente menor possível na posição é

$$\Delta x_{min} = \hbar\sqrt{\beta}. \quad (3.7)$$

Para a relação de incerteza (3.5) não há nenhuma incerteza mínima em Δp . De fato Δp pode assumir qualquer valor de zero a infinito.

Como foi visto no capítulo anterior, em mecânica quântica ordinária¹ \hat{x} e \hat{p} são representados como operadores de multiplicação ou diferenciação que atuam em funções de onda quadrado-integráveis da posição $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$ e do momento $\psi(p) = \langle p|\psi\rangle$, onde $|x\rangle$ e $|p\rangle$ são “auto-estados” da posição e do momento, respectivamente. Vimos que $|x\rangle$, o qual representa uma partícula exatamente localizada no ponto x (e, portanto, tem incerteza $\Delta x = 0$) e $|p\rangle$, o qual representa uma partícula cujo momento linear é exatamente igual a p (analogamente $\Delta p = 0$), não são estados físicos, propriamente ditos, pois eles não são normalizáveis e portanto não pertencem ao espaço de Hilbert. Contudo, vimos que esses autoestados podem ser aproximados com precisão arbitrária por seqüências de estados físicos de localização arbitrariamente decrescente na posição e no momento. Aqui, no cenário do comprimento mínimo, isso não é mais possível para os autoestados do operador de posição \hat{x} , visto que vetores $|\psi\rangle$ que representam estados físicos devem ser tais que

$$\Delta x_{|\psi\rangle} = \sqrt{\langle\psi|(\hat{x} - \langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle)^2|\psi\rangle} \geq \Delta x_{min}. \quad (3.8)$$

Uma vez que não existem mais autoestados da posição $|x\rangle$ na representação da álgebra de Heisenberg, não será mais possível, em termos da álgebra de Heisenberg, encontrarmos uma representação em $|x\rangle$ para um vetor de estado $|\psi\rangle$ resultando na função de onda $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$, a qual descreve a amplitude de probabilidade de uma partícula no estado quântico $|\psi\rangle$ estar exatamente localizada no ponto x . Então, como recuperar alguma informação sobre a localização de uma partícula nesse cenário em que se considera um comprimento mínimo? A resposta dessa

¹É como vamos nos referir à mecânica quântica onde efeitos de um comprimento mínimo não são considerados.

pergunta será dada neste capítulo. Uma teoria quântica não pode deixar de dar alguma informação, que faça sentido, sobre a localização de uma partícula que se pretende estudar.

Na ausência da representação $|x\rangle$, a solução mais óbvia para construção do espaço de Hilbert nesse novo contexto é utilizarmos a representação $|p\rangle$. Assim, de fato, a álgebra de Heisenberg pode ser representada através da função de onda no espaço dos momentos $\psi(p) = \langle p|\psi\rangle$. É fácil ver que no espaço dos momentos os operadores \hat{p} e \hat{x} podem ser representados da seguinte maneira

$$\hat{p}\psi(p) = p\psi(p) \quad (3.9)$$

e

$$\hat{x}\psi(p) = i\hbar(1 + \beta p^2)\frac{\partial}{\partial p}\psi(p). \quad (3.10)$$

Isso pode ser verificado observando-se que essa representação satisfaz perfeitamente a relação de comutação (3.4).

Os operadores \hat{p} e \hat{x} são simétricos, portanto

$$(\langle\psi|\hat{p}|\phi\rangle) = \langle\psi|(\hat{p}|\phi\rangle) \quad (3.11)$$

e

$$(\langle\psi|\hat{x}|\phi\rangle) = \langle\psi|(\hat{x}|\phi\rangle). \quad (3.12)$$

Mas agora, o produto escalar se torna

$$\langle\psi|\phi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{1 + \beta p^2} \psi^*(p)\phi(p). \quad (3.13)$$

A simetria de \hat{p} é óbvia. A simetria de \hat{x} pode ser verificada realizando-se uma integração por partes

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{1 + \beta p^2} \psi^*(p) i\hbar(1 + \beta p^2) \frac{\partial}{\partial p} \phi(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{1 + \beta p^2} \left[i\hbar(1 + \beta p^2) \frac{\partial}{\partial p} \psi(p) \right]^* \phi(p). \quad (3.14)$$

Portanto, o fator $(1 + \beta p^2)$ do integrando no espaço dos momentos é necessário para cancelar o fator correspondente do operador \hat{x} .

O operador identidade pode ser expandido como

$$\mathbb{I} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{1 + \beta p^2} |p\rangle \langle p| \quad (3.15)$$

e o produto escalar de auto estados do momento consequentemente é

$$\langle p|p'\rangle = (1 + \beta p^2) \delta(p - p'). \quad (3.16)$$

Nada disso exclui a existência de autovetores formais, vamos assim dizer, do operador de posição. De fato, existem diagonalizações desse operador. Contudo, os autovetores obtidos ao se diagonalizar o operador de posição não representam estados físicos, visto que eles possuem, como veremos, valor médio infinito na energia.

No espaço dos momentos, a equação de autovalor para o operador de posição toma a forma

$$i\hbar(1 + \beta p^2) \frac{\partial}{\partial p} \psi_\lambda(p) = \lambda \psi_\lambda(p) \quad (3.17)$$

que pode ser resolvida para obtermos os auto vetores formais da posição normalizados

$$\psi_\lambda(p) = \left(\frac{\sqrt{\beta}}{\pi}\right)^{1/2} \exp\left(-i\frac{\lambda}{\hbar\sqrt{\beta}}\text{arctg}(\sqrt{\beta}p)\right). \quad (3.18)$$

Uma análise estrutural mais detalhada da forma funcional do operador de posição e de seus autovetores formais foi realizada em [5]. Ela mostra que esse operador de posição não é mais essencialmente auto-adjunto, mas apenas simétrico. Em vez disso, existe uma família de parâmetros de extensões auto-adjuntas do operador de posição. Assim, nós podemos construir uma família de parâmetros de diagonalizações de \hat{x} . Para isso, vamos calcular o produto escalar dos auto-vetores formais da posição $|\psi_\lambda\rangle$

$$\begin{aligned} \langle\psi_{\lambda'}|\psi_\lambda\rangle &= \frac{\sqrt{\beta}}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{1+\beta p^2} \exp\left(-i\frac{(\lambda-\lambda')}{\hbar\sqrt{\beta}}\text{arctg}(\sqrt{\beta}p)\right) = \\ &= \frac{2\hbar\sqrt{\beta}}{\pi(\lambda-\lambda')} \text{sen}\frac{(\lambda-\lambda')\pi}{2\hbar\sqrt{\beta}}. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Os autovetores formais da posição em geral não são ortogonais. Todavia, de (3.19) nós podemos ver que existe uma família de diagonalizações de \hat{x} . O conjunto de autovetores parametrizados por $\lambda \in [-1, 1[$,

$$\{|\psi_{(2n+\lambda)\hbar\sqrt{\beta}}\rangle/n \in \mathbb{Z}\}, \quad (3.20)$$

consiste de auto vetores mutuamente ortogonais, visto que

$$\langle\psi_{(2n+\lambda)\hbar\sqrt{\beta}}|\psi_{(2n'+\lambda)\hbar\sqrt{\beta}}\rangle = \delta_{nn'}. \quad (3.21)$$

Então, existe diagonalização para o operador de posição. Assim, poderíamos ser levados a pensar que estamos descrevendo estados físicos

com seus autovetores formais, o que não é verdade. Os autovetores formais da posição não representam estados físicos, eles não estão no domínio de \hat{p} , que fisicamente significa que eles têm incerteza infinita no momento e, em particular, energia infinita

$$\langle \psi_\lambda | \frac{\hat{p}^2}{2m} | \psi_\lambda \rangle = \textit{divergente}. \quad (3.22)$$

De uma maneira geral, nós podemos concluir que vetores $|\psi\rangle$ que têm incerteza bem definida na posição $\Delta x_{|\psi\rangle}$ e são tais que

$$0 \leq \Delta x_{|\psi\rangle} < \Delta x_{\text{min}}, \quad (3.23)$$

não possuem energia finita, portanto não descrevem estados físicos. Assim, diferente da mecânica quântica ordinária, os autovetores formais de \hat{x} , com incerteza pertencente a região citada, não podem mais ser aproximados por uma sequência de estados físicos, de energia finita, onde a incerteza na posição decresceria a zero. Em vez disso, existe um limite máximo para a localizabilidade.

3.4 Recuperando a informação sobre a posição

Na seção 2.5 apresentamos uma descrição sobre o processo de medida na mecânica quântica ordinária que estava intimamente ligado ao fato de \hat{x} ser um observável. Uma vez que no cenário do comprimento mínimo não é mais possível existir autoestados do operador \hat{x} que representem estados físicos, os autoestados de \hat{x} não mais formam uma base do espaço de Hilbert e assim, \hat{x} deixa de ser um observável. Sendo assim, como pode ser dada alguma informação sobre a localização espacial de um sistema físico quando se considera o comprimento mínimo? Antes, $\langle x | \psi \rangle$ descrevia a amplitude de probabilidade de uma partícula no estado quântico

$|\psi\rangle$ estar exatamente localizada no ponto x . Agora, sem os auto vetores de \hat{x} , como podemos calcular a probabilidade de se encontrar uma partícula em uma determinada região espacial? Essas perguntas serão respondidas nesta seção.

A informação sobre a posição ainda é acessível, mas para isso, é necessário introduzirmos o conceito de *estados de máxima localização*. Um estado de máxima localização $|\psi_\xi^{ml}\rangle$, é um estado físico para o qual

$$\langle \psi_\xi^{ml} | \hat{x} | \psi_\xi^{ml} \rangle = \xi \quad (3.24)$$

e

$$(\Delta x)_{|\psi_\xi^{ml}\rangle} = \Delta x_{min}. \quad (3.25)$$

Portanto, um estado de máxima localização representa uma partícula localizada ao redor de um ponto $x = \xi$ com incerteza mínima possível Δx_{min} na sua localização, ou seja, maximamente localizada. Para calcularmos esses estados maximamente localizados, devemos nos lembrar que como foi mostrado na seção 2.5, um vetor de estado $|\psi\rangle$ só poderá pertencer ao limite da região fisicamente permitida (isto é, satisfazer $\Delta x \Delta p = \frac{|\langle [\hat{x}, \hat{p}] \rangle|}{2}$) se ele satisfaz

$$\left[\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle + \frac{\langle [\hat{x}, \hat{p}] \rangle}{2\langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle} (\hat{p} - \langle \hat{p} \rangle) \right] |\psi\rangle = 0. \quad (3.26)$$

No espaço dos momentos, utilizando a relação de comutação generalizada (3.4), isso toma a forma da equação diferencial

$$\left\{ i\hbar(1 + \beta p^2) \frac{\partial}{\partial p} - \langle \hat{x} \rangle + i\hbar \left[\frac{1 + \beta(\Delta p)^2 + \beta \langle \hat{p} \rangle^2}{2(\Delta p)^2} \right] (p - \langle \hat{p} \rangle) \right\} \psi(p) = 0, \quad (3.27)$$

a qual pode ser resolvida para obtermos

$$\psi_{\xi}^{ml}(p) = N(1 + \beta p^2)^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-i \frac{\langle \hat{x} \rangle \arctg(\sqrt{\beta} p)}{\hbar \sqrt{\beta}}\right). \quad (3.28)$$

Vale lembrar que foi usado o fato de que a incerteza menor possível $\Delta x = \Delta x_{min}$ ocorre, de acordo com (3.6), para $\langle \hat{p} \rangle = 0$. Esses estados podem ser normalizados para obtermos a função de onda no espaço dos momentos dos estados que são maximamente localizadas (isto é, $(\Delta x)_{|\psi_{\xi}^{ml}\rangle} = \Delta x_{min}$) ao redor de um ponto ξ (portanto, $\langle \psi_{\xi}^{ml} | \hat{x} | \psi_{\xi}^{ml} \rangle = \xi$) que é dada por

$$\psi_{\xi}^{ml}(p) = \left(\frac{2\sqrt{\beta}}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} (1 + \beta p^2)^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-i \frac{\xi \arctg(\sqrt{\beta} p)}{\hbar \sqrt{\beta}}\right). \quad (3.29)$$

Os estados de máxima localização $|\psi_{\xi}^{ml}\rangle$ são os que mais se aproximam, quando se considera o comprimento mínimo, dos autoestados $|\xi\rangle$ do operador \hat{x} na mecânica quântica ordinária. No capítulo 2, nós definimos $|\xi\rangle$ através de uma sequência $|\xi^{\Delta x}\rangle$ cujo limite se aproxima do seu valor mínimo, $\Delta x = 0$. Aqui $|\psi_{\xi}^{ml}\rangle$ também pode ser visto dessa maneira, mas agora com o valor mínimo de Δx sendo igual a Δx_{min} . A função de onda no espaço dos momentos de um estado maximamente localizado $\psi_{\xi}^{ml}(p)$ é uma espécie de onda plana generalizada. É fácil verificar que quando $\beta \rightarrow 0$ ela se torna a onda plana apresentada na seção 2.5.

Podemos verificar também que os estados de máxima localização os quais possuem energia finita são estados físicos propriamente ditos

$$\langle \psi_{\xi}^{ml} | \frac{\hat{p}^2}{2m} | \psi_{\xi}^{ml} \rangle = \frac{2\sqrt{\beta}}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{(1 + \beta p^2)^2} \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m\beta}. \quad (3.30)$$

Através do produto interno, podemos ver também que esses estados, em geral, não são mutuamente ortogonais

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\xi'}^{ml} | \psi_{\xi}^{ml} \rangle &= \frac{2\sqrt{\beta}}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{(1 + \beta p^2)^2} \exp\left(-i \frac{(\xi - \xi')}{\hbar\sqrt{\beta}} \arctg(\sqrt{\beta}p)\right) = \\ &= \frac{1}{\pi} \left[\frac{(\xi - \xi')}{2\hbar\sqrt{\beta}} - \left(\frac{(\xi - \xi')}{2\hbar\sqrt{\beta}} \right)^3 \right]^{-1} \operatorname{sen} \left(\frac{(\xi - \xi')\pi}{2\hbar\sqrt{\beta}} \right). \end{aligned} \quad (3.31)$$

Agora mostraremos que o conceito de estado de máxima localização é de suma importância na descrição da localização espacial de um sistema físico, dentro desse contexto do comprimento mínimo, onde não mais é possível tal descrição através dos autovetores do operador de posição, como na mecânica quântica ordinária. Se uma partícula é especificada por um estado físico arbitrário $|\psi\rangle$, podemos projetá-lo sobre um estado de máxima localização $|\psi_{\xi}^{ml}\rangle$ para obtermos

$$\psi(\xi) = \langle \psi_{\xi}^{ml} | \psi \rangle \quad (3.32)$$

A interpretação física de $\psi(\xi)$, que chamaremos de *função de onda de quase posição*, é a de que ela representa a amplitude de probabilidade de encontrarmos a partícula maximamente localizada ao redor do ponto ξ , com incerteza Δx_{min} .

Mas, e quando a situação se trata de um processo de medição, do ponto de vista da mecânica quântica, ao se considerar o comprimento mínimo? Nesse caso, quando é realizada uma medida da posição de uma partícula, com a máxima resolução possível, a perturbação fundamental faz com que o sistema colapse para o respectivo estado de máxima localização $|\psi_{\xi}^{ml}\rangle$, cujo projetor associado é

$$P_{\xi}^{ml} = |\psi_{\xi}^{ml}\rangle \langle \psi_{\xi}^{ml}| \quad (3.33)$$

Dizemos que o resultado da medida é ξ , ou seja, que a partícula encontra-se localizada em uma região espacial centrada em ξ com largura Δx_{min} . A rigor, não poderíamos dizer que esse processo é uma medida, pois não apresentamos um observável a ela associado. Mas num sentido menos formal podemos considerá-lo como tal, visto que ele fornece uma informação sobre a localização espacial do sistema.

No formalismo quântico onde se considera o comprimento mínimo o operador \hat{x} deixa de ser um observável, então, poderia ser perguntado se os cálculos dos valores médios associados a esse operador seriam afetados ou modificados. Isso de fato não acontece, pois elementos de matriz são independentes da base

$$\langle \hat{x} \rangle = \langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle, \quad (3.34)$$

e

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle \psi | (\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle)^2 | \psi \rangle. \quad (3.35)$$

Portanto, não depende de \hat{x} ser um observável ou não. Em outras palavras não depende dos autovetores de \hat{x} formarem uma base do espaço de Hilbert ou não. A única coisa que muda é o fato de que antes $\langle \hat{x} \rangle$ era interpretado como a média dos valores obtidos numa série de medidas da posição e $\langle (\Delta x)^2 \rangle$ o desvio padrão dessas medidas. Agora, $\langle \hat{x} \rangle$ deve ser interpretado como o ponto do espaço em torno do qual se concentra a função de onda do sistema e $\langle (\Delta x)^2 \rangle$, como uma medida do quanto essa função de onda está espalhada em torno desse ponto [15].

A transformação de uma função de onda na representação dos momentos em sua correspondente função de onda de quase posição é dada por

$$\psi(\xi) = \left(\frac{2\sqrt{\beta}}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{(1 + \beta p^2)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(i\frac{\xi \operatorname{arctg}(\sqrt{\beta}p)}{\hbar\sqrt{\beta}}\right) \psi(p). \quad (3.36)$$

A função de onda de quase posição de um autoestado do momento $\psi_{p'}(p) = \delta(p - p')$ de energia $E = \frac{p'^2}{2m}$ ainda é uma onda plana, porém, para o seu comprimento de onda nós agora temos

$$\lambda(E) = \frac{2\pi\hbar\sqrt{\beta}}{\operatorname{arctg}\sqrt{2m\beta E}}. \quad (3.37)$$

Isso mostra que a existência de um comprimento mínimo, isto é, de um limite para a precisão com que posições podem ser resolvidas, induz à existência de um comprimento de onda mínimo não nulo

$$\lambda_{min} = 4\hbar\sqrt{\beta}. \quad (3.38)$$

A transformação anterior que mapeia uma função de onda no espaço dos momentos $\psi(p)$ em sua função de onda de quase posição $\psi(\xi)$ é a generalização da transformação de Fourier da mecânica quântica ordinária. Através da sua inversibilidade podemos obter

$$\psi(p) = \frac{1}{\sqrt{8\pi\sqrt{\beta}\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi (1 + \beta p^2)^{\frac{1}{2}} \exp\left[-i\xi \frac{\operatorname{arctg}\sqrt{\beta}p}{\hbar\sqrt{\beta}}\right] \psi(\xi). \quad (3.39)$$

É possível ainda uma representação da álgebra de Heisenberg em termos da função de onda de quase posição. Da equação (3.39), podemos mostrar que a atuação do operador de momento é representada como

$$\langle \psi_{\xi}^{ml} | \hat{p} | \psi \rangle = \hat{p}\psi(\xi) = \frac{\operatorname{tg}\left(-i\hbar\sqrt{\beta}\frac{\partial}{\partial\xi}\right)}{\sqrt{\beta}} \psi(\xi) \quad (3.40)$$

sobre a função de onda de quase posição. A atuação do operador de posição é

$$\langle \psi_{\xi}^{ml} | \hat{x} | \psi \rangle = \hat{x} \psi(\xi) = \left[\xi + \beta \frac{\text{tg} \left(-i\hbar\sqrt{\beta} \frac{\partial}{\partial \xi} \right)}{\sqrt{\beta}} \right] \psi(\xi). \quad (3.41)$$

Essa representação é extremamente útil, pois permite trabalharmos com a função de onda de quase-posição (que tem uma interpretação física associada à localização da partícula) em vez da função de onda no espaço dos momentos. Ela será utilizada no capítulo 5, quando abordarmos a teoria quântica relativística de uma partícula simples (caso do sistema do átomo de hidrogênio) em um cenário de comprimento mínimo.

3.5 Comprimento mínimo na mecânica quântica: Considerações finais

Neste capítulo passamos à elaboração da mecânica quântica (não relativística) no cenário de um comprimento observável mínimo para as partículas. Depois de discutirmos sobre sua origem e admitirmos esse efeito como existente, assumimos a ideia de que um comprimento mínimo na mecânica quântica pode ser descrito como uma incerteza mínima não nula, Δx_{min} , em medidas da posição. Para que se tenha uma incerteza mínima não nula na posição é necessário uma modificação do princípio da incerteza de Heisenberg para uma forma generalizada, o que induz a uma modificação na forma da relação de comutação $[\hat{x}, \hat{p}]$, que por sua vez, altera a estrutura da mecânica quântica, matematicamente e até conceitualmente. Vimos que uma das consequências imediatas da existência de um comprimento mínimo é que \hat{x} deixa de ser um observável, visto que seus autovetores $|x\rangle$ agora não pertencem ao espaço de Hilbert. Encerramos o capítulo concluindo que o conceito de estado

de máxima localização, $|\psi_{\xi}^{ml}\rangle$, é necessário para reobtermos alguma informação sobre a localização de uma partícula.

Os estados de máxima localização serão utilizados no capítulo 5, que é o principal deste trabalho, a fim de modificarmos a mecânica quântica relativística (o hamiltoniano de Dirac) introduzindo-a no cenário do comprimento mínimo. Ali, calcularemos o estado fundamental do átomo de hidrogênio na teoria de Dirac sob esse novo panorama, com o intuito de cumprirmos nosso objetivo, ou seja, estimarmos um valor máximo para Δx_{min} .

Capítulo 4

Mecânica quântica relativística

4.1 Introdução

Embora a mecânica quântica elaborada por Schroedinger em 1925 tenha obtido sucesso na descrição de fenômenos quânticos, especialmente o átomo de hidrogênio, ela apresentava algumas limitações. Os níveis de energia obtidos através da equação de Schroedinger não previam a estrutura fina do átomo de hidrogênio, o que já havia sido medido experimentalmente. Uma vez que atribuiu-se o spin do elétron a efeitos relativísticos do seu movimento, houve a necessidade da construção de uma teoria quântica mais geral, no sentido de englobar também efeitos relativísticos, portanto, uma teoria quântica relativística.

Este é o último capítulo que antecede o desenvolvimento principal deste trabalho. Uma vez que nosso objetivo é estimarmos o valor do comprimento mínimo, Δx_{min} , através do cálculo da energia do estado fundamental do átomo de hidrogênio na teoria de Dirac modificada, faz-se necessário uma revisão da mecânica quântica relativística antes de a introduzirmos nesse contexto da teoria do comprimento mínimo. Vamos mostrar que a primeira ideia de quantização relativística, que seria quantizar a equação de Einstein $E^2 = (pc)^2 + (mc^2)^2$ e aplicar-lhe a interpretação probabilística, falhou na questão da interpretação da função de onda como densidade de probabilidade. Isso levou à construção de outra teoria, a equação de Dirac, cuja função de onda satisfaz os princípios quânticos associados à probabilidade e ainda previu a existência de antipartículas. Com a aplicação da teoria de Dirac ao sistema do átomo de hidrogênio foi possível prever corretamente a estrutura fina para os níveis de energia do elétron, além disso, a teoria de Dirac acomodava naturalmente o termo referente a interação do spin do elétron com um campo magnético externo.

4.2 A equação de Klein-Gordon

Como vimos no capítulo 2, o processo de quantização de um sistema (naquele caso, não relativístico), que é descrito como a sua energia total sendo a soma das energias potencial e cinética, consiste basicamente em promover as variáveis dinâmicas a operadores, que passam a atuar em um vetor de estado do espaço de Hilbert (função de onda), o qual detém todas as informações sobre o estado quântico do sistema e possui, atribuída a si, uma interpretação probabilística. Agora, vamos construir uma teoria quântica de uma partícula simples relativística, livre de interações. O processo de quantização de um sistema relativístico baseia-se nos mesmos princípios, porém, a equação da energia, é claro, deve ser a equação que descreve um sistema relativístico, ou seja, a equação de Einstein $E^2 = (pc)^2 + (mc^2)^2$, ou equivalentemente

$$\frac{E^2}{c^2} - p^2 = m^2c^2 \quad (4.1)$$

Substituindo E e p por seus operadores associados e atuando sobre o vetor de estado $|\phi(t)\rangle$, temos

$$\left(\frac{\hat{H}^2}{c^2} - p^2 \right) |\phi(t)\rangle = m^2c^2 |\phi(t)\rangle. \quad (4.2)$$

Na representação x essa equação se torna

$$\left(-\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \hbar^2 \vec{\nabla}^2 \right) \phi(\vec{x}, t) = m^2c^2 \phi(\vec{x}, t), \quad (4.3)$$

que pode ser escrita como

$$\left(\partial_\mu \partial^\mu + \frac{m^2c^2}{\hbar^2} \right) \phi(\vec{x}, t) = 0, \quad (4.4)$$

onde definimos $x^\mu = (ct, x, y, z)$ e $x_\mu = (ct, -x, -y, -z)$,

$$x^\mu x_\mu = x_\mu x^\mu = (ct)^2 - x^2 - y^2 - z^2, \quad (4.5)$$

também $\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu}$ e $\partial^\mu = \frac{\partial}{\partial x_\mu}$,

$$\partial_\mu \partial^\mu = \partial^\mu \partial_\mu = \frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (4.6)$$

A equação (4.3) é conhecida como a equação de Klein-Gordon¹ e seria, então, a equação quântica em uma teoria relativística, que desempenha um papel semelhante ao da equação de Schroedinger na teoria não relativística. Aqui $\phi(\vec{x}, t)$ deve ser a função de onda que descreve a partícula relativística, a qual caracteriza o sistema.

Ora, se a equação de Klein-Gordon é a equação de uma teoria quântica que descreve um sistema relativístico composto de uma partícula livre de interação, então, em analogia com a equação de Schroedinger, deve existir associada a ela, uma densidade de probabilidade e uma corrente de probabilidade, descritas por uma equação de continuidade e, é claro, essas entidades devem estar relacionadas à interpretação probabilística para que a teoria possua sentido físico. Não é difícil verificar, através de uma pequena álgebra, que existe uma equação de continuidade para essa teoria, veja que da equação (4.3) podemos obter

$$\left(\vec{\nabla}^2 - \frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2} \right) \phi = \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \phi. \quad (4.7)$$

Multiplicando por ϕ^* pela esquerda

$$\phi^* \left(\vec{\nabla}^2 - \frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2} \right) \phi = \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \phi^* \phi. \quad (4.8)$$

¹É comum usar ϕ como função de onda na equação de Klein-Gordon e ψ na equação de Dirac, que será vista na seção seguinte.

Tomando o conjugado da equação (4.7)

$$\left(\vec{\nabla}^2 - \frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2}\right) \phi^* = \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \phi^*. \quad (4.9)$$

Multiplicando por ϕ pela esquerda

$$\phi \left(\vec{\nabla}^2 - \frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2}\right) \phi^* = \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \phi \phi^*. \quad (4.10)$$

Realizando a subtração de (4.8) por (4.10)

$$\phi^* \vec{\nabla}^2 \phi - \phi^* \frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2} \phi = 0. \quad (4.11)$$

Que pode ser escrita como

$$\vec{\nabla} \cdot \left(\phi^* \vec{\nabla} \phi - \phi \vec{\nabla} \phi^*\right) + \frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{c^2} \left(\phi^* \frac{\partial}{\partial t} \phi - \phi \frac{\partial}{\partial t} \phi^*\right) = 0, \quad (4.12)$$

ou

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J} + \frac{\partial}{\partial t} \rho = 0, \quad (4.13)$$

onde identificamos

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2mi} \left(\phi^* \vec{\nabla} \phi - \phi \vec{\nabla} \phi^*\right)$$

e

$$\rho = \frac{\hbar}{2mic^2} \left(\phi^* \frac{\partial}{\partial t} \phi - \phi \frac{\partial}{\partial t} \phi^*\right).$$

Essas seriam a corrente de probabilidade e a densidade de probabilidade, relacionadas pela equação de continuidade às quais se aplicariam

a interpretação probabilística, analogamente ao que se tem na mecânica quântica não relativística.

Há algumas inconsistências na descrição de uma teoria quântica relativística construída da maneira como descrevemos nos parágrafos anteriores que nós apresentaremos agora. Primeiro, note que a densidade de probabilidade não é positiva definida, logo não é possível interpretarmos a equação de Klein-Gordon como a equação de movimento de uma partícula simples relativística, com $\phi(\vec{x}, t)$ sendo a função de onda dessa partícula. Observe também que quando $\phi(\vec{x}, t)$ é real temos $\rho = 0$ e $\vec{J} = 0$.

Ainda um outro ponto importante deve ser notado. A equação $E^2 = (pc)^2 + (mc^2)^2$ nos diz que ocorrem estados de energia positiva e negativa. Para o caso da partícula livre, poderíamos desprezar as soluções de energia negativa, visto que a energia da partícula permanece constante. Entretanto, se a partícula interage, os estados de energia negativa não podem ser desprezados e a partícula pode perder energia indefinidamente, isto é, não há um limite inferior na energia. Não há um estado fundamental. Matematicamente, não podemos desprezar os estados de energia negativa, pois os $\phi(\vec{x}, t)$ correspondentes são necessários para que se tenha a completeza do espaço vetorial, isto é, para que possamos expandir um estado qualquer, que representa a partícula, em termos de uma base formada pela solução da equação de Klein-Gordon, o que é necessário no cálculo de valores médios. Portanto, por essas razões, a interpretação da equação de Klein-Gordon como a equação que descreve quanticamente um sistema composto de uma partícula simples relativística, livre de interação, deve ser abandonada. Há outra interpretação para essa equação, na teoria quântica de campos, onde ela representa a equação de um campo quântico formado por partículas de spin zero, mas uma

discussão dessa abordagem fugiria dos nossos propósitos. Para o leitor interessado indicamos as referências [18] e [29].

4.3 A equação de Dirac

Na tentativa de contornar os problemas encontrados ao utilizarmos a equação de Klein-Gordon para descrevermos quanticamente o sistema de uma partícula relativística, Paul A. M. Dirac teve a ideia de escrever a equação de Klein-Gordon na forma fatorada como veremos. Podemos escrever a relação de Einstein, equação (4.1), na forma

$$p^\mu p_\mu - m^2 c^2 = 0, \quad (4.14)$$

onde $p^\mu = (E/c, p_x, p_y, p_z)$ e $p_\mu = (E/c, -p_x, -p_y, -p_z)$. Fatorando termos

$$(\beta^\nu p_\nu + mc) (\gamma^\lambda p_\lambda - mc) = 0 \quad (4.15)$$

Devemos determinar os 8 coeficientes β^ν e γ^λ ($\nu, \lambda = 1, 2, 3, 4$) que satisfazem a equação acima. Então

$$p^\mu p_\mu - m^2 c^2 = \beta^\nu \gamma^\lambda p_\nu p_\lambda + \gamma^\lambda p_\lambda mc - \beta^\nu p_\nu mc - m^2 c^2. \quad (4.16)$$

Como os índices são mudos, podemos escrever na forma

$$p^\mu p_\mu - m^2 c^2 = \beta^\nu \gamma^\lambda p_\nu p_\lambda + (\gamma^\nu - \beta^\nu) p_\nu mc - m^2 c^2. \quad (4.17)$$

Não há termos de primeira ordem em p no primeiro membro, isso significa que devemos ter $\gamma^\nu = \beta^\nu$. Então, temos 4 coeficientes a se determinar. Reescrevemos

$$p^\mu p_\mu - m^2 c^2 = \gamma^\nu \gamma^\lambda p_\nu p_\lambda - m^2 c^2. \quad (4.18)$$

Expandindo os dois membros e comparando termo a termo, verifica-se que

$$(\gamma^0)^2 = 1, (\gamma^i)^2 = -1, \text{ com } i = 1, 2, 3 \text{ e } \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 0, \mu \neq \nu.$$

Isso pode ser sintetizado na forma

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}, \quad (4.19)$$

onde $g^{\mu\nu} = 0$ se $\mu \neq \nu$ e $g^{00} = -g^{ii} = 1$ para $i = 1, 2, 3$. Logo, os γ não podem ser números, mas sim elementos que em geral não comutam, ou seja, matrizes. As matrizes de mais baixa ordem que satisfazem (4.19) são

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & \mathbb{O} \\ \mathbb{O} & -\mathbb{I} \end{pmatrix}, \gamma^i = \begin{pmatrix} \mathbb{O} & \sigma^i \\ -\sigma^i & \mathbb{O} \end{pmatrix}. \quad (4.20)$$

Os σ^i são as matrizes de Pauli

$$\sigma^1 = \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma^2 = \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \text{ e } \sigma^3 = \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

e \mathbb{I} e \mathbb{O} são a matriz 2x2 identidade e a matriz 2x2 nula. Assim

$$(\gamma^\nu p_\nu + mc)(\gamma^\mu p_\mu - mc) = 0. \quad (4.21)$$

Realizando o procedimento de quantização $p_\mu \rightarrow \hat{p}_\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu}$ e atuando sobre a função de onda $\psi(\vec{r}, t)$ temos

$$\left(i\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - \frac{mc}{\hbar}\right)\psi(x^\mu) = 0. \quad (4.22)$$

Essa equação é conhecida como a equação de Dirac e seria a equação candidata a contornar os problemas surgidos na teoria da equação de Klein-Gordon. Note que como existem quatro equações devido a γ^μ , então $\psi(x^\mu)$ deve possuir quatro componentes.

A fim de resolver a equação de Dirac, vamos considerar soluções do tipo ondas planas

$$\psi(x^\mu) = Au(k_\mu)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}x^\mu k_\mu\right). \quad (4.23)$$

Substituindo em (4.22)

$$(\gamma^\mu k_\mu - mc)u(k_\mu) = 0. \quad (4.24)$$

Teremos, ao substituir as matrizes γ

$$\begin{pmatrix} (k_0 - mc)\mathbb{I} & -\vec{k}\cdot\vec{\sigma} \\ \vec{k}\cdot\vec{\sigma} & -(k_0 + mc)\mathbb{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_A \\ u_B \end{pmatrix} = \mathbb{O}. \quad (4.25)$$

onde u_A e u_B são matrizes 2x1 que compõem $u(k_\mu)$. Essa última equação possui solução não trivial se

$$u_A = \frac{\vec{k}\cdot\vec{\sigma}}{k_0 - mc}u_B \quad (4.26)$$

e

$$u_B = \frac{\vec{k}\cdot\vec{\sigma}}{k_0 + mc}u_A. \quad (4.27)$$

Substituindo u_B em u_A temos

$$(k_0^2 - \vec{k}^2 - m^2 c^2)u_A = 0. \quad (4.28)$$

Substituindo u_A em u_B

$$(k_0^2 - \vec{k}^2 - m^2 c^2)u_B = 0. \quad (4.29)$$

Aqui foi usada a seguinte propriedade das matrizes de Pauli

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{A})(\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) = \vec{A} \cdot \vec{B} \mathbb{I} + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{A} \times \vec{B}), \quad (4.30)$$

para quaisquer vetores \vec{A} e \vec{B} . Portanto, para que tenhamos uma solução que não seja a trivial, devemos necessariamente ter

$$(k_0^2 - \vec{k}^2 - m^2 c^2) = 0 \quad (4.31)$$

e u_A e u_B quaisquer. Comparando com a relação de Einstein $E^2 - (pc)^2 - (mc^2)^2 = 0$, identificamos $k_0 = \frac{E}{c}$ e $\vec{k} = \vec{p}$.

Na solução mais geral possível para $\psi(x^\mu)$ teremos uma combinação linear das quatro possíveis soluções da equação de Dirac, combinando os quatro possíveis estados para as matrizes u ,

$$u_A = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow u_B = \frac{c\vec{p} \cdot \vec{\sigma}}{E_+ + mc^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.32)$$

e

$$u_A = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow u_B = \frac{c\vec{p} \cdot \vec{\sigma}}{E_+ + mc^2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (4.33)$$

Onde E deve ser tomado positivo para que u não divirja em $\vec{p} = 0$, portanto $E = E_+ = +\sqrt{(\vec{p}c)^2 + (mc^2)^2}$. Ainda

$$u_B = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow u_A = \frac{c\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E_- - mc^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.34)$$

e

$$u_B = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow u_A = \frac{c\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E_- - mc^2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (4.35)$$

Onde E deve ser tomado negativo para que u não divirja em $\vec{p} = 0$, portanto $E = E_- = -\sqrt{(\vec{p}c)^2 + (mc^2)^2}$.

Temos que u_A representa partículas de energia positiva e u_B representa partículas de energia negativa (antipartículas). Existem duas soluções para cada um deles referente aos dois possíveis estados de spin. Explicitando $\vec{p}\cdot\vec{\sigma}$ temos

$$\begin{aligned} u^{(1)} &= N_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ cp_z/E_+ + mc^2 \\ cp_+/E_+ + mc^2 \end{pmatrix} \\ u^{(2)} &= N_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ cp_-/E_+ + mc^2 \\ -cp_z/E_+ + mc^2 \end{pmatrix} \\ u^{(3)} &= N_3 \begin{pmatrix} cp_z/E_- - mc^2 \\ cp_+/E_- - mc^2 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ u^{(4)} &= N_4 \begin{pmatrix} cp_-/E_- - mc^2 \\ -cp_z/E_- - mc^2 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

onde $p_{\pm} = p_x \pm ip_y$ e N_1, N_2, N_3 e N_4 são constantes de normalização. Desse modo, a solução mais geral possível para a equação de Dirac, tendo em vista (4.23), é uma combinação linear de todos esses estados

$$\psi(\vec{r}, t) = c_1 e^{-\frac{i}{\hbar}(E_+ t - \vec{p} \cdot \vec{r})} u^{(1)} + c_2 e^{-\frac{i}{\hbar}(E_+ t - \vec{p} \cdot \vec{r})} u^{(2)} +$$

$$c_3 e^{-\frac{i}{\hbar}(E_- t - \vec{p} \cdot \vec{r})} u^{(3)} + c_4 e^{-\frac{i}{\hbar}(E_- t - \vec{p} \cdot \vec{r})} u^{(4)}.$$

Note que embora a ideia original fosse a de uma teoria de uma partícula simples, necessariamente ψ é uma combinação de estados de uma partícula de energia positiva e outra de energia negativa. Outro aspecto importante é que é possível mostrar que ψ se transforma como um 4-spinor sob transformações do grupo de Lorentz.

A equação de Dirac teve seu grande triunfo, como veremos na seção seguinte, na aplicação ao átomo de hidrogênio. Por meio dela foi possível fazer correções de ordem relativística (estrutura fina) aos níveis de energia previstos na teoria de Schroedinger (que é não relativística), além disso, ela previa corretamente o termo de interação do spin do elétron com um campo magnético externo, o que era feito “add-hoc” na teoria não relativística.

Mas e quanto a conservação da probabilidade e a interpretação dos estados de energia negativa? Responder essa pergunta é o que nós nos dedicamos agora. Observe que multiplicando a equação de Dirac (4.22) pelo spinor adjunto $\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0$ pela esquerda temos

$$i\bar{\psi}\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} \psi - \frac{mc}{\hbar} \bar{\psi}\psi = 0. \quad (4.36)$$

Tomando o conjugado da equação de Dirac (4.22) e multiplicando por γ^0 pela direita

$$-i\partial_0(\psi^\dagger\gamma^0\gamma^0) + i\partial_i(\psi^\dagger\gamma^i\gamma^0) - m\psi^\dagger\gamma^0 = 0, \quad (4.37)$$

onde foi usado $(\gamma^i)^\dagger = -\gamma^i$. Como $\gamma^i\gamma^0 = -\gamma^0\gamma^i$ podemos obter

$$-i \left[\frac{\partial}{\partial x^\mu} (\bar{\psi}\gamma^\mu) \right] \psi - \frac{mc}{\hbar} \bar{\psi}\psi = 0. \quad (4.38)$$

A subtração de (4.36) por (4.38) fornece

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} (\bar{\psi}\gamma^\mu\psi) = 0. \quad (4.39)$$

Assim, essa é a equação de continuidade no caso relativístico segundo a teoria de Dirac, onde identificamos $J^\mu = (\bar{\psi}\gamma^\mu\psi)$ como a quadridensidade de corrente de probabilidade. A densidade de probabilidade ρ é igual a

$$c\rho = J^0 = (\bar{\psi}\gamma^0)\psi = (\psi^\dagger\gamma^0\gamma^0\psi) = (\psi^\dagger\psi) = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + |\psi_3|^2 + |\psi_4|^2,$$

onde

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}.$$

Isso é uma quantidade sempre maior ou igual a zero, portanto, diferentemente daquela encontrada a partir da equação de Klein-Gordon, ela é positiva definida.

A questão da ocorrência dos estados de energia negativa foi vista por Dirac da seguinte forma: os elétrons tem spin 1/2, portanto, obedecem ao princípio da exclusão de Pauli. Dirac supôs que os estados de

energia negativa já estavam completamente preenchidos e o princípio da exclusão proíbe que mais elétrons entrem nesse “mar de Dirac” de estados de energia negativa. O vácuo, então, não é vazio, mas sim um mar infinito composto de todas as partículas de energia negativa e spin 1/2, que são observadas, por exemplo, na criação de um par elétron-pósitron. Assim, a teoria de Dirac fez a predição da existência de antipartículas: pósitron, antineutrino, antipróton... todas posteriormente detectadas.

4.4 O átomo de hidrogênio na teoria de Dirac

Como já mencionamos na seção anterior, um dos pontos onde a teoria de Dirac foi bem sucedida, foi na aplicação ao caso do átomo de hidrogênio, onde foi possível realizar correções de ordem relativística (estrutura fina) para os níveis de energia previstos pela teoria de Schroedinger. O átomo de hidrogênio é um sistema simples, onde temos um núcleo central, composto de uma única partícula, o próton, e um elétron que se move em torno do núcleo. Partindo da equação de Dirac (4.22) vamos determinar o hamiltoniano de Dirac para uma partícula livre

$$\left(i\hbar\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - mc \right) \psi(x^\mu) = 0. \quad (4.40)$$

$$\left(i\hbar\gamma^0 \frac{\partial}{\partial x^0} + i\hbar\gamma^i \frac{\partial}{\partial x^i} - mc \right) \psi(x^\mu) = 0. \quad (4.41)$$

$$\gamma^0 i\hbar \frac{\partial}{\partial x^0} \psi(x^\mu) = \left(-\gamma^i i\hbar \frac{\partial}{\partial x^i} + mc \right) \psi(x^\mu). \quad (4.42)$$

Multiplicando por γ^0 pela esquerda

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial x^0} \psi(x^\mu) = \left(-\gamma^0 \gamma^i i\hbar \frac{\partial}{\partial x^i} + \gamma^0 mc \right) \psi(x^\mu). \quad (4.43)$$

Definindo $\hat{\beta} = \gamma^0$ e $\alpha^i = \gamma^0 \gamma^i$ temos

$$\hat{H}\psi = \left(c\vec{\alpha} \cdot \hat{\vec{p}} + \hat{\beta}mc^2 \right) \psi. \quad (4.44)$$

Em um campo central eletrostático, o hamiltoniano de Dirac para um elétron é dado por

$$\hat{H}\psi = \left[c\vec{\alpha} \cdot \hat{\vec{p}} + \hat{\beta}mc^2 - e\phi(r) \right] \psi. \quad (4.45)$$

O operador de momento angular orbital $\hat{\vec{L}}$ e o operador de momento angular de spin $\hat{\vec{S}}$ não comutam separadamente com o hamiltoniano anterior, visto que não comutam com o hamiltoniano da partícula livre. Porém, pode ser verificado que as componentes do momento angular total $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$ comutam com \hat{H} , o que nos permite descrever uma base de autoestados comuns aos operadores \hat{H} , \hat{J}^2 e \hat{J}_z . Vamos denotar tais autoestados por

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}. \quad (4.46)$$

A atuação de \hat{H} sobre ψ fornece a equação de autovalores

$$\hat{H}\psi = E\psi. \quad (4.47)$$

Decompondo essa equação nas componentes φ_1 e φ_2 obtemos

$$(E - mc^2 + e\phi)\varphi_1 + c(\vec{\sigma} \cdot \hat{\vec{p}})\varphi_2 = 0 \quad (4.48)$$

e

$$(E + mc^2 + e\phi)\varphi_2 + c(\vec{\sigma} \cdot \hat{\vec{p}})\varphi_1 = 0. \quad (4.49)$$

A questão agora é como descrever a atuação do operador $\vec{\sigma} \cdot \hat{\vec{p}}$ sobre φ_1 e φ_2 . Utilizando a propriedade $(\vec{\sigma} \cdot \vec{A})(\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) = \vec{A} \cdot \vec{B} \mathbb{I} + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{A} \times \vec{B})$ das matrizes de Pauli, podemos escrever

$$\vec{\sigma} \cdot \hat{\vec{p}} = \frac{1}{r^2} (\vec{\sigma} \cdot \vec{r}) (\vec{\sigma} \cdot \vec{r}) (\vec{\sigma} \cdot \hat{\vec{p}}) = \vec{\sigma} \cdot \mathbf{e}_r \left(\mathbf{e}_r \cdot \hat{\vec{p}} + i \frac{\vec{\sigma} \cdot \hat{\vec{L}}}{r} \right), \quad (4.50)$$

onde \mathbf{e}_r é o vetor unitário na direção \vec{r} e $\mathbf{e}_r \cdot \hat{\vec{p}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r}$. Escrevendo o operador de momento angular total como $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma}$, onde

$$\vec{\Sigma} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix}$$

,

então

$$\hat{J}^2 = \hat{L}^2 + \hbar \hat{\vec{L}} \cdot \vec{\Sigma} + \frac{3}{4} \hbar^2 \mathbb{I}. \quad (4.51)$$

De acordo com a teoria geral do momento angular, os dois spinores bi-componentes devem satisfazer

$$\left(\hat{L}_z + \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_z \right) \varphi_{1,2} = (m\hbar) \varphi_{1,2} \quad (4.52)$$

e

$$\left(\hat{L}^2 + \hbar \hat{\vec{L}} \cdot \vec{\sigma} + \frac{3}{4} \hbar^2 \right) \varphi_{1,2} = j(j+1) \hbar^2 \varphi_{1,2}. \quad (4.53)$$

Para um dado valor de j os spinores φ_1 e φ_2 são proporcionais a $\mathcal{Y}_{j \mp \frac{1}{2}}^{jm}$ e considerações sobre o operador de paridade, além do fato de o potencial

coulombiano ser esfericamente simétrico, nos dizem que as soluções ψ devem ter a forma

$$\psi = \begin{pmatrix} F(r)\mathcal{Y}_{j-\frac{1}{2}}^{jm} \\ -if(r)\mathcal{Y}_{j+\frac{1}{2}}^{jm} \end{pmatrix} \quad (4.54)$$

e

$$\psi = \begin{pmatrix} G(r)\mathcal{Y}_{j+\frac{1}{2}}^{jm} \\ -ig(r)\mathcal{Y}_{j-\frac{1}{2}}^{jm} \end{pmatrix}. \quad (4.55)$$

Os spinores bi-componentes \mathcal{Y} são normalizados segundo $\int \mathcal{Y}^\dagger \mathcal{Y} d\Omega = 1$ e possuem a seguinte propriedade

$$(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{e}_r)\mathcal{Y}_{j\mp\frac{1}{2}}^{jm} = -\mathcal{Y}_{j\pm\frac{1}{2}}^{jm}. \quad (4.56)$$

Utilizando (4.53) e (4.56), e sabendo que o spin do elétron é $s = \frac{1}{2}\hbar$, podemos obter

$$(\vec{\sigma} \cdot \hat{L})\mathcal{Y}_{j-\frac{1}{2}}^{jm} = \left(j - \frac{1}{2}\right) \hbar \mathcal{Y}_{j-\frac{1}{2}}^{jm} \quad (4.57)$$

e

$$(\vec{\sigma} \cdot \hat{L})\mathcal{Y}_{j+\frac{1}{2}}^{jm} = -\left(j + \frac{3}{2}\right) \hbar \mathcal{Y}_{j+\frac{1}{2}}^{jm}. \quad (4.58)$$

Levando em conta (4.57) e (4.58), substituímos (4.50), (4.54) e (4.55) em (4.48) e (4.49) para obter o conjunto de quatro equações

$$\begin{cases} (E - mc^2 + e\phi)F - \hbar c \left(\frac{d}{dr} + \frac{j+3/2}{r}\right) f = 0, \\ (E + mc^2 + e\phi)f + \hbar c \left(\frac{d}{dr} - \frac{j-1/2}{r}\right) F = 0, \end{cases} \quad (4.59)$$

$$\begin{cases} (E - mc^2 + e\phi)G - \hbar c \left(\frac{d}{dr} - \frac{j-1/2}{r} \right) g = 0, \\ (E + mc^2 + e\phi)g + \hbar c \left(\frac{d}{dr} + \frac{j+3/2}{r} \right) G = 0. \end{cases} \quad (4.60)$$

Substituindo explicitamente o potencial Coulombiano² produzido por um núcleo pontual de carga Ze (Z é o número de prótons), $\phi = \frac{Ze}{r}$, onde para o átomo de hidrogênio $Z = 1$ e definindo as quantidades

$$\lambda = j + \frac{1}{2}, \quad \varepsilon = \frac{E}{mc^2}, \quad \chi = \frac{mcr}{\hbar}, \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c}, \quad (4.61)$$

as quatro equações anteriores se tornam

$$\begin{cases} \left(\varepsilon - 1 + \frac{\alpha}{\chi} \right) F - \left(\frac{d}{dr} + \frac{\lambda+1}{\chi} \right) f = 0 \\ \left(\varepsilon + 1 + \frac{\alpha}{\chi} \right) f + \left(\frac{d}{dr} - \frac{\lambda-1}{\chi} \right) F = 0 \end{cases} \quad (4.62)$$

$$\begin{cases} \left(\varepsilon - 1 + \frac{\alpha}{\chi} \right) G - \left(\frac{d}{dr} - \frac{\lambda-1}{\chi} \right) g = 0 \\ \left(\varepsilon + 1 + \frac{\alpha}{\chi} \right) g + \left(\frac{d}{dr} + \frac{\lambda+1}{\chi} \right) G = 0 \end{cases} \quad (4.63)$$

Visto que esses dois conjuntos de equações se transformam um em outro através da troca $G \rightarrow F$, $g \rightarrow f$, $\lambda \rightarrow -\lambda$, é suficiente resolver as duas primeiras e assim podemos obter a solução das duas últimas equações. Analisando o comportamento assintótico dessas equações para $\chi \rightarrow \infty$, podemos observar que a solução assintótica é dada por

$$F \cong f \cong e^{\pm\sqrt{1-\varepsilon^2}\chi}. \quad (4.64)$$

Sabendo que o átomo de hidrogênio possui seus estados de energia ligados devido ao potencial coulombiano produzido pelo núcleo, devemos fisicamente requerer que assintoticamente

²O fator $1/4\pi\epsilon_0$ foi omitido a princípio, mas será retomado no final das contas.

$$F \cong f \cong e^{-\sqrt{1-\varepsilon^2}\chi}, \quad |\varepsilon| \leq 1. \quad (4.65)$$

Então, utilizando o método de Frobenius propomos as seguintes soluções para as equações

$$F = e^{-\sqrt{1-\varepsilon^2}\chi} \chi^\gamma \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \chi^\nu \quad (4.66)$$

e

$$f = e^{-\sqrt{1-\varepsilon^2}\chi} \chi^\gamma \sum_{\rho=0}^{\infty} b_\rho \chi^\rho. \quad (4.67)$$

Substituindo-as em (4.62) obtemos, para $\nu > 0$,

$$(\varepsilon - 1)a_{\nu-1} + \alpha a_\nu + \sqrt{1 - \varepsilon^2} b_{\nu-1} - (\lambda + 1 + \gamma + \nu)b_\nu = 0, \quad (4.68)$$

$$(\varepsilon + 1)b_{\nu-1} + \alpha b_\nu - \sqrt{1 - \varepsilon^2} a_{\nu-1} + (-\lambda + 1 + \gamma + \nu)b_\nu = 0 \quad (4.69)$$

e

$$\alpha a_0 - (\lambda + 1 + \gamma)b_0 = 0, \quad (-\lambda + 1 + \gamma)a_0 + \alpha b_0 = 0. \quad (4.70)$$

Essa última possuirá solução não trivial somente se $\alpha^2 = \lambda^2 + (\gamma + 1)^2$ e como $\lambda = j + 1/2$, então $\gamma = -1 \pm \sqrt{(j + 1/2)^2 + \alpha^2}$. No entanto, para que a função de onda não seja divergente na origem, devemos ter

$$\gamma = -1 + \sqrt{(j + 1/2)^2 + \alpha^2}. \quad (4.71)$$

Ainda, para que a função de onda não seja divergente em $\chi \rightarrow \infty$, as séries correspondentes a (4.66) e (4.67) devem terminar em $x^{n'}$. Através de (4.68) e (4.69) nós obtemos para $\nu = n' + 1$ (com $a_{n'+1} = b_{n'+1} = 0$)

$$b_{n'} = \sqrt{\frac{1-\varepsilon}{1+\varepsilon}} b_{n'}. \quad (4.72)$$

Podemos eliminar simultaneamente $a_{\nu-1}$ e $b_{\nu-1}$ em (4.68) e (4.69) para obtermos

$$a_{\nu}[\alpha\sqrt{1+\varepsilon} + (\lambda-1-\gamma-\nu)\sqrt{1-\varepsilon}] = b_{\nu}[\alpha\sqrt{1-\varepsilon} + (\lambda+1+\gamma+\nu)\sqrt{1+\varepsilon}], \quad (4.73)$$

onde tomando $\nu = n'$ e comparando com (4.72) temos

$$\sqrt{\frac{1-\varepsilon}{1+\varepsilon}} = \frac{\alpha\sqrt{1+\varepsilon} + (\lambda-1-\gamma-n')\sqrt{1-\varepsilon}}{\alpha\sqrt{1-\varepsilon} + (\lambda+1+\gamma+n')\sqrt{1+\varepsilon}} \quad (4.74)$$

ou

$$\sqrt{1-\varepsilon^2}(1+\gamma+n') = \alpha\varepsilon. \quad (4.75)$$

Substituindo γ e ε temos a famosa fórmula de estrutura fina para os níveis de energia do átomo de hidrogênio na teoria de Dirac

$$\frac{E}{mc^2} = \left[\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{\sqrt{(j+1/2)^2 - \alpha^2 + n'}}} \right]^{-1}, \quad (4.76)$$

onde $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$ e $n' = 0, 1, 2, \dots$

O número quântico principal na teoria não relativística de Schroedinger está associado a n' , por,

$$n = j + 1/2 + n'. \quad (4.77)$$

Visto que para o elétron $s = 1/2$, o estado fundamental ($j = l + s$, $l = 0$) dado por (4.76) para o átomo de hidrogênio é

$$E = mc^2 \sqrt{1 - \alpha^2}. \quad (4.78)$$

Para analisarmos essa energia, realizaremos uma expansão em série de potências de α

$$E = mc^2 \left(1 - \frac{1}{2}\alpha^2 - \frac{1}{8}\alpha^4 + \dots \right). \quad (4.79)$$

O primeiro termo nada mais é que a energia de repouso do elétron. Substituindo $\alpha = e^2/\hbar c$ vemos que o segundo é exatamente a energia do estado fundamental previsto pela teoria não relativística de Schroedinger³

$$E_{n\grave{a}o\ rel} = -\frac{me^4}{2\hbar^2(4\pi\epsilon_0)^2}. \quad (4.80)$$

Já o terceiro termo e os demais são a correção relativística, que chamamos de correção de estrutura fina. Assim, a teoria relativística de Dirac prevê com precisão os níveis de energia do átomo de hidrogênio incluindo correções de estrutura fina, o que não foi possível com a teoria não relativística.

³Recolocar o termo $1/4\pi\epsilon_0$ omitido no potencial é o mesmo que realizar a troca $e^2 \rightarrow e^2/4\pi\epsilon_0$.

4.5 Mecânica quântica relativística: Considerações finais

Neste capítulo mostramos que as limitações da equação de Schroedinger levaram à elaboração de uma teoria quântica relativística, inicialmente com a equação de Klein-Gordon, que não foi bem sucedida por apresentar inconsistências, e posteriormente com a equação de Dirac, que previu a correção de estrutura fina nos níveis de energia do elétron. A teoria quântica relativística elaborada por Dirac, que foi aplicada ao átomo de hidrogênio, servirá como base para o desenvolvimento principal deste trabalho, que será apresentado no capítulo seguinte. Utilizaremos o hamiltoniano de Dirac para calcularmos o estado fundamental do átomo de hidrogênio, porém, modificado por considerarmos a existência de um comprimento mínimo na teoria, com o intuito de estimarmos esse comprimento mínimo.

Capítulo 5

Comprimento mínimo na teoria relativística do átomo H

5.1 Introdução

Este é o capítulo principal deste trabalho, onde será realizado o nosso objetivo de estimarmos um valor limite superior para o comprimento mínimo Δx_{min} . Os capítulos anteriores serviram como base para a compreensão do que apresentaremos agora. Vimos no capítulo 2 uma revisão da mecânica quântica com uma atenção especial para o princípio da incerteza, pois a existência de um comprimento mínimo sugere uma modificação do mesmo. No capítulo 3, passamos a expor as consequências imediatas da existência de um comprimento mínimo e de como isso modifica a estrutura da mecânica quântica. Uma vez que conhecemos a maneira como o comprimento mínimo altera a estrutura algébrica da mecânica quântica, nós apresentamos, no capítulo 4, a teoria relativística do átomo de hidrogênio, que é onde pretendemos aplicar essa mecânica quântica modificada para estimarmos o valor do comprimento mínimo. Ao substituírmos os operadores de posição e momento no hamiltoniano do átomo de hidrogênio pelos operadores modificados, obteremos esse hamiltoniano algebricamente modificado pela presença do comprimento mínimo. Visto que os novos operadores são dados em termos de Δx_{min} por meio de β , o novo hamiltoniano também o será. Sendo assim, ao calcularmos o estado fundamental do sistema através desse hamiltoniano, obteremos um resultado em termos de Δx_{min} (e de outras constantes físicas, evidentemente). Tal resultado poderá ser comparado com o que se conhece experimentalmente e poderemos assim, obter um valor limite superior para Δx_{min} . Esperamos que a estrutura fina do átomo de hidrogênio na presença de um comprimento mínimo forneça uma restrição que seja um valor máximo para o comprimento mínimo.

5.2 A álgebra covariante de Quesne-Tkachuk

Vimos no capítulo 3 que em mecânica quântica, a existência de um comprimento mínimo pode ser descrita como uma incerteza mínima não nula Δx_{min} na medida da posição, que conduz a um princípio da incerteza de Heisenberg generalizado. Baseado em resultados obtidos da teoria de cordas [11], Kempf [4] propôs uma relação de incerteza generalizada em uma dimensão, que implica em uma incerteza mínima não nula na posição, da forma¹

$$\Delta P \Delta X \geq \frac{\hbar}{2} [1 + \beta(\Delta P)^2 + \beta \langle \hat{P} \rangle^2]. \quad (5.1)$$

onde β está relacionado ao comprimento mínimo. Essa relação de incerteza generalizada corresponde a uma relação de comutação modificada entre os operadores de posição e momento da forma

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar[1 + \beta\hat{P}^2]. \quad (5.2)$$

Assim, um comprimento mínimo pode ser introduzido na teoria quântica modificando sua estrutura algébrica [24, 25]. Além disso, podemos notar que o operador de momento \hat{P} agora não coincide com o gerador das translações espaciais $-i\hbar\hat{T}$ [3].

A questão agora é que no átomo de hidrogênio, que é o sistema no qual pretendemos aplicar essa teoria quântica modificada considerando-se um comprimento mínimo, o elétron se move sob a ação de um potencial de Coulomb que é tridimensional, não unidimensional. Desse modo, a álgebra desenvolvida no capítulo 3, para ser aplicável, precisa ser generalizada para mais de uma dimensão espacial. Com mais de uma dimensão

¹Utilizaremos letras maiúsculas \hat{X} e \hat{P} para representarmos operadores (e variáveis associadas) modificados pelo comprimento mínimo que serão expressos em termos dos operadores da mecânica quântica ordinária \hat{x} e \hat{p} que representaremos por letras minúsculas.

espacial, a forma geral da relação de comutação que depende apenas de ordem quadrática do momento e ainda respeita a simetria rotacional pode ser escrita como [20].

$$\left[\hat{X}_i, \hat{P}_j \right] = i\hbar \left[A(\hat{P}^2) \delta_{ij} + B(\hat{P}^2) \hat{P}_i \hat{P}_j \right], \quad (5.3)$$

onde $\hat{P}^2 = \sum_i \hat{P}_i^2$.

Várias escolhas das funções $A(\hat{P}^2)$ e $B(\hat{P}^2)$ tem sido consideradas na literatura. Kempf [1] considerou as funções $A(\hat{P}^2)$ e $B(\hat{P}^2)$ tal que a relação de comutação fica dada por

$$\left[\hat{X}_i, \hat{P}_j \right] = i\hbar \left[\left(1 + \beta \hat{P}^2 \right) \delta_{ij} + \beta' \hat{P}_i \hat{P}_j \right], \quad (5.4)$$

onde β' é outro parâmetro associado ao comprimento mínimo. Assumindo que cada um das componentes do momento comutam uma com a outra

$$\left[\hat{P}_i, \hat{P}_j \right] = 0, \quad (5.5)$$

então a relação de comutação entre as componentes do operador de posição são determinadas pela identidade de Jacobi como se segue

$$\left[\hat{X}_i, \hat{X}_j \right] = -i\hbar \left[2\beta - \beta' + \left(2\beta + \beta' \right) \beta \hat{P}^2 \right] \epsilon_{ijk} \hat{L}_k, \quad (5.6)$$

onde

$$\hat{L}_i = \frac{1}{\left(1 + \beta \hat{P}^2 \right)} \epsilon_{ijk} \hat{X}_j \hat{P}_k \quad (5.7)$$

são as componentes do operador de momento angular orbital, que satisfazem a relação de comutação usual

$$\left[\hat{L}_i, \hat{X}_j \right] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{X}_k \quad (5.8)$$

e

$$\left[\hat{L}_i, \hat{P}_j \right] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{P}_k. \quad (5.9)$$

Procedendo da mesma maneira como fizemos na seção 3.3, podemos verificar que essa álgebra dá origem a uma incerteza mínima (isotrópica) não nula nas coordenadas da posição

$$\Delta X_{min}^i = \hbar \sqrt{3\beta + \beta'}. \quad (5.10)$$

Entretanto, a álgebra de Kempf não é covariante de Lorentz e C. Quesne e V. M. Tkachuk [9, 10] propuseram uma generalização da álgebra de Kempf que é covariante

$$\left[\hat{X}^\mu, \hat{P}^\nu \right] = -i\hbar \left[\left(1 - \beta \hat{P}_\rho \hat{P}^\rho \right) g^{\mu\nu} - \beta' \hat{P}^\mu \hat{P}^\nu \right], \quad (5.11)$$

$$\left[\hat{X}^\mu, \hat{X}^\nu \right] = i\hbar \frac{\left[(2\beta - \beta') - (2\beta + \beta') \beta \hat{P}_\rho \hat{P}^\rho \right]}{\left(1 + \beta \hat{P}_\rho \hat{P}^\rho \right)} \left(\hat{P}^\mu \hat{X}^\nu - \hat{P}^\nu \hat{X}^\mu \right), \quad (5.12)$$

$$\left[\hat{P}^\mu, \hat{P}^\nu \right] = 0, \quad (5.13)$$

que inclui a álgebra de Snyder [16] como um caso particular onde $\beta = 0$. Também é válido notar que a álgebra de Kempf não pode ser obtida tomando-se o limite não relativístico da álgebra proposta por Quesne e Tkachuk.

Observando as equações (5.6) e (5.12) vemos que no caso particular $\beta' = 2\beta$ as componentes do operador de posição comutam em primeira ordem do parâmetro de comprimento mínimo em ambas as álgebras de Kempf e Quesne-Tkachuk.

Um grande desafio tem sido a busca por restrições experimentais para obter um limite superior para o valor de comprimento mínimo. Tais restrições experimentais são particularmente relevantes para modelos de altas dimensões que possuem uma escala efetiva de Planck muito menor do que um valor em 4-dim [26, 35, 32]. Correções para o espectro de energia do átomo de hidrogênio, devido à presença de um comprimento mínimo foram calculadas por muitos autores [14, 28, 30, 19, 12, 23]. A precisão da medição experimental referente a frequência da radiação emitida durante a transição 1S-2S foi usada pela primeira vez por Brau em [14], para estimar um valor máximo para o comprimento mínimo da ordem de $10^{-17}m$. Brau encontrou que a contribuição devida à presença de um comprimento mínimo é de $\mathcal{O}(\alpha^4)$, onde α é a constante de estrutura fina. Uma vez que a contribuição resultante da presença de um comprimento mínimo para a transição de energia 1S-2S é um número tão pequeno, seria interessante estudar os seus efeitos sobre a estrutura fina. Isso significa que teremos que encontrar os autovalores da energia do hamiltoniano de Dirac para o átomo de hidrogênio.

5.3 O átomo de hidrogênio em um cenário de comprimento mínimo

Nesta seção vamos introduzir o átomo de hidrogênio em um cenário de comprimento mínimo. Para isso utilizamos a álgebra deformada de Quesne-Tkachuk, que é covariante de Lorentz, com o intuito de modifi-

carros o hamiltoniano de Dirac com potencial central, generalizando-o para a situação em que se considera a presença de um comprimento mínimo na mecânica quântica. Consideramos o caso particular em que $\beta' = 2\beta$. Nesse caso, as equações (5.11), (5.12) e (5.13) se tornam

$$\left[\hat{X}^\mu, \hat{P}^\nu \right] = -i\hbar \left[\left(1 - \beta \hat{P}_\rho \hat{P}^\rho \right) g^{\mu\nu} - 2\beta \hat{P}^\mu \hat{P}^\nu \right], \quad (5.14)$$

$$\left[\hat{X}^\mu, \hat{X}^\nu \right] = 0, \quad (5.15)$$

$$\left[\hat{P}^\mu, \hat{P}^\nu \right] = 0. \quad (5.16)$$

Na seção 2.3 foi mostrado que a partir da positividade da norma de um vetor podemos obter

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{|\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|}{2}. \quad (5.17)$$

Utilizando essa equação e também (5.14), a relação de incerteza entre posição e momento assumindo que ΔP^i é isotrópico ($\Delta P^i = \Delta P, i = 1, 2, 3$) se torna

$$\begin{aligned} \Delta X^i \Delta P \geq \frac{\hbar}{2} \left\{ 1 - \beta \left[\langle (\hat{P}^0)^2 \rangle - 3(\Delta P)^2 - \sum_{j=1}^3 \langle \hat{P}^j \rangle^2 \right] \right\} + \\ \frac{\hbar}{2} \left\{ 2\beta \left[(\Delta P)^2 + \langle \hat{P}^i \rangle^2 \right] \right\}. \end{aligned} \quad (5.18)$$

Isolando ΔX^i e derivando com relação a ΔP podemos obter o valor absolutamente menor possível para ΔX^i

$$\Delta X_{min}^i = \hbar \sqrt{5\beta}. \quad (5.19)$$

Pode ser verificado que a seguinte representação (que nós chamamos de representação de “quase-posição” no capítulo 3) satisfaz a relação de comutação (5.14) em primeira ordem em β [33],

$$\hat{X}^\mu = \hat{x}^\mu, \quad (5.20)$$

$$\hat{P}^\mu = (1 - \beta \hat{p}^\nu \hat{p}_\nu) \hat{p}^\mu, \quad (5.21)$$

onde \hat{x}^μ e \hat{p}^μ são os operadores de posição e momento, respectivamente, na mecânica quântica relativística ordinária, portanto, satisfazem

$$[\hat{x}^i, \hat{x}^j] = 0, \quad (5.22)$$

$$[\hat{p}^i, \hat{p}^j] = 0, \quad (5.23)$$

$$[\hat{x}^i, \hat{p}^j] = -i\hbar g^{ij}. \quad (5.24)$$

Boa parte dos trabalhos encontrados na literatura utiliza uma representação no espaço dos momentos p da álgebra de Heisenberg modificada com o comprimento mínimo, isto é, uma representação dada em termos de operadores de multiplicação e diferenciação que atuam na função de onda no espaço dos momentos $\psi(p)$. Neste trabalho, os operadores \hat{X}^μ e \hat{P}^μ em (5.20) e (5.21) devem ser vistos como (e de fato são) operadores descritos no espaço de quase posição, ou seja, operadores de multiplicação e diferenciação que atuam na função de onda de quase posição, $\psi(\xi)$, apresentada no capítulo 3 e não em $\psi(x)$ como pode a princípio parecer. Portanto, a letra x em termos da qual esses operadores estão apresentados não deve ser vista como a grandeza que representa a posição de uma partícula, mas sim como ξ que é um estado maximamente localizado. Pode-se notar ainda que esses operadores coincidem,

para primeira ordem em beta, com aqueles apresentados no fim da seção 3.4 e, como já dito naquela ocasião, são introduzidos com o intuito de modificarmos a equação de Dirac rescrevendo-a no cenário do comprimento mínimo não em termos de $\psi(p)$, como fizeram muitos autores, mas sim em termos de $\psi(\xi)$, que possui uma interpretação física associada a localizabilidade de uma partícula, o que foi amplamente discutido no capítulo 3.

Conforme foi visto na seção 4.4, para o elétron em um campo central eletrostático o operador hamiltoniano de Dirac atuando em um vetor de estado $|\psi(t)\rangle$ é dado por

$$\hat{H}|\psi(t)\rangle = \left[c\vec{\alpha}\cdot\hat{\vec{p}} + \hat{\beta}mc^2 - e\phi(\hat{r}) \right] |\psi(t)\rangle. \quad (5.25)$$

Essa equação pode ser colocada na forma

$$\left[-c\gamma^0\gamma^\mu\hat{p}_\mu + \gamma^0mc^2 - e\phi(\hat{r}) \right] |\psi(t)\rangle = 0, \quad (5.26)$$

onde temos definindo $\hat{\beta} = \gamma^0$ e $\alpha^i = \gamma^0\gamma^i$.

A fim de encontrarmos a equação para o átomo de hidrogênio na teoria de Dirac no cenário do comprimento mínimo, x^μ e p^μ devem ser substituídos por \hat{X}^μ e \hat{P}^μ ,

$$\hat{x}^\mu \rightarrow \hat{X}^\mu = \hat{x}^\mu \quad (5.27)$$

e

$$\hat{p}^\mu \rightarrow \hat{P}^\mu = (1 - \beta\hat{p}^\nu\hat{p}_\nu)\hat{p}^\mu. \quad (5.28)$$

Projetando sobre os estados maximamente localizados definidos no capítulo 3, temos

$$\langle \psi_{\xi}^{ml} | \left[-c\gamma^0\gamma^{\mu}\hat{P}_{\mu} + \gamma^0mc^2 - e\phi(\hat{R}) \right] | \psi(t) \rangle = 0. \quad (5.29)$$

Devido a (5.27) o operador da energia potencial, que é função das componentes do operador de posição, não é modificado, assim

$$\left[-c\gamma^0\gamma^{\mu}(1 - \beta\hat{p}^{\nu}\hat{p}_{\nu})\hat{p}^{\mu} + \gamma^0mc^2 - e\phi(\hat{r}) \right] \psi(\vec{\xi}, t) = 0, \quad (5.30)$$

onde a atuação de \hat{p}^{μ} e \hat{r} sobre $\psi(\vec{\xi}, t)$ é dada por

$$\hat{p}_{\mu}\psi(\vec{\xi}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial\xi^{\mu}}\psi(\vec{\xi}, t)$$

e

$$\hat{r}\psi(\vec{\xi}, t) = r\psi(\vec{\xi}, t)$$

Aqui $\psi(\vec{\xi}, t)$ é o que chamamos no capítulo 3 de função de onda de “quase-posição”. A equação anterior pode ser reescrita como

$$\left[-c\hat{p}_0 - c\alpha^i\hat{p}_i + \hat{\beta}mc^2 - e\phi(r) \right] \psi(\vec{\xi}, t) + \beta \left[(\hat{p}^0)^2 - \hat{p}^i)^2 \right] \left[c\hat{p}_0 + c\alpha^i\hat{p}_i \right] \psi(\vec{\xi}, t) = 0. \quad (5.31)$$

Essa é a equação que deve ser resolvida para encontrarmos a energia do estado fundamental do átomo de hidrogênio na teoria de Dirac com comprimento mínimo. Observe que quando $\beta \rightarrow 0$ o hamiltoniano de

Dirac da mecânica relativística ordinária é reobtido, como deveria de fato acontecer.

5.4 Determinação de ΔX_{min}^i através do estado fundamental do átomo de hidrogênio

Esta seção é onde se dá o enfoque principal deste trabalho. Vamos calcular a energia do estado fundamental do átomo de hidrogênio na teoria relativística de Dirac dentro desse cenário do comprimento mínimo. Vamos ver que tal energia é função do parâmetro ΔX_{min}^i . Comparando-a com o valor medido experimentalmente, podemos obter um limite superior para ΔX_{min}^i . Isso significa que o valor de ΔX_{min}^i é menor ou igual a este limite superior.

Para resolver a equação (5.31) vamos realizar uma separação de variáveis do tipo

$$\psi(\vec{\xi}, t) = e^{-i\frac{\mathcal{E}}{\hbar}t} \psi(\vec{\xi}), \quad (5.32)$$

onde \mathcal{E} descreve a evolução temporal do estado estacionário $\psi(\vec{\xi}, t)$. Substituindo em (5.31), temos

$$\begin{aligned} & \left[-\mathcal{E} + c\vec{\alpha} \cdot \hat{\vec{p}} + \hat{\beta}mc^2 - e\phi(r) \right] \psi(\vec{\xi}) + \\ & \beta \left[\frac{\mathcal{E}^2}{c^2} - \hat{\vec{p}}^2 \right] \left[\mathcal{E} - c\vec{\alpha} \cdot \hat{\vec{p}} \right] \psi(\vec{\xi}) = 0. \end{aligned} \quad (5.33)$$

Em vez de resolvermos diretamente essa equação, o que não é uma tarefa muito simples, vamos utilizar um método aproximativo. Observe que para $\beta \rightarrow 0$, \mathcal{E} é a energia E da teoria relativística ordinária do átomo de hidrogênio. Portanto, se nós assumirmos que a escala de massa do

comprimento mínimo M_{ml} é grande o bastante tal que a massa do elétron é muito menor que ela ($\beta = \frac{c^2}{M_{ml}^2 c^4}$, então $\beta m^2 c^2 = \frac{m^2}{M_{ml}^2} \ll 1$), assim podemos considerar o segundo termo como uma perturbação. Conseqüentemente, a equação (5.33) sugere que devemos assumir

$$\mathcal{E} = E^{ml} = E + \beta m^2 c^2 E^{(1)} + \mathcal{O}(\beta^2) \quad (5.34)$$

e

$$\psi(\vec{\xi}) = \psi(\vec{x}) + \beta m^2 c^2 \psi^{(1)}(\vec{\xi}) + \mathcal{O}(\beta^2), \quad (5.35)$$

onde E é a energia do autoestado $\psi(\vec{x})$ do átomo de hidrogênio obtido da teoria de Dirac na mecânica quântica relativística ordinária².

Substituindo (5.34) e (5.35) em (5.33), nós obtemos para primeira ordem em β

$$E^{ml} = E + \beta \langle \psi | \left[c(\vec{\alpha} \cdot \hat{p})^3 - E(\vec{\alpha} \cdot \hat{p})^2 - \frac{E^2}{c}(\vec{\alpha} \cdot \hat{p}) + \frac{E^3}{c^2} \right] | \psi \rangle. \quad (5.36)$$

Com o intuito de estimar um limite superior para ΔX_{min}^i , nós calculamos a energia do estado fundamental do átomo de hidrogênio a fim de compará-la com o resultado obtido experimentalmente. Então, para o estado fundamental, temos

$$E_0^{ml} = E_0 + \beta \langle \psi_0 | \left[c(\vec{\alpha} \cdot \hat{p})^3 - E_0(\vec{\alpha} \cdot \hat{p})^2 - \frac{E_0^2}{c}(\vec{\alpha} \cdot \hat{p}) + \frac{E_0^3}{c^2} \right] | \psi_0 \rangle, \quad (5.37)$$

onde $E_0 = mc^2 \sqrt{1 - \alpha^2}$ é a energia do estado fundamental $\psi_0(\vec{x})$ do átomo de hidrogênio obtido na teoria de Dirac da mecânica quântica

²Poderíamos ter escrito $\psi(\vec{x})$ como $\psi^{(o)}(\vec{\xi})$, mas preferimos essa outra forma para frisar o fato de que essa função coincide em sua forma matemática com os autoestados da teoria de Dirac ordinária.

relativística ordinária, mostrada na seção 4.4. Depois de alguns cálculos (ver Apêndice A), encontramos

$$E_0^{ml} = mc^2\epsilon + \beta m^3 c^4 \left(\frac{1 - 2\epsilon - 2\epsilon^4 + 4\epsilon^5}{2\epsilon^2 - \epsilon} \right), \quad (5.38)$$

onde $E_0 = mc^2\epsilon$.

A fim de sabermos a real contribuição do comprimento mínimo para a energia do estado fundamental do átomo de hidrogênio, é interessante expandir E_0^{ml} em série de potências da constante de estrutura fina. Fazendo isso obtemos

$$E_0^{ml} \approx mc^2 \left(1 - \frac{\alpha^2}{2} - \frac{\alpha^4}{8} \right) + \beta m^3 c^4 \left(1 - \frac{7\alpha^2}{2} + \frac{3\alpha^4}{8} \right). \quad (5.39)$$

Como pode ser notado, a soma dos termos independentes de α na equação (5.39) é a energia de repouso do elétron, o que pode ser facilmente verificado fazendo o operador de momento igual a zero na equação (5.37). Portanto, se subtrairmos a energia de repouso do elétron,

$$\Delta E_0^{ML} = E_0^{ML} - mc^2 - \beta m^3 c^4, \quad (5.40)$$

chegamos a

$$\Delta E_0^{ML} \approx -mc^2 \left(\frac{\alpha^2}{2} + \frac{\alpha^4}{8} \right) - \beta m^3 c^4 \left(\frac{7\alpha^2}{2} - \frac{3\alpha^4}{8} \right). \quad (5.41)$$

Isso mostra que a correção da energia do estado fundamental do átomo de hidrogênio é sempre negativa e de $\mathcal{O}(\alpha^2)$, o que concorda com a referência [23].

Poderíamos esperar que no limite de pequenos valores de α nós recuperaríamos o resultado de Brau [14], mas isso não é verdade. Uma análise

cuidadosa deixa claro que efeitos relativísticos provenientes da existência de um comprimento mínimo na teoria devem ser mais significativos que os não relativísticos.

Podemos fazer uma estimativa do valor do comprimento mínimo através da comparação do nosso resultado teórico com dados experimentais. A precisão da medida da transição 1S-2S dos níveis de energia do átomo de hidrogênio é de $4,2 \times 10^{-14}$ eV (2,466,061,413,187,035(10)Hz, uma precisão de 4 partes em 10^{15}) [8]. Realmente, podemos fazer esta estimativa do valor máximo do comprimento mínimo, pois a contribuição de termos de menor ordem para a correção da energia do estado 2S que surge no cenário do comprimento mínimo deve ser de $\mathcal{O}(\alpha^2)$, pois os estados 1S e 2S tem a mesma simetria. Então, se atribuirmos esse erro inteiramente a efeitos relacionados ao comprimento mínimo e assumirmos que efeitos do comprimento mínimo ainda não podem ser observados experimentalmente nós encontramos através de (5.41)

$$\Delta X_i^{min} \leq 10^{-20} m. \quad (5.42)$$

5.5 Comprimento mínimo na teoria relativística do átomo H: Considerações finais

Neste capítulo nós estimamos o valor do comprimento mínimo através da energia do estado fundamental do átomo de hidrogênio. Para tal feito, antes de tudo, foi necessário generalizarmos, para três dimensões, a álgebra desenvolvida no capítulo 3 dos operadores de posição e momento quando se considera o comprimento mínimo na mecânica quântica, que era válida para uma dimensão apenas. Fato esse obviamente necessário, pois, no sistema do átomo de hidrogênio, o elétron se move sob a ação

de um potencial coulombiano que é tridimensional. Embora Kempf tivesse desenvolvido uma álgebra generalizada para o caso em três dimensões, ela não é covariante. Uma vez que pretendemos investigar a modificação teórica sobre a energia da estrutura fina do hidrogênio causada pela existência de um comprimento mínimo, era conveniente utilizarmos uma álgebra covariante, já que se trata de um caso relativístico. Portanto, passamos a utilizar a álgebra de Quesne-Tkachuk dos operadores de posição e momento, que é covariante. Introduzindo o sistema do átomo de hidrogênio no cenário do comprimento mínimo via modificação do seu hamiltoniano por meio dos novos operadores \hat{X} e \hat{P} nos deparamos com uma equação no fim da seção 5.3 nada simples de ser resolvida. A fim de quantificarmos ΔX_{min} utilizamos um método aproximativo na resolução daquela equação, visto que os efeitos de um comprimento mínimo nunca foram observados experimentalmente e suas modificações na energia do átomo de hidrogênio, que devem ser pequenas, poderiam ser tratadas com teoria de perturbação. Assim, comparando com dados experimentais obtivemos que $\Delta X_i^{min} \leq 10^{-20}m$.

j

Capítulo 6

Conclusão

6.1 Conclusão

O objetivo desse trabalho foi determinarmos um limite superior para o valor do comprimento mínimo, através do cálculo da energia do estado fundamental do átomo de hidrogênio na teoria de Dirac, modificada dentro desse novo contexto. Para isso, foi necessário primeiramente introduzirmos no capítulo 3 os conceitos de estados de máxima localização e representação de quaseposição. O hamiltoniano de Dirac para o átomo de hidrogênio foi introduzido no cenário do comprimento mínimo através da álgebra Lorentz-covariante de Quesne-Tkachuk. O uso da representação de quaseposição é conveniente para contornarmos o problema da substituição de \hat{X}_i no potencial coulombiano, pois na representação de quaseposição o operador modificado \hat{X}_i é igual ao \hat{x}_i , para $\mathcal{O}(\beta)$. Para resolvermos o hamiltoniano de Dirac e calcularmos o estado fundamental modificado pelo comprimento mínimo usamos um método perturbativo, em vez de resolvermos a equação exatamente, o que poderia ser demasiadamente difícil. Comparando nosso resultado com dados experimentais, foi possível estimar um limite superior para o comprimento mínimo da ordem de $10^{-20}m$. Comparando esse resultado com aquele que foi motivação do trabalho, ou seja, o resultado obtido por Brau em [14], $10^{-17}m$, por meio de uma teoria não-relativística (visto que ele usa a equação de Schroedinger), podemos notar que efeitos relativísticos provenientes da existência de um comprimento mínimo na teoria na verdade são mais significativos do que os não relativísticos.

Um ponto importante ainda deve ser comentado. A covariância da teoria deve ser questionada, pois com a existência de um comprimento mínimo as próprias transformações de Lorentz devem sofrer modificações. Outro ponto importante é que o limite não-relativístico da teoria de Dirac com comprimento mínimo pode ser comparado com o resultado de Brau a fim

de investigarmos a consistência das álgebras utilizadas na introdução do comprimento mínimo, o que fica como sugestão para um trabalho posterior. .

Capítulo 7

Apêndices

7.1 Apêndice A

Neste apêndice vamos calcular os valores médios

$$\langle \psi_0 | (\vec{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}}) | \psi_0 \rangle = \int (\phi_0^\dagger, \chi_0^\dagger) \begin{pmatrix} \mathbb{O} & \vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} \\ \vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} & \mathbb{O} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} d^3 \vec{x}, \quad (7.1)$$

$$\langle \psi_0 | (\vec{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}})^2 | \psi_0 \rangle = \int (\phi_0^\dagger, \chi_0^\dagger) \begin{pmatrix} (\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})^2 & \mathbb{O} \\ \mathbb{O} & (\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} d^3 \vec{x} \quad (7.2)$$

e

$$\langle \psi_0 | (\vec{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}})^3 | \psi_0 \rangle = \int (\phi_0^\dagger, \chi_0^\dagger) \begin{pmatrix} \mathbb{O} & (\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})^3 \\ (\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})^3 & \mathbb{O} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} d^3 \vec{x} \quad (7.3)$$

onde ϕ_0 e χ_0 são as bicomponentes dos autospinores do estado fundamental,

$$\langle \vec{x} | \psi_0 \rangle = \begin{pmatrix} \phi_0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F(r) \mathcal{Y}_{-\frac{1}{2}}^{1/2m}(\theta, \varphi) \\ -if(r) \mathcal{Y}_{+\frac{1}{2}}^{1/2m}(\theta, \varphi) \end{pmatrix} \quad (7.4)$$

e $\mathcal{Y}_{j\pm 1/2}^{j,m}(\theta, \varphi)$ são os autospinores comuns de \hat{j}_z and \hat{J}^2 [13]. Utilizando a seguinte identidade

$$\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} = \vec{\sigma} \cdot \vec{e}_r \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial r} + i \frac{\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{L}}}{r} \right), \quad (7.5)$$

com

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{e}_r \mathcal{Y}_{j\pm 1/2}^{j,m} = -\mathcal{Y}_{j\pm 1/2}^{j,m}, \quad (7.6)$$

$$(\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{L}}) \mathcal{Y}_{j-\frac{1}{2}}^{j,m} = \left(j - \frac{1}{2} \right) \hbar \mathcal{Y}_{j-\frac{1}{2}}^{j,m} \quad (7.7)$$

e

$$(\vec{\sigma} \cdot \hat{\vec{L}}) \mathcal{Y}_{j+\frac{1}{2}}^{jm} = - \left(j + \frac{3}{2} \right) \hbar \mathcal{Y}_{j+\frac{1}{2}}^{jm}, \quad (7.8)$$

depois de alguns cálculos obtemos

$$(\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \phi_0 = i\hbar \frac{dF}{dr} Y_1^{1/2,m}, \quad (7.9)$$

$$(\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \chi_0 = \left(\hbar \frac{df}{dr} + 2\hbar \frac{f}{r} \right) Y_0^{1/2,m}, \quad (7.10)$$

e

$$(\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})^2 \phi_0 = -\hbar^2 \left(\frac{d^2 F}{dr^2} + 2\frac{1}{r} \frac{dF}{dr} \right) Y_0^{1/2,m}, \quad (7.11)$$

$$(\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})^2 \chi_0 = i\hbar^2 \left(\frac{d^2 f}{dr^2} + 2\frac{1}{r} \frac{df}{dr} - 2\frac{f}{r^2} \right) Y_1^{1/2,m}, \quad (7.12)$$

e

$$(\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})^3 \phi_0 = -i\hbar^3 \left(\frac{d^3 F}{dr^3} + 2\frac{1}{r} \frac{d^2 F}{dr^2} - 2\frac{1}{r^2} \frac{dF}{dr} \right) Y_1^{1/2,m}, \quad (7.13)$$

$$(\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})^3 \chi_0 = -\hbar^3 \left(\frac{d^3 f}{dr^3} + 4\frac{1}{r} \frac{d^2 f}{dr^2} \right) Y_0^{1/2,m}. \quad (7.14)$$

Para o estado fundamental temos

$$F(r) = a_0 b r^\gamma e^{-ar}, \quad (7.15)$$

$$f(r) = b_0 b r^\gamma e^{-ar}, \quad (7.16)$$

onde

$$\gamma = \epsilon - 1, \quad (7.17)$$

$$a = \left(\frac{mc}{\hbar} \right) \sqrt{1 - \epsilon^2}, \quad (7.18)$$

$$b = \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^\gamma, \quad (7.19)$$

$$a_0 = \left(\frac{2a}{b} \right)^{\gamma+1} \sqrt{\frac{(1+\epsilon)}{\Gamma(2\gamma+3)}}, \quad (7.20)$$

$$b_0 = \sqrt{\frac{1-\epsilon}{1+\epsilon}} a_0, \quad (7.21)$$

com $E_0 = mc^2\epsilon$.

Portanto,

$$\langle \psi_0 | (\vec{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}}) | \psi_0 \rangle = \frac{mc}{\epsilon} (1 - \epsilon^2), \quad (7.22)$$

$$\langle \psi_0 | (\vec{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}})^2 | \psi_0 \rangle = m^2 c^2 \frac{(2 - \epsilon)(1 - \epsilon^2)}{\epsilon(2\epsilon - 1)}, \quad (7.23)$$

$$\langle \psi_0 | (\vec{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}})^3 | \psi_0 \rangle = m^3 c^3 \frac{(1 - \epsilon^2)^2}{\epsilon(2\epsilon - 1)}. \quad (7.24)$$

Referências bibliográficas

Referências Bibliográficas

- [1] A. Kempf, “*Non-pointlike particles in harmonic oscillators*”, J. Phys. A **30**, 2093 (1997).
- [2] A. Kempf, “*On Quantum Field Theory with Nonzero Minimal Uncertainties in Positions and Momenta*”, J. Math. Phys. **38**, 1347 (1997) [arXiv:hep-th/9602085].
- [3] A. Kempf, and G. Mangano, “*Minimal length uncertainty relation and ultraviolet regularization*”, Phys. Rev. D **55**, 7909 (1997).
- [4] A. Kempf, G. Mangano and R. B. Mann, “*Hilbert Space Representation Of The Minimal Length Uncertainty Relation*”, Phys. Rev. D **52**, 1108 (1995).
- [5] A. Kempf, “*Uncertainty relations in quantum mechanics with group symmetry*”, J. Math. Phys. **35**, 4483 (1994).
- [6] C. A. Mead, “*Possible Connection Between Gravitation and Fundamental Length*”, Phys. Rev. **135**, B849 (1964).
- [7] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu and F. Laloë, “*Quantum Mechanics*”, Wiley-VCH (1982).
- [8] C. G. Parthey et al., “*Improved Measurement of the Hydrogen 1S-2S Transition Frequency*”, Phys. Rev. Lett. **107**, 203001 (2011).

- [9] C. Quesne and V. M. Tkachuck, “*Lorentz-covariant deformed algebra with minimal length and application to the (1+1)-dimensional Dirac oscillator*”, J. Phys. A: Mat. Gen. **39**, 10909 (2006).
- [10] C. Quesne and V. M. Tkachuck, “*Lorentz-covariant deformed algebra with minimal length*”, Czech. J. Phys. **56**, 1269 (2006).
- [11] D. Amati, M. Ciafaloni and G. Veneziano, “*Can Space-Time Be Probed Below The String Size?*”, Phys. Lett. B **216**, 41 (1989).
- [12] D. Bouaziz and N. Ferkous, “*Hydrogen atom in momentum space with a minimal length*”, Phys. Rev. A **82**, 022105 (2010).
- [13] E. Merzbacher, “*Quantum Mechanics*”, 2nd Ed., John Wiley & Sons, New York (1970).
- [14] F. Brau, “*Minimal length uncertainty relation and hydrogen atom*”, J. Phys. A **32**, 7691 (1999).
- [15] G. C. Dorsch and J. A. Nogueira, “*Maximally Localized States in Quantum Mechanics with Modified Commutation Relation to All Orders*”, Int. J. Mod. Phys. A **27**, 1250113 (2012).
- [16] H. S. Snyder, “*Quantized Space-Time*”, Phys. Rev. **71**(1), 38 (1947).
- [17] H. Kragh, “*Heisenberg’s lattice world: the 1930 theory sketch*”, Am. J. Phys. **63**, 595 (1995).
- [18] Kaku, M.; “*QUANTUM FIELD THEORY A Modern introduction*”, Oxford University Press, New York, (1993).
- [19] K. Nouicer, “*Coulomb potential in one dimension with minimal length: A path integral approach*”, J. Math. Phys. **48**, 112104 (2007).
- [20] L. N. Chang, Z. Lewis, D. Minic and T. Takeuchi, “*On the Minimal Length Uncertainty Relation and the Foundations of String Theory*”, Adv. High Energy Phys. **2011**, 493514 (2011).

- [21] M. Bronstein, “*Quantum theory of weak gravitational fields*”, (republication), Gen. Rel. Grav. 44, 267 (2012).
- [22] M. H. Goroff and A. Sagnotti, “*Quantum Gravity At Two Loops*”, Phys. Lett. B **160**, 81 (1985). “*The Ultraviolet Behavior Of Einstein Gravity*”, Nucl. Phys. B **266**, 709 (1986).
- [23] M. I. Samar, “*Modified perturbation theory for hydrogen atom in space with Lorentz-covariant deformed algebra with a minimal length*”, J. Phys. Stud. **15**(1), 1007 (2011).
- [24] M. Maggiore, “*The algebraic structure of the generalized uncertainty principle*”, Phys. Lett. B **319**, 83 (1993).
- [25] M. Maggiore, “*Quantum groups, gravity, and the generalized uncertainty principle*”, Phys. Rev. D **49**(10), 5182 (1994).
- [26] N. Arkani-Hamed, S. Dimopoulos and G. Dvali, “*The hierarchy problem and new dimensions at a millimeter*”, Phys. Lett. B **429**, 263 (1998).
- [27] P. A. M. Dirac, “*The Principles of Quantum Mechanics*”, Oxford University Press, 4a. Ed. (1930).
- [28] R. Akhoury and Y. P. Yao, “*Minimal length uncertainty relation and the hydrogen spectrum*”, Phys. Lett. B **572**, 37 (2003).
- [29] Ryder, L. H.; “*Quantum Field Theory*”, Cambridge University Press, Cambridge (1985).
- [30] S. Benczik, L. N. Chang, D. Minic, and T. Takeuchi, “*Hydrogen-atom spectrum under a minimal-length hypothesis*”, Phys. Rev. A **72**, 012104 (2005).
- [31] S. Hossenfelder, “*A note on theories with a minimal length*”, Class. Quant. Grav. **23**, 1815 (2006).

- [32] S. Hossenfelder, M. Bleicher, S. Hofmann, J. Ruppert, S. Scherer and H. Stöcker, “*Signatures in Planck regime*”, Phys. Lett. B **575**, 85 (2003).
- [33] S. K. Moyedi, M. R. Setare and H. Moayeri, “*Formulation of the Spinor Field in the Presence of a Minimal Length Based on the Quesne-Tkachuk Algebra*”, Int. J. Mod. Phys. A **26**, 4981 (2011).
- [34] S. Majid and H. Ruegg, “*Bicrossproduct structure of κ -Poincaré group and noncommutative geometry*”, Phys. Lett. B **334**, 348 (1994).
- [35] T. Appelquist, H. C. Cheng and B. S. Dobrescu, “*Bounds on universal extra dimensions*”, Phys. Rev. D **64**, 035002 (2001).
- [36] T. L. Antonacci, R. O. Francisco, J. C. Fabris and J. A. Nogueira, “*Ground State of the Hydrogen Atom via Dirac Equation in a Minimal Length Scenario*”, Eur. Phys. J. C **73**, 2495 (2013).
- [37] V. B. Berestetskii, E. M. Lifshitz, L. P. Pitaevskii, “*Quantum Electrodynamics*”, Pergamon Press, 2a. Ed. (1982).
- [38] W. Heisenberg, “*Über die in der Theorie der Elementarteilchen auftretende universelle Länge*”, Annalen der Physik **424**, 20 (1938).