EXTENSÃO ESPAÇO-TEMPO-SIMÉTRICA DA MECÂNICA QUÂNTICA

INTEPRETAÇÃO E PREVISÕES DO TEMPO DE CHEGADA.

SUMÁRIO

Introdução

O problema do tempo na MQ e o tempo de chegada

Formalismos TOA

Revisão literária de modelos TOA ideais: Fluxo, Kijowski e STS

Interpretação

Interpretando o STS e suas conexões com a MQ

Soluções

Resolver para $V(x)$ e avaliar para situação de barreira

INTRODUÇÃO

O PROBLEMA DO TEMPO NA MQ E O TEMPO DE CHEGADA

CONCEITUANDO O PROBLEMA

- Tempo: variável dinâmica ou parâmetro?

- Quantidades clássicas foram incorporadas na formulação quântica
  - Princípio da correspondência: diferentes regras de quantização.
  - Método de quantização canônico (substituindo os colchetes de Poisson de um par de variáveis canonicamente conjugadas pelos colchetes de comutação dos operadores correspondentes)

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = i\hbar$$

$$\Delta\mathrm{A}\ \Delta\mathrm{B} \geq \frac{\hbar}{2}$$

CONCEITUANDO O PROBLEMA

- Relações de incerteza propostas por Heisenbeg:

$$\Delta \mathrm{X}\, \Delta P \ \geq \hbar/2$$

$$\Delta \mathrm{H}\, \Delta T \ \geq \hbar/2$$

$\Delta \mathrm{X}$ ($\Delta \mathrm{P}$) representa o desvio padrão do resultado de repetidas medições de posição (momento) em sistemas preparados identicamente.

Nesse contexto, poderia a segunda equação representar sistemas preparados identicamente com observáveis $\widehat{H}$ e $\hat{T}$?

ARGUMENTO DE PAULI

- Argumento de Pauli: Considerando a aplicação de um operador hermitiano que obedece $[\hat{H}, \hat{T}] = i\hbar$, $\exp[i\, E'T\, /\hbar]\, |E\, \rangle$, com $\mathrm{E}' \in\, \mathbb{R}$, no autoestado de energia $|E\rangle$, ele produz um novo autoestado de energia com autovalor $E\ \ - E'$.
  - Isso implica em estender o espectro de energias do hamiltoniano continuamente em $[-\infty, \infty]$.

- O problema do espectro de energias: moto-perpétuo.

- Portando, a existência de um operador temporal que fosse simultaneamente hermitiano e canonicamente conjugado ao operador de energia foi desconsiderada por muitos anos;

TEMPO DE CHEGADA

- Impasse: Teoria quântica não lida com o tempo como um observável, mas podemos medi-lo em laboratório. Como tratamos então a questão do tempo de chegada?

- Definindo o problema do tempo de chegada;
  - Prever a distribuição de probabilidade temporal para uma partícula chegar em uma posição específica pela primeira vez.

- Duas abordagens: (i) independente e (ii) dependente do dispositivo de medição (modelos operacionais):

i) TOAs independentes do aparato de medida: intrínsecas ao estado da partícula, informação contida em $\psi(x, t)$. São feitas de forma que exista um modelo da classe (ii) que recaiam em si em algum regime específico. **Exemplos**: Distribuição de probabilidade axiomática de Kijoswiski e a densidade de fluxo quântico

ii) TOAs dependentes do aparato de medida: consideram imperfeições relativas ao dispositivo de medição na sua modelagem. **Exemplos**: Potenciais complexos, relógios quânticos, integrais de caminho, e o formalismo de Page e Wooters para condições de contorno absorventes

FORMALISMOS TOA

REVISÃO LITERÁRIA DE MODELOS TOA IDEAIS: FLUXO QUÂNTICO, KIJOWSKI E STS

FLUXO QUÂNTICO (ou corrente de probabilidade)

- Qual a conexão da corrente de probabilidade com a densidade temporal de chegada?

- A probabilidade de que a partícula atravesse (chegue em) no contorno de uma região G, dita ∂G depois do tempo t – $\mathcal{P}$(depois de t) – é definida como a probabilidade da partícula estar dentro de G no instante t, $\int_G |\psi\,(\boldsymbol{x}|t)|^2\, d^3\boldsymbol{x}$.

Logo, a probabilidade da partícula chegar em ∂G durante o intervalo de tempo $\mathrm{d}t$ é:

$$\begin{aligned}\Pi_j(\mathbf{x},t)dt &= \mathcal{P}(\text{depois de } t+dt) - \mathcal{P}(\text{depois de } t)\\ &= \int_G |\psi(\mathbf{x}|t+dt)|^2 d^3\mathbf{x} - \int_G |\psi(\mathbf{x}|t)|^2 d^3\mathbf{x} \\ &= \frac{d}{dt}\left(\int_G|\psi(\mathbf{x}|t)|^2 d\mathbf{x}\right)dt = \underbrace{\left(\int_{\partial G}\mathbf{j}_\psi(\mathbf{x},t)\cdot d\mathbf{S}\right)}_{\text{Fluxo Quântico}} dt.\end{aligned}$$

→ Eq. da continuidade

FLUXO QUÂNTICO

- $\Pi_j(\boldsymbol{x}, t)$ pode admitir valores negativos, efeito este que é denominado *backflow effect.*

- Caso unidimensional $\Pi_j(x, t) = j_\psi(x, t)$.

- Considerando que a partícula é detectada em um tempo finito, a expressão deve ser normalizada. Para evitar probabilidades negativas utilizamos apenas o módulo da expressão, e definimos a distribuição temporal de chegada em x_A como

$$\Pi(x_A, t) = \frac{|\Pi_j(x_A, t)|}{\int_{-\infty}^{\infty} dt |\Pi_j(x_A, t)|}.$$

MODELO AXIOMÁTICO DE KIJOWSKI

- Kijowski: Quais as propriedades mínimas que uma distribuição de TOA deve satisfazer no caso clássico livre? Adaptar para propriedades semelhantes no regime quântico.

- A densidade de probabilidade do tempo de chegada para estados evoluídos (ψ_t) a partir de um estado inicial $\psi_0 = \psi$ é definida para partículas vindo pela esquerda como

$$\Pi_+^K(t) = \left| \int_0^\infty dP \sqrt{\frac{P}{2\pi m\hbar}} e^{-iP^2t/2m\hbar} \widetilde{\psi}(P) \right|^2 .$$

$\tilde{\psi}(P)$ → Amplitude de probabilidade da partícula ter momento P em um instante de tempo específico.

MODELO AXIOMÁTICO DE KIJOWSKI

- Kijowski admitiu que $\Pi_{+}^{K}(t)$ diz respeito apenas às partículas que incidem pela esquerda, mas que as chegadas pela direita levam, por simetria, à uma expressão análoga, $\Pi_{-}^{K}(t)$. Dessa forma, a densidade de probabilidade total da chegada no tempo t na posição $x = 0$ é dada por

$$\Pi_{\psi}^{K}(t) = \left| \int_{0}^{\infty} dP \sqrt{\frac{P}{2\pi m\hbar}} e^{-iP^2 t/2m\hbar} \widetilde{\psi}(P) \right|^2 + \left| \int_{-\infty}^{0} dP \sqrt{\frac{-P}{2\pi m\hbar}} e^{-iP^2 t/2m\hbar} \widetilde{\psi}(P) \right|^2 .$$

Não há interferência entre $P > 0$ e $P < 0$.

MODELO AXIOMÁTICO DE KIJOWSKI

- Considerando uma situação de medição confirmada, vamos impor uma normalização para essa expressão

$$\Pi_K^N(t) = \frac{\Pi_+(t) + \Pi_-(t)}{N_K},$$

Onde

$$N_K = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \sum_{\alpha \in \{+,-\}} \Pi_\alpha(t).$$

EXTENSÃO STS DA MECÂNICA QUÂNTICA

- O objetivo da extensão STS é lidar com situações experimentais complementares àquelas envolvendo distribuições condicionadas temporalmente *intrínsecas à partícula*, $|\psi(x|t)|^2$.

- Considere uma probabilidade conjunta $\mathcal{P}(x,t)dxdt$, pois queremos encontrar a partícula em uma dada região do espaço $[x, x+dx]$ e em um certo intervalo de tempo $[t, t+dt]$. A probabilidade conjunta pode ser escrita como:

$$\mathcal{P}(x,t)dxdt = \mathcal{P}(x|t)\mathcal{P}(t)dxdt = |\psi(x|t)|^2\mathcal{P}(t)dxdt$$

  - Perceba que $\mathcal{P}(x|t)$ é igual à densidade de probabilidade de encontrar a partícula na posição x dado que a observação ocorre em t, $\mathcal{P}(x|t) = |\psi(x|t)|^2$.
  - Vamos definir também a densidade de probabilidade $\mathcal{P}(t)$ do sistema ser medido no instante t independente da posição.

EXTENSÃO STS DA MECÂNICA QUÂNTICA

- Por outro lado, sabemos que através do teorema de Bayes

$$\mathcal{P}(x,t)dxdt = \mathcal{P}(t|x)\mathcal{P}(x)dxdt \equiv |\phi(t|x)|^2\mathcal{P}(x)dxdt,$$

Onde $\mathcal{P}(t|x)$ é a densidade de probabilidade de encontrar a partícula no instante t dado que a observação ocorre na posição x. A partir de agora iremos nos referir a $\mathcal{P}(t|x) = |\phi(t|x)|^2$. Novamente, $\mathcal{P}(x)$ é a distribuição de probabilidade das medições de posição independentemente do instante em que ocorrem.

- Inversão dos papéis de x e t: Agora, a posição passa a ser o parâmetro contínuo que rotula soluções da equação de onda, enquanto o tempo passa a ser um operador com medição probabilística dado um arranjo experimental específico

EXTENSÃO STS DA MECÂNICA QUÂNTICA

- Recapitulando:
  - MQ - Tempo Condicionada (TC): $|\psi(x|t)|^2 \rightarrow$ representa a densidade de probabilidade de detectarmos a partícula na posição x dado que a medição ocorreu no instante t.
  - Extensão STS – Espaço Condicionada (EC): $|\phi(t|x)|^2 \rightarrow$ representa a densidade de probabilidade de detectarmos a partícula no instante de tempo t dado que a medição ocorreu na posição x.

MQ VS STS
OPERADORES E BASES

$$\hat{\mathrm{X}}|x\rangle_t = x|x\rangle_t \quad \text{e} \quad [\hat{\mathrm{X}},\hat{\mathrm{P}}] = i\hbar,$$

$${}_t\langle x|\hat{P}|x'\rangle_t = -\delta(x-x')i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}$$

$$|P\rangle_t = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{iPx/\hbar}|x\rangle_t.$$

$$\hat{\mathbb{T}}|t\rangle_x = t|t\rangle_x \quad \text{e} \quad [\hat{\mathbb{H}},\hat{\mathbb{T}}] = i\hbar,$$

$${}_x\langle t|\hat{\mathbb{H}}|t'\rangle_x = \delta(t-t')i\hbar\frac{\partial}{\partial t'},$$

$$|E\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} dt\ e^{-iEt/\hbar}|t\rangle_x.$$

Importante: não confundam o Hamiltoniano $\hat{\mathbb{H}}$ atuando em $\mathcal{H}_x$ com o Hamiltoniano $\hat{H}$ da MQ atuando em $\mathcal{H}_t$, embora se refiram ao mesmo hamiltoniano da mecânica clássica. Eles seguem diferentes regras de quantização e pertencem a diferentes espaços de Hilbert.

MQ VS STS
EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER / STS

Estado a cada instante t

$$|\psi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \psi(x|t)|x\rangle_t,$$

$$H(x,P;t) = \frac{P^2}{2m} + V(x,t)$$

$$\to\ \hat{\mathrm{H}}(\hat{\mathrm{X}},\hat{\mathrm{P}};t) = \frac{\hat{\mathrm{P}}^2}{2m} + \hat{\mathrm{V}}(\hat{\mathrm{X}},t).$$

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

Eq. Schrödinger TC

Estado a cada posição x

$$|\boldsymbol{\phi}(x)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt\ \boldsymbol{\phi}(t|x)\ |t\rangle_x,$$

$$P(t,H;x) = \pm\sqrt{2m\big[H - V(x,t)\big]}$$

$$\to\ \hat{\mathbb{P}}(\hat{\mathbb{T}},\hat{\mathbb{H}};x) = \sigma_z\sqrt{2m\left[\hat{\mathbb{H}} - V(x,\hat{\mathbb{T}})\right]}.$$

$$\hat{\mathbb{P}}|\boldsymbol{\phi}(x)\rangle = -i\hbar\frac{d}{dx}|\boldsymbol{\phi}(x)\rangle.$$

Eq. Schrödinger EC

MQ VS STS
SOLUÇÕES

Projetando em $|x\rangle$

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

Densidade de probabilidade espacial:

$$\rho(x|t)dx=|{}_t\langle x|\psi(t)\rangle|^2dx$$

$$=\psi^*(x|t)\psi(x|t)dx.$$

Projetando em $|t\rangle$

$$\sigma_z\sqrt{2m\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-V(x,t)\right)}\boldsymbol{\phi}(t|x)=-i\hbar\frac{\partial\boldsymbol{\phi}(t,x)}{\partial x},$$

$$\boldsymbol{\phi}(t|x)=\begin{pmatrix}\phi^+(t|x)\\ \phi^-(t|x)\end{pmatrix}.$$

Densidade de prob. Temporal:

$$\rho(t|x)dt=\frac{|{}_x\langle t|\boldsymbol{\phi}(x)\rangle|^2}{\langle\boldsymbol{\phi}(x)|\boldsymbol{\phi}(x)\rangle}dt$$

$$=\frac{\boldsymbol{\phi}^\dagger(t|x)\boldsymbol{\phi}(t|x)}{\langle\boldsymbol{\phi}(x)|\boldsymbol{\phi}(x)\rangle}dt.$$

Importante: A normalização com da função de onda EC é necessária já que $\widehat{\mathbb{P}}$ não é sempre hermitiano. Como resultado, a equação de Schrödinger EC não é unitária em geral.

EXTENSÃO STS DA MECÂNICA QUÂNTICA

- A Ref. (DIAS; PARISIO, 2017) encontrou como solução para a partícula livre, $V(x,t) = 0$, no regime STS, como

$$\begin{aligned}\rho(t|x) \;=\; & \frac{1}{2\pi m\hbar}\left\{\left|\int_0^\infty \underline{\tilde{\phi}^+(P)}\,\sqrt{P}\,e^{iPx/\hbar - iE_Pt/\hbar}\,dP\right|^2\right. \\ & \left. + \left|\int_0^\infty \underline{\tilde{\phi}^-(P)}\,\sqrt{P}\,e^{-iPx/\hbar - iE_Pt/\hbar}\,dP\right|^2\right\}\frac{1}{\langle\boldsymbol{\phi}(x)|\boldsymbol{\phi}(x)\rangle},\end{aligned}$$

$\tilde{\phi}^{\pm}(P)$ → Amplitude de probabilidade da partícula ter momento $\pm P$ dado que a partícula é medida em x.

Fazendo a associação $\boxed{\tilde{\phi}(P) = \tilde{\psi}(P)}$, foi observado que a distribuição STS equivale a distribuição de Kijowski. Perceba todavia que essa associação não é trivial, como discutiremos à frente.

INTERPRETAÇÃO

$|\psi(t)\rangle$ NA BASE DA ENERGIA VS $|\phi(x)\rangle$ NA BASE DE MOMENTO & UMA INTERPRETAÇÃO MAIS PRECISA DO STS

$|\psi(t)\rangle$ NA BASE DA ENERGIA VS $|\boldsymbol{\phi}(x)\rangle$ NA BASE DE MOMENTO

Construindo um paralelo entre os estados de uma partícula nas duas teorias para facilitar nosso entendimento

$$\hat{\mathrm{H}}|\psi(t)\rangle = i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle, \quad \hat{\mathbb{P}}|\boldsymbol{\phi}(x)\rangle = -i\hbar\frac{d}{dx}|\boldsymbol{\phi}(x)\rangle.$$

- A equação de autovalor de energia na MQ usual é equivalente à equação de autovalor de momento na extensão STS:

$$\hat{\mathrm{H}}(t)|E_a(t)\rangle = E_a(t)|E_a(t)\rangle, \;\; \hat{\mathbb{P}}(x)\,|\boldsymbol{P}_b(x)\rangle = P_b(x)|\boldsymbol{P}_b(x)\rangle$$

- Um potencial dependente do tempo na equação de Schrödinger tem um efeito análogo a um potencial dependente do espaço na equação de Schrödinger EC

MQ VS STS

- Onde a e b são variáveis continuas tal que

$$\langle E_{a'}(t)|E_a(t)\rangle = \delta(a' - a)$$

$$\int da|E_a(t)\rangle\langle E_a(t)| = 1.$$

$$\langle \boldsymbol{P}_{b'}(x)|\boldsymbol{P}_b(x)\rangle = \delta(b' - b)$$

$$\int db|\boldsymbol{P}_b(x)\rangle\langle \boldsymbol{P}_b(x)| = 1.$$

Dado que

$$|\boldsymbol{P}_b(x)\rangle = \begin{pmatrix} |P_b^+(x)\rangle \\ |P_b^-(x)\rangle \end{pmatrix}$$

Aqui, omitimos intencionalmente os índices t do estado das energias e x do estados dos momentos, tal qual fazemos tradicionalmente em $|\psi(t)\rangle$ e $|\phi(x)\rangle$.

MQ VS STS

- Um estado arbitrário pode ser escrito nessas respectivas bases como

$$|\psi(t)\rangle = \int da\; \underline{\bar{\psi}(E_a|t)}\, |E_a(t)\rangle \,,$$

$$\bar{\psi}(E_a|t) \equiv \langle E_a(t)|\psi(t)\rangle = C(a|t)e^{i\theta_a(t)},$$

$$|\boldsymbol{\phi}(x)\rangle = \int db\; \underline{\tilde{\phi}(P_b|x)}\, |\boldsymbol{P}_b(x)\rangle \,,$$

$$\tilde{\phi}(P_b|x) \equiv \langle \boldsymbol{P}_b(x)|\boldsymbol{\phi}(x)\rangle = C(b|x)e^{i\theta_b(x)},$$

Utilizando a equação de Schrödinger (em seu espaço de Hilbert associado) podemos verificar os coeficientes C dessas equações como sendo

$$\frac{dC(a|t)}{dt} = -\int \mathrm{d}a'\, C(a'|t)e^{i\Delta\theta_{a'a}(t)}\, \langle E_a(t)|\, \frac{d}{dt}\, |E_{a'}(t)\rangle$$

$$\frac{dC(b|x)}{dx} = -\int db' C(b'|x)e^{i\Delta\theta_{b'b}(t)}\, \langle \boldsymbol{P}_b(x)|\, \frac{d}{dx}\, |\boldsymbol{P}_{b'}(x)\rangle$$

MQ VS STS

- Projetando esses estados nos kets $|x\rangle_t$ e $|t\rangle_x$, respectivamente

$$\psi(x|t) = {}_t\langle x|\psi(t)\rangle = \int da\ \bar{\psi}(E_a|t)\underline{\psi_a(x|t)},$$

Autofunção de energia

$$\boldsymbol{\phi}(t|x) = {}_x\langle t|\phi(t)\rangle = \int db\ \tilde{\phi}(P_b|x)\underline{\boldsymbol{\phi}_b(t|x)},$$

Autofunção de momento

para os hamiltonianos, a projeção dos kets acima resulta em

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t)\right]\psi_a(x|t) = E_a(t)\ \underline{\psi_a(x|t)}.$$

$$\sigma_z\sqrt{2m\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - V(x,t)\right)}\boldsymbol{\phi}_b(t|x) = P_b(x)\underline{\boldsymbol{\phi}_b(t|x)}.$$

MQ VS STS

Resolvendo essas equações para uma situação mais simples de partícula livre como em Ref. (DIAS; PARISIO, 2017), $\psi_a(x|t)$ e $\phi_b^\pm(t|x)$ se tornam respectivamente:

$$\underbrace{\overbrace{\psi_E^\pm(x)}^{\psi_E^\pm(x|t)} = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar}}\frac{1}{(2E)^{1/2}}\exp\left\{\pm\frac{i\sqrt{2mE}x}{\hbar}\right\},}_{\text{Normalização espacial}}$$

$$\psi(x|t) = \int_0^\infty dE\left[\bar{\psi}^+(E)\psi_E^+(x) + \bar{\psi}^-(E)\psi_E^-(x)\right]e^{-iEt/\hbar}$$

$$\underbrace{\phi_{P_\pm}^\pm(t|x) = \phi_{P_\pm}^\pm(t) = \sqrt{\frac{|P_\pm|}{2\pi m\hbar}}\exp\left\{-\frac{i(P_\pm)^2 t}{2m\hbar}\right\}.}_{\text{Normalização temporal}}$$

$$\boldsymbol{\phi}(t|x) = \int_0^\infty dP\left[\tilde{\phi}^+(P)\boldsymbol{\phi}_{P_+}(t)e^{iPx/\hbar} + \tilde{\phi}^-(P)\boldsymbol{\phi}_{P_-}(t)e^{-iPx/\hbar}\right]$$

- Diferente da MQ usual, onde $\mathcal{P}(E|t) = \left|\bar{\psi}(E)\right|^2$ é independente do tempo para partículas livres, na extensão STS $\mathcal{P}(P_\pm|x) = |\,\tilde{\phi}^\pm(P)|^2/\langle\,\boldsymbol{\phi}(x)|\boldsymbol{\phi}(x)\rangle$ pode depender de x devido ao fator de normalização $\langle\boldsymbol{\phi}(x)|\boldsymbol{\phi}(x)\rangle$.

MQ VS STS

De posse dessas representações, vamos discutir uma interpretação do STS e compará-lo com a MQ

- Primeiramente, vamos entender as diferenças físicas entre os kets $|\quad\rangle_t$ e $|\quad\rangle_x$: Enquanto na MQ os autoestados referem-se a uma propriedade bem definida em um tempo fixo, na STS eles referem-se à propriedade bem definida em uma posição fixa. Por exemplo, supondo que temos uma partícula tenha momento bem definido em ambas teorias, iremos representar isso como

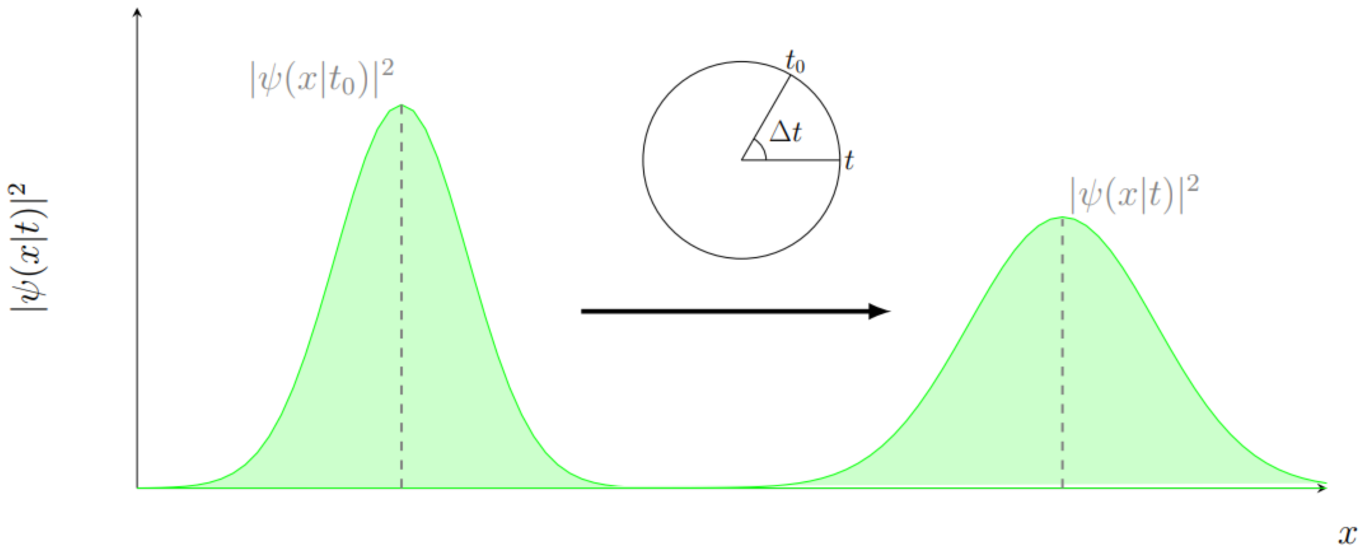
$$\underset{\text{Tem } P \text{ no instante } t}{\underbrace{|\psi(t)\rangle}_{\downarrow}} = |P\rangle_t \quad \text{vs} \quad \underset{\text{Chega em } x \text{ com } P}{\underbrace{|\phi^+(x)\rangle}_{\downarrow}} = |P\rangle_x$$

INTERPRETANDO EQ. SCHRÖDINGER EC

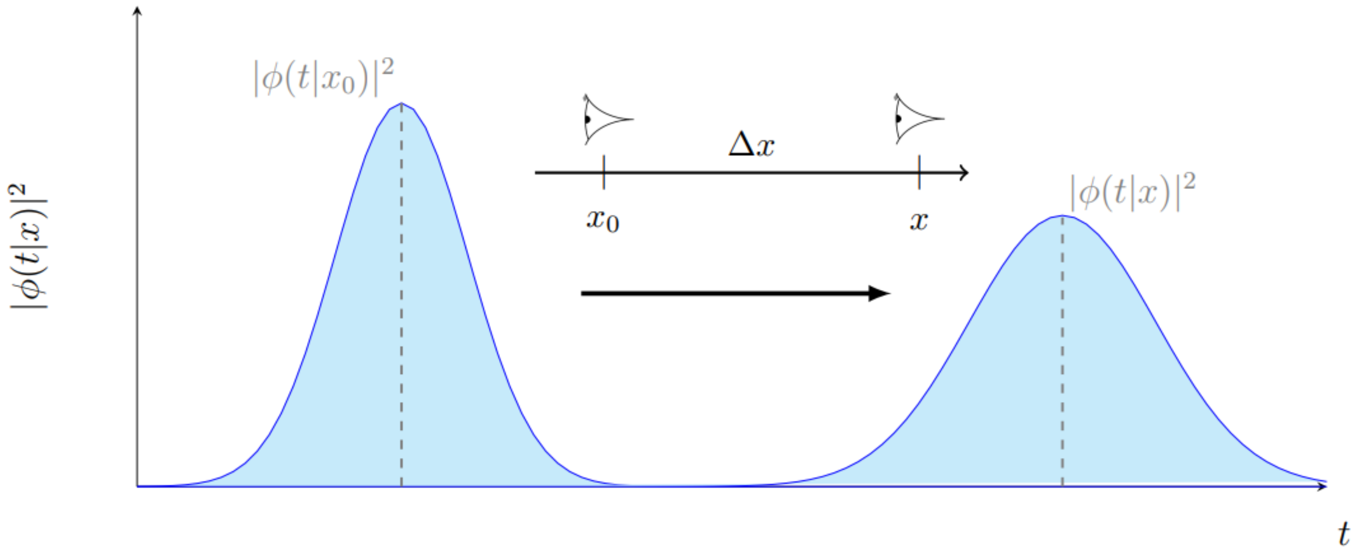
Considerando uma função de onda inicial $\psi(x|t_0)$ - a amplitude de probabilidade de encontrar a partícula na posição x, dado que a observação ocorre no tempo inicial t_0 - a solução da equação de Schrödinger, $\psi(x|t)$ é a amplitude de probabilidade de encontrar a partícula em x, dado que agora a observação ocorre em um momento posterior $t > t_0$.

Considerando uma função de onda EC "inicial" $\boldsymbol{\phi}(t|x_0)$, - a amplitude de probabilidade da partícula chegar no instante t, dado que a posição "inicial" do detector é x_0 - a solução da Schrödinger EC, $\boldsymbol{\phi}(t|x)$, é a amplitude de probabilidade da partícula chegar no instante t, dado que se move o detector para uma nova posição x.

(a) Densidade de probabilidade tempo-condicionada



(b) Densidade de probabilidade espaço-condicionada



Perceba que a condição "inicial" na extensão STS é na verdade uma condição de contorno para $\boldsymbol{\phi}(t|x)$.

UMA INTERPRETAÇÃO MAIS PRECISA DA EXTENSÃO STS

- Como a discussão acima não conecta $\psi(x|t)$ e $\boldsymbol{\phi}(t|x)$, vamos buscar uma relação agora representando os estados $|\psi(t)\rangle$ e $|\boldsymbol{\phi}(x)\rangle$ na mesma base

$$|\psi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dP\ \tilde{\psi}(P|t)|P\rangle_t$$

$$|\boldsymbol{\phi}(x)\rangle = \int db\ \tilde{\phi}(P_b|x)\,|\boldsymbol{P}_b(x)\rangle$$

- $\tilde{\psi}(P|t)$: prevê dados experimentais sobre o momento da partícula coletados em um instante fixo t, independentemente da posição observada

- $\tilde{\phi}(P_b|x)$: prevê dados sobre o momento coletados em uma posição fixa x, independentemente do tempo observado.

UMA INTERPRETAÇÃO MAIS PRECISA DA EXTENSÃO STS

- Mesmo escrevendo o estado $|\psi(t)\rangle$ e $|\boldsymbol{\phi}(x)\rangle$ na mesma base (momento), suas funções de onda $\tilde{\phi}(P_b|x) = \langle \boldsymbol{P}_b(x)|\boldsymbol{\phi}(x)\rangle$ e $\tilde{\psi}(P|t) = \langle P(x)|\psi(x)\rangle$ representam diferentes distribuições de probabilidade.

- Para exemplificar, tome a seguinte situação: se uma função de onda $\psi(x|t)$ não pode atravessar uma barreira de potencial, a partícula nunca atinge uma certa posição x^* no lado da transmissão.
  - $\tilde{\phi}(P_\pm|x^*) = 0 \ \forall \ P$
  - $\tilde{\psi}(P|t) \neq \ 0$

$\Big\}$ Nos fornecem estatísticas diferentes!

UMA INTERPRETAÇÃO MAIS PRECISA DA EXTENSÃO STS

- Vamos considerar a situação mais básica: **partícula livre** com momentos positivos $P_+ = P > 0$ chegando no ponto x^*, isto é $\langle \boldsymbol{\phi}(x^*)|\boldsymbol{\phi}(x^*)\rangle = 1$.
  - Nessa situação, podemos esperar que $|\tilde{\psi}(P|t)|^2 = \left|\tilde{\psi}(P)\right|^2$ e $|\tilde{\phi}(P_+|x^*)|$^2 $= \left|\tilde{\phi}(P)\right|^2$ são iguais.
  - Se **assumirmos também** que suas fases são as mesmas, $\tilde{\phi}^+(P) = \tilde{\psi}(P)$, **que não é uma suposição trivial,** a distribuição STS equivale a distribuição de Kijowski.
- Note que mesmo com $\tilde{\phi}^+(P) = \tilde{\psi}(P)$, $\boldsymbol{\phi}(t|x)$ ainda representa informação complementar à MQ pois a equação de Schrödinger EC ainda é necessária para obter a solução do tempo de chegada na base dos momentos. Assim, concluímos que se a extensão STS estiver correta, a informação do tempo ideal de chegada não está totalmente incorporada no estado ***intrínseco*** da partícula $|\psi(t)\rangle$.

- Esperamos que as previsões de $|\boldsymbol{\phi}(t|x)|^2$ possam ser confirmadas tomando alguns limites de medidas operacionais, onde detectores bem projetados e/ou relógios acoplados à partícula registram seu TOA.

SOLUÇÕES

VAMOS RESOLVER AGORA A EQ. SCHRÖDINGER PARA UM POTENCIAL $V(x)$ QUALQUER E APLICAR A SOLUÇÃO EM UMA BARREIRA DE POTENCIAL QUADRADA

SOLUÇÕES PARA $V = V(x)$

- Nessa seção vamos resolver a equação de Schrödinger EC para um potencial arbitrário $V = V(x)$. Para isso, escrevemos o estado $|\boldsymbol{\phi}(x)\rangle$ na base das energias $\{|E\rangle_x\}$, por motivos de simplicidade

$$|\boldsymbol{\phi}(x)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dE\ \bar{\boldsymbol{\phi}}(E|x)|E\rangle_x,$$

E substituímos ele na equação de Schrödinger EC,

$$\hat{\mathbb{P}}|\boldsymbol{\phi}(x)\rangle = -i\hbar\frac{d}{dx}|\boldsymbol{\phi}(x)\rangle.$$

SOLUÇÕES PARA $V = V(x)$

- Assim,

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} dE\ \sigma_z\ \bar{\boldsymbol{\phi}}(E|x)\ \sqrt{2m\left[\hat{\mathbb{H}} - V(x)\hat{\mathbb{I}}\right]}\ |E\rangle_x \\ = &-\int_{-\infty}^{\infty} dE\ i\hbar \frac{d\bar{\boldsymbol{\phi}}(E|x)}{dx}\ |E\rangle_x . \end{aligned}$$

- Expandindo o operador $\sqrt{\hat{\mathbb{H}} - V(x)\hat{\mathbb{I}}}$ para $V(x) \neq 0$ em série de potências,

$$\sqrt{\hat{\mathbb{H}} - V(x)\hat{\mathbb{I}}} = \sum_{n=0}^{\infty} \binom{\frac{1}{2}}{n} i^{1-2n} [V(x)]^{\frac{1}{2}-n}\ \hat{\mathbb{H}}^n ,$$

SOLUÇÕES PARA $V = V(x)$

- Aplicando essa expansão em $|E\rangle_x$,

$$\begin{aligned} & \sum_{n=0}^{\infty} \binom{\frac{1}{2}}{n} i^{1-2n} [V(x)]^{1/2-n} \ \hat{\mathbb{H}}^n |E\rangle_x \\ = & \sum_{n=0}^{\infty} \binom{\frac{1}{2}}{n} i^{1-2n} [V(x)]^{1/2-n} E^n |E\rangle_x \\ = & \sqrt{E - V(x)} \ |E\rangle_x . \end{aligned}$$

- Substituindo de volta na nossa primeira equação, e projetando a expressão resultante em $|E'\rangle_x$ obtemos uma EDO para $\bar{\boldsymbol{\phi}}(E'|x)$

$$\sigma_z \sqrt{2m\Big[E' - V(x)\Big]} \ \bar{\boldsymbol{\phi}}(E'|x) = -i \frac{d}{dx} \bar{\boldsymbol{\phi}}(E'|x),$$

SOLUÇÕES PARA $V = V(x)$

- Cuja solução de cada componente dessa EDO é tal que

$$\bar{\phi}^{\pm}(E|x) = \frac{\bar{\phi}^{\pm}(E|x_0)}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\pm i\int_{x_0}^{x} dx' \sqrt{2m[E - V(x')]}/\hbar},$$

onde substituímos E' por E. Substituindo essa expressão em $|\boldsymbol{\phi}(x)\rangle = \int dE\bar{\phi}(E|x)\,|E\rangle_x$, e então projetando a equação resultante em $|t\rangle_x$

$$\phi^{\pm}(t|x) = \int_{-\infty}^{\infty} dE\, \frac{\bar{\phi}^{\pm}(E|x_0)}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{\pm i\int_{x_0}^{x} dx' \sqrt{2m[E - V(x')]}/\hbar - iEt/\hbar}.$$

SOLUÇÕES PARA $V = V(x)$

- Vale notar a semelhança dessa solução com a solução da equação de Schrödinger para potenciais dependentes exclusivamente do tempo

$$\phi^{\pm}(t|x) = \int_{-\infty}^{\infty} dE \, \frac{\bar{\phi}^{\pm}(E|x_0)}{\sqrt{2\pi\hbar}} \, e^{\pm i \int_{x_0}^{x} dx' \sqrt{2m[E-V(x')]}/\hbar - iEt/\hbar}.$$

Essa será nossa solução utilizada na próxima seção

$$\psi(x|t) = \int_{-\infty}^{\infty} dP \frac{\tilde{\psi}(P|t_0)}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i \int_{t_0}^{t} dt' [P^2/(2m) + V(t')]/\hbar + iPx/\hbar}.$$

Aqui observamos que se pode ir de uma solução para a outra através da transformação $\left(t, P, H(t)\right) \rightarrow \ (x, E, \pm P(x))$

SOLUÇÕES PARA UMA BARREIRA QUADRADA

- Vamos utilizar como função de onda incidente para plotar nossa solução o pacote gaussiano centrado em x_i, largura δ e momento médio P_i

$$\psi(x|t_i) = \frac{1}{(2\pi\delta^2)^{1/4}} e^{-[(x-x_i)/(2\delta)-iP_i\delta]^2-P_i^2\delta^2},$$

- Para que nosso tempo de chegada meça o tempo de travessia iremos escolher uma condição inicial $\phi(t|x_0)$ com $x_i \leq x_0 \leq 0$ (antes da barreira, iremos trabalhar com o tempo de travessia).

- Como estamos interessados no TOA da partícula na região transmitida, onde existem apenas momentos positivos, vamos nos concentrar exclusivamente em $\phi^+(t|x)$. Voltaremos a discutir a independência entre $\phi^+(t|x)$ e $\phi^-(t|x)$ na conclusão.

SOLUÇÕES PARA UMA BARREIRA QUADRADA

- Como o pacote de onda incidente é livre e a partícula sempre passa por x_0, vamos considerar $\tilde{\phi}^+(P) = \tilde{\psi}(P)$, onde $\tilde{\psi}(P)$ (transformada de Fourier) é a função de onda de momento do pacote inicial $\psi(x|t_i)$

$$\tilde{\psi}(P) = \left(\frac{2\delta^2}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\delta^2(P-P_i)^2 - iPx_i}.$$

Considere que o pacote só tem momento positivo

- Substituindo o resultado acima na nossa solução geral

$$\boldsymbol{\phi}(t|x) = \int_0^\infty dP\Big[\tilde{\phi}^+(P)\boldsymbol{\phi}_{P_+}(t)e^{iPx/\hbar} + \tilde{\phi}^-(P)\boldsymbol{\phi}_{P_-}(t)e^{-iPx/\hbar}\Big],$$

SOLUÇÕES PARA UMA BARREIRA QUADRADA

- Nessas condições nossa condição "inicial" da função de onda EC em x_0 torna-se

$$\phi^+(t|x_0) = \int_0^\infty dP\ \tilde{\psi}(P)\sqrt{\frac{|P|}{2\pi m\hbar}}\ e^{iPx_0/\hbar - iP^2t/(2m\hbar)},$$

Onde $P = \sqrt{2mE}$. Para aplicar a solução espaço condicionada da seção anterior na condição inicial acima, precisamos descobrir $\bar{\phi}^+(E|x_0)$ para essa condição "inicial" particular. Para isso, relembre a solução geral EC

$$\phi^\pm(t|x) = \int_{-\infty}^\infty dE\ \frac{\bar{\phi}^\pm(E|x_0)}{\sqrt{2\pi\hbar}}\ e^{\pm i\int_{x_0}^x dx'\sqrt{2m[E-V(x')]}/\hbar - iEt/\hbar}.$$

SOLUÇÕES PARA UMA BARREIRA QUADRADA

- Considerando $x = x_0 = 0$ onde $V(x_0) = 0$ na nossa solução EC, temos

$$\phi^+(t|x_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dE \ \bar{\phi}^+(E|x_0) e^{-iEt/\hbar}.$$

- Se mudarmos a variável de integração de P para E na nossa condição "inicial" (relembre abaixo) e compararmos com a condição inicial do problema,

$$\phi^+(t|x_0) = \int_0^{\infty} dP \ \tilde{\psi}(P) \sqrt{\frac{|P|}{2\pi m\hbar}} \ e^{iPx_0/\hbar - iP^2 t/(2m\hbar)},$$

identificamos

$$\bar{\phi}^+(E|x_0) = \Theta(E) \left(\frac{m}{2E}\right)^{1/4} \tilde{\psi}(\sqrt{2mE}), \qquad \longrightarrow \quad \bar{\phi}^+(E|x_0)$$

SOLUÇÕES PARA UMA BARREIRA QUADRADA

$$\phi^{\pm}(t|x) = \int_{-\infty}^{\infty} dE \, \frac{\bar{\phi}^{\pm}(E|x_0)}{\sqrt{2\pi\hbar}} \, e^{\pm i \int_{x_0}^{x} dx' \sqrt{2m[E-V(x')]}/\hbar - iEt/\hbar}.$$

Relembre mais uma vez nossa solução EC

- Finalmente substituindo esse resultado na expressão da solução EC num regime de barreira de potencial quadrada encontrada para o regime STS em $x > L$

$$\begin{aligned} \phi^{+}(t|x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left(\frac{m}{2E}\right)^{1/4} \tilde{\psi}(\sqrt{2mE}) \\ &\times \; e^{i\sqrt{2m(E-V_0)}L/\hbar + i\sqrt{2mE}(x-L)/\hbar - iEt/\hbar}. \end{aligned}$$

Esta solução nos dá a amplitude de probabilidade temporal da partícula chegar em $x > L$

SOLUÇÕES PARA UMA BARREIRA QUADRADA

- Como consideramos no inicio $\tilde{\phi}^{+}(P) = \tilde{\psi}(P)$, e a partícula transmitida (que também é uma partícula livre) sempre passa pela posição de deteção podemos assumir também que $\tilde{\phi}_{T}^{+}(P) = \tilde{\psi}_{T}(P)$.

Tomando então $\tilde{\psi}_T(P) = T(P)\tilde{\psi}(P)$, como a função de onda de momento do pacote transmitido, dado o coeficiente de transmissão

$$T(P) = \frac{4PP'e^{-i(P-P')L/\hbar}}{\left(P+P'\right)^2 - e^{2iP'L/\hbar}\left(P-P'\right)^2}$$

E substituindo $\tilde{\psi}_T(P)$ em $\rho(t|x)$ com $\tilde{\phi}^{-}(P) = 0$, obtemos finalmente que

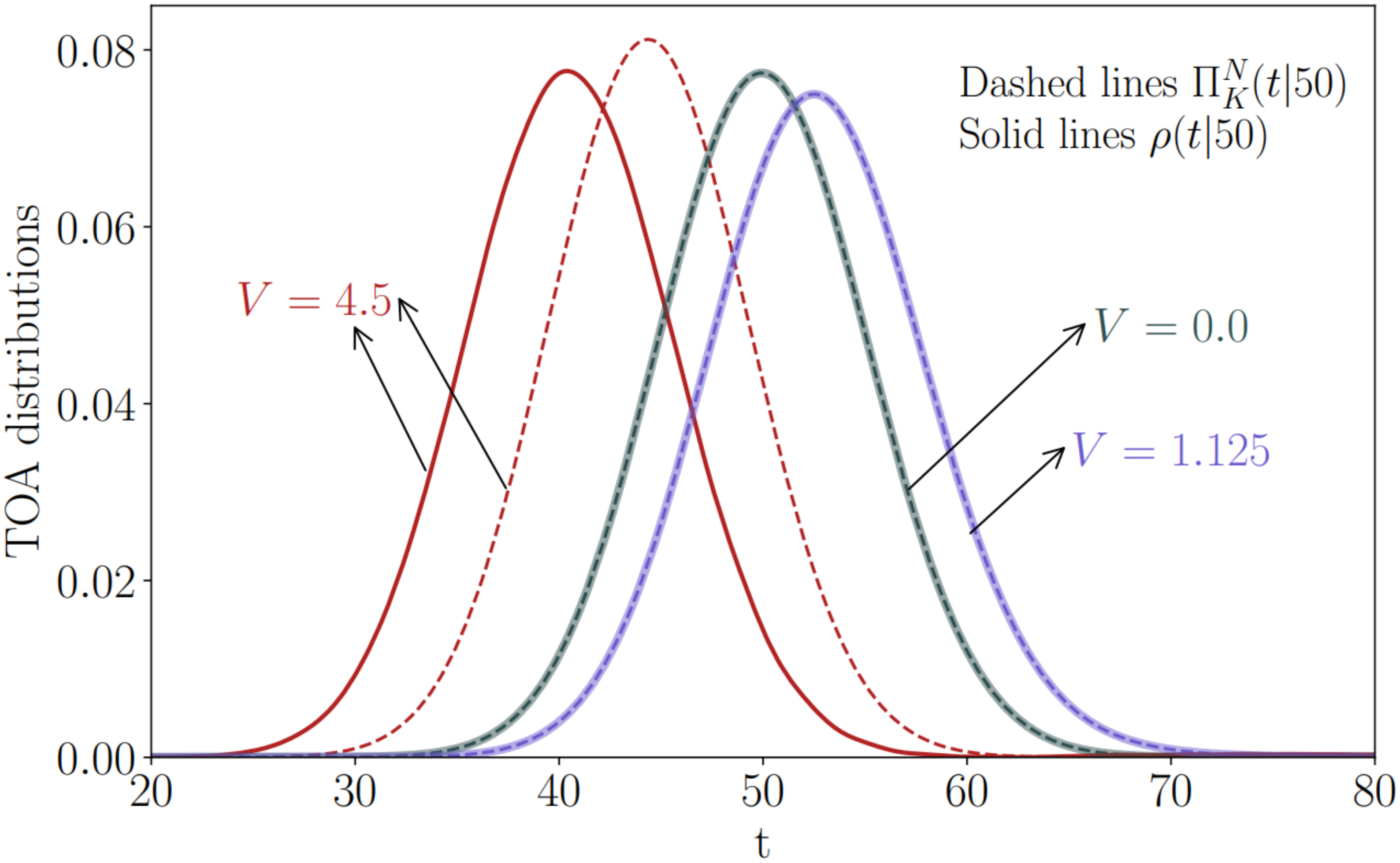
SOLUÇÕES PARA UMA BARREIRA QUADRADA

$$\Pi_K^N(t|x) = \frac{1}{\int_0^\infty dP|T(P)\tilde{\psi}(P)|^2}$$
$$\times \frac{\hbar}{2\pi m\hbar}\left|\int_0^\infty dP\ T(P)\tilde{\psi}(P)e^{-i\hbar P^2 t/(2m\hbar)+i\hbar P(x-L)/\hbar}\right|^2 .$$

Note que aqui usamos que a probabilidade da partícula chegar em x, independentemente do tempo ($\langle \boldsymbol{\phi}(x)|\boldsymbol{\phi}(x)\rangle$) é igual a probabilidade da partícula ser transmitida ($\int_0^\infty dP\left|T(P)\ \tilde{\psi}\ (P)\right|^2$). A equação acima é equivalente a distribuição Kijowski normalizada para o pacote transmitido. Esta equação nos fornece a densidade de probabilidade para o TOA em x, dado que a partícula foi transmitida através da barreira de potencial (tempo de travessia). Essa expressão foi utilizada em Ref. (XIMENES; PARISIO; DIAS, 2018) e muitas outras que obtiveram tempos de chegada via MQ usual

COMPARANDO RESULTADOS COM DISTRIBUIÇÃO DE KIJOWSKI

- Distribuições de probabilidade para o tempo de chegada das partículas transmitidas em $x = 50$. O pacote de onda inicial, $\psi(x, t_i)$, possui $P_0 = 2, \delta = 10$, $x_0 = -50$ e $m = 1$. A largura da barreira é $L = 10$. A linha contínua (trecejada) ilustra a previsão de $\rho(t|x)$ ($\Pi_K^N(t|x)$). Note que essas distribuições discordam no regime de tunelamento.



Se $\tilde{\phi}^+(P) = \tilde{\psi}(P)$ e $\tilde{\phi}_T^+(P) = \tilde{\psi}_T(P)$, então há contradição na atual formulação

CONCLUSÃO E CONSIDERAÇÕES FINAIS

- Recapitulando:
  - Comparamos os estados tempo condicionais $|\psi(t)\rangle$ e os estados espaço condicionais $|\phi(x)\rangle$ em diferentes bases;
  - Interpretação precisa da amplitude de probabilidade $\phi(t|x)$ e suas particularidades em contraste com a MQ.
  - Resolvemos a Eq. Schrödinger EC para $V = V(x)$ e aplicamos a solução em uma barreira de potencial quadrada

- Comparação entre previsões STS feitas de diferentes formas
  - Diferença observada entre essas distribuições pode vir do fato da extensão STS negligenciar a interferência entre os momentos positivos e negativos.

- Perspectivas futuras: Seria o acoplamento entre $\phi^+(t|x)$e $\phi^-(t|x)$ suficiente para tornar o STS uma teoria completa para medição de tempos de chegada ideias?

OBRIGADO!

RUBEN.ESTECHE@UFPE.BR