



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
DEPARTAMENTO DE FÍSICA - CCEN
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

RUBEN ESTECHE ARAÚJO

Uma extensão espaço-tempo-simétrica da mecânica quântica: Intepretação e
previsões do tempo de chegada.

Recife

2023

RUBEN ESTECHE ARAÚJO

Uma extensão espaço-tempo-simétrica da mecânica quântica: Intepretação e previsões do tempo de chegada.

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

Área de Concentração: Física Teórica e Computacional

Orientador: Prof. Dr. Eduardo Olímpio Ribeiro Dias

Recife

2023

Catálogo na fonte
Bibliotecária Nataly Soares Leite Moro, CRB4-1722

A663e Araújo, Ruben Esteche
 Uma extensão espaço-tempo-simétrica da mecânica quântica: interpretação
 e previsões do tempo de chegada / Ruben Esteche Araújo. – 2023.
 49 f.: il., fig.

 Orientador: Eduardo Olímpio Ribeiro Dias.
 Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco. CCEN,
 Física, Recife, 2023.
 Inclui referências.

 1. Física teórica e computacional. 2. Fundamentos da mecânica quântica.
 3. Tempo de chegada quântico. I. Dias, Eduardo Olímpio Ribeiro (orientador).
 II. Título.

 530.1 CDD (23. ed.) UFPE- CCEN 2024 - 22

RUBEN ESTECHE ARAÚJO

**UMA EXTENSÃO ESPAÇO-TEMPO-SIMÉTRICA DA MECÂNICA QUÂNTICA:
INTERPRETAÇÃO E PREVISÕES DO TEMPO DE CHEGADA**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

Aprovada em: 28/04/2023.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Eduardo Olímpio Ribeiro Dias
Orientador
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Fernando Roberto de Luna Parisio Filho
Examinador Interno
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Marcus Werner Beims
Examinador Externo
Universidade Federal do Paraná

Para Minha família, meu amor, meus amigos, e ao meu orientador por toda a compreensão e ensinamentos compartilhados.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, gostaria de agradecer à minha família por todo o apoio emocional e financeiro durante essa jornada acadêmica. Agradeço ao meu pai Douglas e a minha mãe Laura, por serem meus maiores incentivadores, me ajudando assim a manter o foco. Meu irmão Gustavo, obrigado por ser tão próximo e companheiro. Eu não poderia imaginar uma família melhor do que essa nem nos meus dias mais inspirados.

Aos meus amigos de curso, Naudson, Marquinhos, Anderson, Polly e Irio, Tertius, Thiago(s), Raquel, Gustavo, João, Bruninho, Lucas, Lea, Allison, Habakuke (e muitos outros que aqui não cabem) muito obrigado por serem as melhores pessoas que eu poderia ter pedido. Não teria conseguido chegar até aqui sem a ajuda e o incentivo de vocês. Espero que possamos sempre continuar tornando leve o ambiente tão pesado em que decidimos exercer nosso ofício.

E como não poderia deixar de ser, quero agradecer à minha amada Laís. Obrigado por ser minha inspiração diária, por me motivar a buscar sempre mais conhecimento e por ser a minha fonte inesgotável de amor e carinho. Você é a minha maior inspiração para sempre buscar ser melhor, e me esforçar a ir além.

Aos meus amigos interestaduais de Fortaleza que por tanto tempo fomentaram meus sonhos Brolo, Rafa, Beto, Terso e Vitinho, agradeço do fundo do meu coração pela proximidade que independe da distância. Em especial para meu amigo mais antigo que posso recordar, que por tanto tempo me acompanha e incentiva nessa empreitada acadêmica, moldando junto comigo o cientista que me tornei, obrigado Dudu.

Por fim, mas não menos importante, quero agradecer à minha tia Paula e a Bruna por me receberem em sua casa durante minha graduação. Vocês foram muito especiais durante esse período da minha vida. Obrigado por todas as emoções, aprendizados, risadas (e muitas), por tudo. O apoio de vocês foi fundamental.

A toda e qualquer pessoa que pôde contribuir na minha formação como físico, em especial meu orientador de mestrado, Eduardo, e meu orientador na graduação, Wilson; e a muitos amigos queridos cujos nomes não couberam aqui, meu sincero obrigado! Não seria o profissional que sou sem a ajuda de vocês. Que essa conquista seja lembrada pertencendo a todos que me ajudaram tanto quanto ela é minha.

Time is to clock as mind is to brain. The clock or watch somehow contains the time. And yet time refuses to be bottled up like a genie stuffed in a lamp. Whether it flows as sand or turns on wheels within wheels, time escapes irretrievably, while we watch. Even when the bulbs of the hourglass shatter, when darkness withholds the shadow from the sundial, when the mainspring winds down so far that the clock hands hold still as death, time itself keeps on. The most we can hope a watch to do is mark that progress. And since time sets its own tempo, like a heartbeat or an ebb tide, timepieces don't really keep time. They just keep up with it, if they are able. (DAVA SOBEL, 1947).

RESUMO

Nós interpretamos a extensão *space-time-symmetrical* (STS) da mecânica quântica (MQ) proposta em (DIAS; PARISIO, 2017) e exploramos as previsões de seus estados “espaço-condicionais” (EC) para potenciais arbitrários. Seguindo uma quantização alternativa, onde o tempo se torna um operador auto-adjunto e a posição um parâmetro, a extensão STS postula a existência de um novo estado quântico (intrínseco à partícula), $|\phi(x)\rangle$, definido a cada ponto no espaço. $|\phi(x)\rangle$ obedece à uma equação de Schrödinger EC que, na base do tempo, prevê o tempo ideal de chegada da partícula em x . Neste trabalho investigamos o comportamento para um potencial arbitrário da equação de autovalor do momento, que é análoga à equação de autovalor da energia na MQ usual. Verificamos que para potenciais dependentes do espaço, estados com momento bem definido dependem da posição, assim como estados com energia bem definida na MQ usual dependem do tempo para potenciais dependentes do tempo. Posteriormente, interpretamos a equação de Schrödinger EC de forma análoga à equação de Schrödinger: Dada uma função de onda EC “inicial”, $\phi(t|x_0)$, a solução $\phi(t|x)$ é a amplitude de probabilidade da partícula chegar no instante t , dado que o detector é movido para uma nova posição x . Neste contexto, comparando $|\psi(t)\rangle$ e $|\phi(x)\rangle$, os quais descrevem dados estatísticos coletados em t e x , respectivamente, concluímos que eles fornecem informações complementares. Finalmente, resolvemos a equação Schrödinger EC para um potencial arbitrário dependente do espaço e aplicamos esta solução à uma barreira de potencial. Comparando esse resultado com uma generalização da distribuição de Kijowski, concluímos que a equação de Schrödinger EC talvez deva ser reformulada para acoplar as componentes de $\phi(t|x)$, levando em consideração a interferência entre momentos positivos e negativos.

Palavras-chave: fundamentos da mecânica quântica; tempo de chegada quântico; incerteza energia-tempo; extensão espaço-tempo-simétrica da mecânica quântica.

ABSTRACT

We interpret the space-time-symmetric (STS) extension of quantum mechanics (QM) proposed in (DIAS; PARISIO, 2017) and explore the predictions of its “space-conditional” (SC) states for arbitrary potentials. Following an alternative quantization, where time becomes a self-adjoint operator and position a parameter, the STS extension postulates the existence of a new quantum state (intrinsic to the particle), $|\phi(x)\rangle$, defined at each point in space. $|\phi(x)\rangle$ obeys a SC Schrödinger equation that, in the time basis, predicts the ideal arrival time of the particle at x . In this work, first, we investigate for an arbitrary potential the momentum eigenvalue equation, which is analogous to the energy eigenvalue equation in the usual QM. We verify that for space-dependent potentials, states with well-defined momentum depend on position, just as states with well-defined energy in the usual QM depend on time for time-dependent potentials. Next, we interpret the SC Schrödinger equation analogously to the Schrödinger equation: Given an “initial” SC wave function, $\phi(t|x_0)$, the solution $\phi(t|x)$ is the probability amplitude for the particle to arrive at t , given that one moves the detector to a new position x . In this context, comparing $|\psi(t)\rangle$ and $|\phi(x)\rangle$, which describe statistical data at t and x , respectively, we conclude they provide complementary information. Finally, we solve the SC Schrödinger equation for an arbitrary space-dependent potential and apply this solution to a potential barrier. Comparing this result with a generalization of the Kijowski distribution, We conclude that the SC Schrödinger equation should perhaps be reformulated to couple the components of $\phi(t|x)$, taking into account the interference between positive and negative momenta.

Keywords: foundations of quantum mechanics; quantum arrival time; energy-time uncertainty; space-time-symmetric extension of quantum mechanics.

LISTA DE FIGURAS

- Figura 1 – Os dois sistemas descrevem diferentes situações físicas e têm diferentes propósitos experimentais; enquanto a densidade de probabilidade da mecânica quântica de Schrödinger (a) representada por $|\psi(x|t)|^2$ descreve uma situação em que medimos a posição de uma partícula dado um instante de tempo t , na teoria STS (b) representado por $|\phi(t|x)|^2$ medimos o tempo de chegada de uma partícula dada uma posição x no espaço. 35
- Figura 2 – 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 (tracejada) ilustra a previsão de $\rho(t|x)$ ($\Pi_K^N(t|x)$). Note que essas distribuições discordam no regime de tunelamento. 42

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	11
1.1	O ARGUMENTO DE PAULI	12
1.2	OS PROBLEMAS DO TEMPO DE CHEGADA E TRAVESSIA	15
1.2.1	O problema do tempo de chegada	15
1.2.2	O problema do tempo de tunelamento	16
1.3	UMA BREVE INTRODUÇÃO À EXTENSÃO ESPAÇO-TEMPO-SIMÉTRICA DA MECÂNICA QUÂNTICA	17
1.4	O QUE VEM A SEGUIR	18
2	FORMALISMOS SOBRE O TEMPO DE CHEGADA	20
2.1	O FLUXO QUÂNTICO E A DISTRIBUIÇÃO DE KIJOWSKI	20
2.1.1	O Fluxo Quântico	20
2.1.2	O Modelo Axiomatico de Kijowski	22
2.2	A EXTENSÃO STS DA MQ	23
3	INTERPRETANDO A EXTENSÃO STS E COMPARANDO-A COM A MQ	30
3.1	$ \psi(t)\rangle$ NA BASE DE ENERGIA VERSUS $ \phi(x)\rangle$ NA BASE DE MOMENTO	30
3.2	UMA INTERPRETAÇÃO MAIS PRECISA DO FORMALISMO STS E SUA CONEXÃO COM A MQ	33
4	SOLUÇÕES PARA $V = V(x)$ E O TOA DE UMA PARTÍCULA ATRAVESSANDO UMA BARREIRA DE POTENCIAL	38
4.1	SOLUÇÃO GERAL DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER EC PARA $V = V(x)$	38
4.2	COMPARANDO AS PREVISÕES DO STS COM UMA GENERALIZAÇÃO DA DISTRIBUIÇÃO DE KIJOWSKI	39
5	CONCLUSÃO E CONSIDERAÇÕES FINAIS	44
	REFERÊNCIAS	46

1 INTRODUÇÃO

“Time is what we want most, but what we use worst.- Willian Penn

Ainda nos dias de hoje, tempo na mecânica quântica é considerado um tema controverso, e isso se deve em parte ao fato de que existem dois tratamentos possíveis para o mesmo. Por um lado, na equação de Schrödinger, tempo não é um observável (tal qual o comportamento atribuído à posição), mas sim um parâmetro externo. O estado de um sistema quântico e a distribuição de probabilidade de uma quantidade física são condicionados em um dado instante de tempo. Por outro lado, o tempo pode ser uma quantidade mensurável na MQ. Podemos medir o instante de tempo em que uma quantidade física assume um certo valor inicial e, enquanto o sistema evolui, medir o outro instante em que a mesma quantidade assume um dado valor final. Exemplos disso são as medições de tempo de chegada, tempo de permanência, tempo de vida, entre outros.

Como um instante de tempo pode ser um observável, naturalmente levanta a questão de saber se podemos incluí-lo na formulação ortodoxa da mecânica quântica. A maneira mais comum de incorporar quantidades clássicas na formulação quântica é o método de quantização canônica, que consiste em substituir os colchetes de Poisson de um par de variáveis canônicas pelos colchetes de comutação dos operadores correspondentes. Dessa forma, dado o hamiltoniano $H(q, p)$ de um sistema clássico conservativo (sem dependência temporal explícita), sempre podemos fazer uma transformação canônica de (q, p) para novas variáveis canônicas (H, T) , onde H é o hamiltoniano do sistema e T sua variável conjugada, que satisfaça a equação de Hamilton

$$\frac{dT}{dt} = \{H, T\} = \frac{\delta H}{\delta H} \frac{\delta T}{\delta T} - \frac{\delta T}{\delta H} \frac{\delta H}{\delta T} = 1. \quad (1.1)$$

Na equação acima, perceba T como um intervalo de tempo. Tomando então a quantização $\{H, T\} \Rightarrow 1/i\hbar[\hat{H}, \hat{T}]$, onde postulamos que $\hat{H}$ e $\hat{T}$ são operadores auto-adjuntos, chegamos a um operador tempo satisfazendo a relação de comutação quântica,

$$[\hat{H}, \hat{T}] = i\hbar. \quad (1.2)$$

Isso pode ser feito tanto na representação de Heisenberg quanto na de Schrödinger. A Eq. (1.2) nos leva à relação de incerteza,

$$\Delta H \Delta T \geq \frac{1}{2} \left| \langle [\hat{H}, \hat{T}] \rangle \right|, \quad (1.3)$$

onde ΔH e ΔT são os desvios quadráticos médios de $\hat{H}$ e $\hat{T}$ respectivamente.

Contudo, já no início da construção teórica da MQ, Pauli demonstrou que a existência de um operador tempo auto-adjunto seguindo a Eq. (1.2) é incompatível com o caráter limitado ou semilimitado do espectro do hamiltoniano, como mostraremos em detalhes na seção a seguir. Em contraste à teoria quântica tradicional, que não consegue satisfazer a hermiticidade de um operador temporal e atender a relação de comutação acima apresentada, os autores na Ref. (DIAS; PARISIO, 2017) propuseram uma extensão espaço-tempo-simétrica da mecânica quântica como solução para esse problema. Nesse contexto, seguindo um processo de quantização distinto, é introduzido um operador tempo que satisfaz simultaneamente tanto a condição de hermiticidade como a de comutação canônica com um novo operador hamiltoniano.

Nesta dissertação, nossa intenção será propor uma interpretação mais precisa para a extensão proposta na Ref. (DIAS; PARISIO, 2017), comparar as suas previsões com as da MQ usual e investigar medições do tempo de travessia. Como ainda será discutido nessa introdução, o caráter condicional no tempo da mecânica quântica tradicional gera complicações nas previsões dos tempos de chegada e travessia. Na próxima seção, vamos discutir com mais detalhes o argumento proposto por Pauli para contextualizar melhor o problema do tempo como um observável. Em seguida, vamos revisar alguns modelos existentes na literatura para tempos de chegada e de tunelamento. Esses modelos servirão para comparar com as previsões da *space-time-symmetrical* (STS).

1.1 O ARGUMENTO DE PAULI

Agora, vamos voltar nossa atenção para a abordagem matemática formal que embasa a problemática do tempo como um operador. A intenção é motivar tanto a proposta de solução da Ref. (DIAS; PARISIO, 2017) para esse problema, como também a necessidade da nossa interpretação para a extensão espaço-tempo-simétrica da Ref. (DIAS; PARISIO, 2017).

Vamos assumir que a construção do operador temporal na Eq. (1.2) seja válida. Nesse cenário, vamos mostrar que ao aplicarmos um operador unitário $\exp[iE'\hat{T}/\hbar]$ com $E' \in \mathbb{R}$, no autoestado de energia $|E\rangle$ irá produzir um novo autoestado com autovalor $E - E'$, ou seja, essa aplicação irá deslocar de $-E'$ a energia do estado $|E\rangle$. Portanto, dado um autovalor $E \in \mathbb{R}$, podemos então escolher um $E' \in \mathbb{R}$ qualquer para acessar um determinado estado de energia $E - E'$ desejado.

Para começar, vamos expandir o operador exponencial acima em série de potências de

forma que

$$e^{iE'\hat{T}/\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{iE'\hat{T}}{\hbar} \right)^n. \quad (1.4)$$

Agora aplicando o operador hamiltoniano pela esquerda, obtemos

$$\hat{H}e^{iE'\hat{T}/\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \hat{H} \left(\frac{iE'\hat{T}}{\hbar} \right)^n. \quad (1.5)$$

Para entender como o operador $\hat{H}$ atua em $\hat{T}^n$, vamos utilizar a relação de comutação (1.2) para criar uma relação de recorrência envolvendo n e $n - 1$. Isolando então $\hat{H}\hat{T}$ na Eq. (1.2),

$$\hat{H}\hat{T} = \hat{T}\hat{H} + [\hat{H}, \hat{T}] = \hat{T}\hat{H} + i\hbar. \quad (1.6)$$

Aplicando o operador $\hat{T}$ pela direita obtemos

$$\hat{H}\hat{T}^2 = \hat{T}\hat{H}\hat{T} + i\hbar\hat{T} \quad (1.7)$$

e substituindo a Eq. (1.6) na Eq. (1.7) é fácil ver que

$$\hat{H}\hat{T}^2 = \hat{T}(\hat{T}\hat{H} + i\hbar) + i\hbar\hat{T} = \hat{T}^2\hat{H} + 2i\hbar\hat{T}. \quad (1.8)$$

Se repetirmos o mesmo procedimento de aplicar o operador temporal à direita, só que agora na Eq. (1.8), e utilizarmos Eq. (1.6), obtemos

$$\hat{H}\hat{T}^3 = \hat{T}^2\hat{H}\hat{T} + 2i\hbar\hat{T}^2 = \hat{T}^2(\hat{T}\hat{H} + i\hbar) + 2i\hbar\hat{T}^2 = \hat{T}^3\hat{H} + 3i\hbar\hat{T}^2. \quad (1.9)$$

À essa altura já está claro que repetindo esse procedimento n vezes, obtemos

$$\hat{H}\hat{T}^n = \hat{T}^n\hat{H} + ni\hbar\hat{T}^{n-1}. \quad (1.10)$$

Portanto, podemos utilizar a relação de recorrência acima na Eq. (1.5),

$$\begin{aligned} \hat{H}e^{iE'\hat{T}/\hbar} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{iE'\hat{T}}{\hbar} \right)^n (\hat{T}^n\hat{H} + ni\hbar\hat{T}^{n-1}) \\ &= e^{iE'\hat{T}/\hbar} \hat{H} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{E'}{(n-1)!} \left(\frac{iE'\hat{T}}{\hbar} \right)^{n-1}, \end{aligned} \quad (1.11)$$

ou seja,

$$\hat{H}e^{iE'\hat{T}/\hbar} = e^{iE'\hat{T}/\hbar} (\hat{H} - E'). \quad (1.12)$$

Finalmente, aplicando o operador acima em $|E\rangle$, temos

$$\hat{H}e^{iE'\hat{T}/\hbar} |E\rangle = e^{iE'\hat{T}/\hbar} (E - E') |E\rangle = (E - E') e^{iE'\hat{T}/\hbar} |E\rangle. \quad (1.13)$$

Como queríamos provar, a aplicação do operador unitário promove um deslocamento de $-E'$, que pode ser arbitrariamente grande ou também infinitesimalmente pequeno dependendo da magnitude de $-E'$. Dessa forma, a energia pode se estender de $-\infty$ até ∞ continuamente, contrariando a necessidade de qualquer sistema possuir um limite inferior de energia.

A necessidade de um limite (inferior) da energia pode ser pensada de formas diferentes, por exemplo, sabemos que os sistemas tendem para o estado de menor energia (livre). Se o hamiltoniano não é limitado por baixo, não há um mínimo global de energia e, portanto, não há estado fundamental. Dessa forma, tal sistema é capaz de cair para níveis de energia cada vez mais baixos. Em consequência, o sistema é capaz de irradiar energia infinitamente, o que é obviamente um absurdo, pois nenhum sistema físico pode conter uma quantidade infinita de energia acessível. Embora possamos descrever matematicamente tal sistema, seu comportamento não é algo que observamos no mundo real.

Dito isso, precisamos então tal qual foi dito por Pauli, abandonar fundamentalmente a ideia de um operador $\hat{T}$ que seja hermitiano e satisfaça a relação $[\hat{H}, \hat{T}] = i\hbar$. Dessa forma, a relação de incerteza energia-tempo tem sido ressignificada, por exemplo Δt pode ser entendido como

$$\Delta t = \frac{\sigma_Q}{|d\langle Q \rangle/dt|} \quad (1.14)$$

onde $\Delta t \Delta \hat{H} \geq \hbar/2$ (sendo Δt o tempo necessário para $\langle \hat{Q} \rangle$ variar um desvio padrão), e $\hat{Q}$ e σ_Q dizem respeito a um observável quântico qualquer e seu desvio padrão, respectivamente. Esse tratamento diferenciado de Δt implica que diferentes observáveis $\hat{Q}$ têm diferentes "incertezas" temporais.

A assimetria entre tempo e os observáveis quânticos exposta através do argumento de Pauli é uma consequência do tempo não ser uma variável dinâmica, e sim um parâmetro na descrição do estado quântico. Variáveis dinâmicas, nesse sentido, se tornam operadores por serem quantidades mensuráveis de um sistema físico cujo estado é condicionado a um dado instante de tempo. Sendo assim, por décadas a ideia de que era impossível introduzir um operador temporal que fosse simultaneamente hermitiano e canonicamente conjugado ao operador de energia vingou na teoria quântica. Na última seção deste capítulo, vamos discutir brevemente a hipótese formulada na Ref. (DIAS; PARISIO, 2017), que propõe um formalismo espaço-tempo-simétrico onde o tempo se torna um observável e posição um parâmetro. Utilizando uma quantização distinta da usual, esse operador tempo tanto comuta com $\hat{H}$ como mantém sua hermiticidade, contrariando assim o argumento de Pauli. Uma revisão detalhada

desse formalismo será feita no capítulo 2.

1.2 OS PROBLEMAS DO TEMPO DE CHEGADA E TRAVESSIA

Muito tempo se passou após a construção do argumento de Pauli e o entendimento equivocado da comunidade científica de que a busca por operadores tempo seria fútil. Apenas na década de 1960 essa questão foi investigada novamente, e desde o início de 1990 esse assunto vem recebendo crescente atenção ((AHARONOV; BOHM, 1961), (ALLCOCK, 1969), (LANDAUER; MARTIN, 1994), (MUGA; BROUARD; MACIAS, 1995), (HALLIWELL, 1999), (MUGA; MAYATO; EGUSQUIZA, 2007), (MUGA; RUSCHHAUPT; CAMPO, 2010)).

Atualmente, a pesquisa nessa área tem uma ênfase em resolver problemas práticos, como o aparecimento "instantâneo" de elétrons no efeito fotoelétrico (PRIVITERA et al., 2004) e o decaimento de elementos metaestáveis. Essa área também inclui o estudo teórico do papel do tempo na mecânica quântica (LANDAUER; MARTIN, 1994), bem como soluções gerais para o problema do tempo de chegada ou tempo de tunelamento. Almejando aprofundar um pouco mais nos problemas que serão abordados nessa dissertação, as seções seguintes serão dedicadas a realizar uma breve introdução sobre esses dois últimos problemas.

1.2.1 O problema do tempo de chegada

Considere um pacote de onda inicial $\psi(x|t_0)$ — onde utilizamos a notação com $|$ para denotar a probabilidade condicional do evento referente à primeira variável ocorrer dado que o evento da variável seguinte acontece — restrito à região $x < 0$. O problema do tempo de chegada consiste em prever a distribuição de probabilidade temporal para a partícula chegar à uma determinada posição $x > 0$. Em outras palavras, responder a pergunta "*Qual é a probabilidade de uma partícula entrar em uma região do espaço pela primeira vez durante um determinado intervalo de tempo?*". As abordagens existentes para este problema podem ser divididas em duas classes: (i) independente e (ii) dependente do dispositivo de medição. As distribuições da categoria (i) são intrínsecas ao estado da partícula, por isso são chamados de *Ideal Time-of-Arival* (TOA ideal) ((DELGADO; MUGA, 1997), (LEAVENS, 2008), (DAS; NÖTH, 2021)).

Uma abordagem comum para este problema assume que, como qualquer observável na MQ, o TOA ideal é determinado pela decomposição espectral de um operador auto-adjunto

(um operador tempo), a condição inicial $\psi(x|t_0)$ e um hamiltoniano independente do aparato de medida. Por causa da objeção de Pauli, esses modelos ideais são compelidos a abdicar ou da relação de comutação canônica com o hamiltoniano ou da auto-adjunção do operador tempo (MUGA; MAYATO; EGUSQUIZA, 2007). Dessa forma, a descrição teórica dos tempos de chegada, travessia e tunelamento permanece controversa, com inúmeras abordagens surgindo nas últimas décadas ((ALLCOCK, 1969), (AHARONOV; BOHM, 1961), (XIMENES; PARISIO; DIAS, 2018), (RONCALLO; SACHA; MACCONE, 2023)).

Outros dois métodos tradicionais para problema do TOA ideal são a distribuição de probabilidade axiomática de Kijowski (KIJOWSKI, 1999) e a densidade de fluxo quântico (corrente de probabilidade) ((LEÓN et al., 1999), (DAS; NÖTH, 2021)). No entanto, semelhante à abordagem que utiliza um operador tempo, essas duas formulações não são irrestritamente válidas. Por exemplo, sabe-se que o fluxo quântico pode prever probabilidades negativas, um efeito chamado refluxo quântico ((DAS; STRUYVE, 2021), (BUSCH, 2008)). Falhas na distribuição de Kijowski para algumas configurações experimentais podem ser encontradas nas Refs. ((RONCALLO; SACHA; MACCONE, 2023), (LANDAUER; MARTIN, 1994), (HALLIWELL; YEARSLEY, 2009)).

A classe (ii) de abordagens para o TOA modela o dispositivo de medição levando em consideração o fato de que, na prática, os detectores não apresentam um desempenho ideal como descrito acima. Existem inúmeras descrições teóricas do aparato de medição, por exemplo, usando potenciais complexos ((MUGA; BROUARD; MACIAS, 1995), (HALLIWELL; YEARSLEY, 2009), (OLKHOVSKY; RECAMI; JAKIEL, 2004)), o colapso da função de onda ((OLKHOVSKY; RECAMI; JAKIEL, 2004), (PRIVITERA et al., 2004)), relógios quânticos (NAVARRO et al., 2003), integrais de caminho ((MARCHEWKA; SCHUSS, 1998), (MARCHEWKA; SCHUSS, 2000), (MARCHEWKA; SCHUSS, 2002)), e o formalismo de Page e Wootters para condições de contorno absorventes (PAGE; WOOTTERS, 1983). Vale ressaltar que esses métodos operacionais e as distribuições ideais tornam-se equivalentes em circunstâncias específicas distintas. Por exemplo, ao usar um potencial complexo que absorve idealmente a função de onda sem reflexão (MUGA; BROUARD; MACIAS, 1995), recupera-se a densidade de fluxo quântico.

1.2.2 O problema do tempo de tunelamento

A mecânica quântica implica em uma probabilidade não nula para uma partícula transpor uma barreira de potencial maior que a energia da mesma. Prever a duração deste evento é o objetivo do estudo do tempo de tunelamento. A busca por uma definição adequada e genera-

lizada de tempos de tunelamento para partículas massivas persiste nos dias de hoje e remonta às origens da mecânica quântica. Seu estudo começou com a descoberta do decaimento α no início do século 20, quando foi percebido que a partícula α pode escapar da barreira de potencial do núcleo, a qual seria intransponível classicamente (OLKHOVSKY; RECAMI; JAKIEL, 2004).

Atualmente, as três propostas mais tradicionais no tocante a esse problema são: o *phase time* (tempo de fase) introduzido por Wigner, relacionando tempo de retardo, intervalo de interação e mudanças de fase de dispersão (WIGNER, 1955); o *traversal time* (tempo de travessia) (BÜTTIKER; LANDAUER, 1982) proposto por Buttiker e Landauer em seus estudos de tunelamento através de uma barreira modulada no tempo. Pouco tempo depois, Buttiker usou a precessão de Larmor como um relógio, identificando tempos de permanência (*dwell time*), travessia e reflexão como três tempos característicos que descrevem a interação de partículas com uma barreira (BÜTTIKER, 2001). Revisões recentes que incluem essas e outras abordagens, discutindo TOA e tempos de tunelamento de uma perspectiva moderna e unificada, podem ser encontradas em (SOKOLOVSKI, 2004) e (SOKOLOVSKI; CONNOR, 1993). Outras perspectivas foram lançadas sobre essas questões através de experimentos com fótons, e revisadas em (STEVENS, 1983) e (PABLICO; GALAPON, 2020).

1.3 UMA BREVE INTRODUÇÃO À EXTENSÃO ESPAÇO-TEMPO-SIMÉTRICA DA MECÂNICA QUÂNTICA

Na MQ, o tempo é um parâmetro contínuo que é usado para rotular a solução da equação de onda, já a posição de uma partícula é um operador, e portanto seu valor sob uma medição é probabilístico. Essa assimetria é às vezes atribuída ao caráter não relativístico da equação de Schrödinger. Embora parcialmente correto, este argumento é insuficiente para justificar toda a disparidade entre espaço e tempo no formalismo da MQ.

Normalmente para descrever a probabilidade de encontrar uma partícula nos referimos à posição x no instante t , porém não temos a capacidade de prever o instante exato de uma provável medição. Nesse contexto, a ideia do formalismo espaço-tempo-simétrico foi pensada inicialmente para apresentar uma forma do espaço e o tempo desempenharem papéis equivalentes, possibilitando uma descrição probabilística tanto da posição x como do instante de tempo t em que observamos uma partícula.

Sabemos que $\psi(x|t) = \langle x|\psi(t) \rangle$ nos dá a amplitude de probabilidade de encontrar a

partícula em x , dado que o tempo de detecção é t . Providos da teoria STS que será formulada detalhadamente no Cap. 2, vamos poder nos perguntar sobre a probabilidade de encontrar a partícula entre $[x, x + dx]$ e $[t, t + dt]$. Nesse cenário, indagar sobre o estado de uma partícula em um determinado momento t não faz sentido, assim como perguntar na MQ usual sobre o estado dessa partícula em uma dada posição x . Veremos que para manter a simetria aqui proposta, precisamos de uma função de onda do tipo $\phi(t|x) = \langle t|\phi(x)\rangle$, onde x agora é um parâmetro contínuo e t é o autovalor de um observável. $|\phi(t|x)|^2$ nos fornece o TOA ideal na posição x .

Atualmente, a extensão STS foi aplicada na Ref. (LARA; BEIMS, 2022), no calculo do tempo de travessia de uma barreira de potencial. Os autores resolveram analiticamente a equação "dinâmica" da extensão STS no limite de potenciais $V(x) \ll E$ e $V(x) \gg E$, sendo E a energia da partícula. Foi mostrado que o valor esperado do tempo de chegada no regime de tunelamento tem a forma de uma média de energia dos tempos clássicos adicionado de uma contribuição quântica. Em outro estudo, (XIMENES; PARISIO; DIAS, 2018), a teoria é também utilizada para prever tempos de travessia de uma barreira de potencial, mas aqui aplicada a um experimento eletromagnético que simula o tunelamento quântico. Essa revisão demonstrou uma melhor concordância com os experimentos em comparação com os modelos de Büttiker-Landauer e o *phase-time* (BÜTTIKER; LANDAUER, 1982).

1.4 O QUE VEM A SEGUIR

Agora, vejamos o que abordaremos nos próximos capítulos.

No **capítulo 2**, apresentaremos uma revisão mais detalhada do formalismo STS e de outras distribuições temporais para o tempo de chegada: a distribuição axiomática de Kijowski e o fluxo quântico.

- Seção 2.1 Revisar a distribuição de Kijowski e o fluxo quântico.
- Seção 2.2: Revisar todos os aspectos matemáticos do formalismo STS.

A partir do **capítulo 3** apresentaremos nossos resultados originais.

- Seção 3.1: Vamos estabelecer um paralelo entre $|\psi(t)\rangle$ e $|\phi(x)\rangle$ nas bases de energia e momento, respectivamente.

- Seção 3.2: Aqui, vamos interpretar mais precisamente o formalismo STS, e discutir sua conexão com a MQ usual.

Para o **capítulo 4**, iremos aplicar nossos resultados a problemas específicos.

- Seção 4.1: Vamos resolver a equação "dinâmica" para o caso de um potencial $V = V(x)$ qualquer.
- Seção 4.2: Por fim, vamos comparar a solução da Sec. 4.1 com o modelo de Kijowski para uma partícula que atravessa uma barreira de potencial. Discutiremos a possibilidade de estender a teoria STS com o intuito de levar em consideração a interferência entre momentos positivos e negativos.

No **capítulo 5**, concluímos revisando os resultados originais dessa dissertação e discutindo perspectivas de trabalhos futuros.

2 FORMALISMOS SOBRE O TEMPO DE CHEGADA

Neste capítulo vamos revisar os modelos de Kijowski e *Quantum flux*, que são distribuições do tempo de chegada ideal, preparando assim terreno para as comparações que serão feitas no capítulo seguinte. Em seguida, vamos abordar de forma mais detalhada o formalismo matemático da teoria STS.

2.1 O FLUXO QUÂNTICO E A DISTRIBUIÇÃO DE KIJOWSKI

A definição de "chegar" em uma região específica é complicada devido à incerteza da mecânica quântica. Conceitos bem definidos são, por exemplo, aqueles do primeiro e último cruzamento de um pacote de onda — como usualmente utilizamos a noção de funções de onda espacialmente localizadas, podemos definir esses conceitos através do primeiro e último instante nos quais é possível medir a partícula em uma determinada posição — (HALLIWELL; YEARSLEY, 2009). Portanto, para descrever o tempo de chegada de uma partícula, é importante definir claramente o conceito de "chegar". Segundo Allcock, essa área de pesquisa é ainda mais complicada do que parece, dado que ele sugere que "é muito improvável que a mecânica quântica admita qualquer conceito de tempo de chegada ideal" (ALLCOCK, 1969). Apesar dessas ressalvas, o tempo de chegada foi estudado em profundidade por vários autores, cada um com sua abordagem específica. Descreveremos agora, em um pouco mais de detalhes, duas abordagens consideradas tradicionais sobre o tempo de chegada.

2.1.1 O Fluxo Quântico

O fluxo quântico de probabilidade (também conhecido como corrente de probabilidade para o caso unidimensional) é um conceito que remonta aos primórdios da MQ, e essa grandeza advém do comportamento probabilístico da mesma. A conexão do fluxo quântico com o tempo de chegada na MQ pode ser explicada mais simplesmente para o caso onde a probabilidade da partícula ser encontrada dentro de uma região G diminui monotonicamente com o tempo. Para satisfazer esse requisito é suficiente que a função de onda $\psi(x|t)$ da partícula pertença ao conjunto

$$C^+ := \{\psi | \mathbf{j}_\psi(\mathbf{x}, t) \cdot d\mathbf{S} \geq 0, \forall \mathbf{x} \in \partial G, \forall t \geq 0\}, \quad (2.1)$$

onde

$$\mathbf{j}_\psi(\mathbf{x}, t) = \frac{\hbar}{2m} \text{Im}(\psi^*(\mathbf{x}|t) \nabla \psi(\mathbf{x}|t)) \quad (2.2)$$

é a corrente de probabilidade, ∂G é a região de contorno de G , e $d\mathbf{S}$ é um elemento de superfície apontando para fora.

Nessas condições específicas, define-se a probabilidade de que a partícula chegue em ∂G depois do tempo t , $\mathcal{P}(\text{depois de } t)$, como a probabilidade da partícula estar dentro de G no instante t , $\int_G |\psi(\mathbf{x}|t)|^2 d^3\mathbf{x}$. Portanto, a probabilidade da partícula chegar em ∂G durante o intervalo de tempo dt é calculada seguindo

$$\begin{aligned} \Pi_j(\mathbf{x}, t) dt &= \mathcal{P}(\text{depois de } t + dt) - \mathcal{P}(\text{depois de } t) \\ &= \int_G |\psi(\mathbf{x}|t + dt)|^2 d^3\mathbf{x} - \int_G |\psi(\mathbf{x}|t)|^2 d^3\mathbf{x} \\ &= \frac{d}{dt} \left(\int_G |\psi(\mathbf{x}|t)|^2 d^3\mathbf{x} \right) dt = \left(\int_{\partial G} \mathbf{j}_\psi(\mathbf{x}, t) \cdot d\mathbf{S} \right) dt. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Note que na ultima igualdade utilizamos a equação de continuidade da probabilidade, e vemos que a densidade de probabilidade temporal da partícula chegar na area ∂G é igual a $\int_{\partial G} \mathbf{j}_\psi(\mathbf{x}, t) \cdot d\mathbf{S}$, o fluxo quântico. Apesar de ser um dos modelos mais tradicionais do tempo de chegada ideal, a expressão acima tem um problema com sua interpretação probabilística, visto que $\Pi_j(\mathbf{x}, t)$ pode admitir valores negativos em um longo, mas ainda finito, intervalo de tempo (DAS; NÖTH, 2021), efeito este denominado *backflow effect*. Existem algumas alternativas conhecidas para contornar esse problema, as duas principais são: (i) a adoção de operadores semidefinidos positivos no espaço de Hilbert usual (o que constitui um *positive operator-valued measure* — POVM). Dado que qualquer medição quântica pode ser descrita por um POVM, a intenção dessa solução é buscar um POVM que concorde com a expressão da Eq. (2.3) para o conjunto de funções de onda da Eq. (2.1) (LEAVENS, 2008). Contudo, existem classes de funções de onda que não permitem essa descrição para sua corrente de probabilidade. (ii) A segunda alternativa é a utilização de trajetórias bohmianas visto que nessa formulação as partículas possuem trajetórias bem definidas, contornando assim o problema de *backflow* (DAS; STRUYVE, 2021).

Note que para o 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, define-se a distribuição temporal de chegada em x_A como

$$\Pi(x_A, t) = \frac{|\Pi_j(x_A, t)|}{\int_{-\infty}^{\infty} dt |\Pi_j(x_A, t)|}. \quad (2.4)$$

Embora a validade dessa expressão ainda seja objeto de debate, ela representa um dos modelos mais tradicionais na descrição de uma medida ideal de tempo de chegada.

2.1.2 O Modelo Axiomatico de Kijowski

Em uma tentativa de compreender melhor a relação entre tempo e energia na MQ, Kijowski (KIJOWSKI, 1974) desenvolveu uma distribuição de probabilidade para os tempos de chegada de partículas livres. Sua abordagem consistiu em identificar as propriedades mínimas que uma distribuição de TOA deve satisfazer no caso clássico livre e, em seguida, exigir propriedades semelhantes no regime quântico.

Primeiramente, Kijowski provou um teorema que uma distribuição do tempo de chegada deveria obedecer: considere o conjunto de funcionais bilineares positivos contínuos F de funções de onda ψ restritas a momentos positivos e que são invariantes sob translações espaciais. Além disso, para qualquer ψ normalizado, assuma que $\int dt F[\psi_t] = 1$, onde ψ_t é o estado evoluído a partir do estado inicial $\psi_0 = \psi$. Considere também que $F[\bar{\psi}] = F[\psi]$ (dado $\bar{\psi}$ como sendo o complexo conjugado da função de onda ψ) e que a dispersão definida como

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt t^2 F[\psi_t] - \left(\int_{-\infty}^{+\infty} dt t F[\psi_t] \right)^2 \quad (2.5)$$

seja finita. Sendo assim, o teorema afirma que existe então um funcional único F_0 para o qual esta variância é mínima. É importante reconhecer que o valor médio $\int dt t F[\psi_t]$ é constante sob esta classe de funcionais. O funcional F_0 é representado pela expressão

$$F_0[\psi] = \int \frac{dP_1 dP_2}{2\pi m} \bar{\psi}(P_1) \sqrt{P_1 P_2} \psi(P_2). \quad (2.6)$$

Uma vez que este funcional é definido apenas para funções com momentos positivos, as suas variáveis de integração são restritas de 0 a infinito.

A densidade de probabilidade do tempo de chegada para esses estados é definida como

$$\Pi_+^K(t) = F_0[\psi_t] = \left| \int_0^\infty dP \sqrt{\frac{P}{2\pi m \hbar}} e^{-iP^2 t / 2m \hbar} \psi(P) \right|^2. \quad (2.7)$$

Aqui, a média de t com $\Pi_+^K(t)$, $\int dt t \Pi_+^K(t)$, coincide com a "média" calculada através do fluxo quântico $j_\psi(x, t)$. Observe também que estamos lidando com o caso livre, o que significa que a amplitude de P do estado evoluído ψ_t está relacionada à amplitude P do estado ψ no instante inicial ($t = 0$) via

$$\psi_t(P) = e^{-iP^2 t / 2m \hbar} \psi(P). \quad (2.8)$$

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, $\Pi_-^K(t)$, definida abaixo. Dessa forma, ele concluiu que uma densidade de probabilidade total da chegada no tempo t na posição $x = 0$ de uma partícula em movimento livre em uma dimensão é dada por

$$\Pi_\psi^K(t) = \left| \int_0^\infty dP \sqrt{\frac{P}{2\pi m\hbar}} e^{-iP^2 t/2m\hbar} \psi(P) \right|^2 + \left| \int_{-\infty}^0 dP \sqrt{\frac{-P}{2\pi m\hbar}} e^{-iP^2 t/2m\hbar} \psi(P) \right|^2. \quad (2.9)$$

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

$$\Pi_K^N(t) = \frac{\Pi_+(t) + \Pi_-(t)}{N_K}, \quad (2.10)$$

onde

$$N_K = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \sum_{\alpha \in \{+, -\}} \Pi_\alpha(t). \quad (2.11)$$

2.2 A EXTENSÃO STS DA MQ

Nesta seção, iremos revisar a extensão STS usando uma notação semelhante à usada em (LARA; BEIMS, 2022). Para facilitar a compreensão da interpretação proposta na próxima seção, vamos formular a extensão STS traçando um paralelo com conceitos básicos da MQ. Vale ressaltar que o artigo original da extensão STS (DIAS; PARISIO, 2017) é um artigo relativamente curto, portanto ainda falta uma formulação mais detalhada dessa teoria.

Como introduzimos previamente, o objetivo da extensão STS proposta na Ref. (DIAS; PARISIO, 2017) é lidar com situações experimentais complementares àquelas envolvendo distribuições condicionadas temporalmente *intrínsecas à partícula*, $|\psi(x|t)|^2$. Note que podemos nos perguntar sobre a probabilidade conjunta, $\mathcal{P}(x, t) dx dt$, de encontrar a partícula em uma dada região do espaço $[x, x+dx]$ e em um certo intervalo de tempo $[t, t+dt]$. Nessas condições $\mathcal{P}(x, t)$ é igual à densidade de probabilidade de encontrar a partícula na posição x dado que a observação ocorre precisamente em t , $\mathcal{P}(x|t) = |\psi(x|t)|^2$, vezes a densidade de probabilidade $\mathcal{P}(t)$ do sistema ser medido no instante t , qualquer que seja o resultado. Assim, temos

$$\mathcal{P}(x, t) dx dt = \mathcal{P}(x|t) \mathcal{P}(t) dx dt = |\psi(x|t)|^2 \mathcal{P}(t) dx dt, \quad (2.12)$$

onde $\mathcal{P}(x, t)$ e $\mathcal{P}(t)$ não podem ser obtidos exclusivamente através de $|\psi(x|t)|^2$. Vale ressaltar que a última igualdade da Eq. (2.12) atribui à $\mathcal{P}(x|t)$ o módulo ao quadrado de uma função complexa. Sabe-se que esta relação, juntamente com a linearidade da MQ, diferencia a teoria

quântica de uma teoria clássica de probabilidade. Essas características juntas permitem a existência de probabilidades do tipo $|\psi_1(x|t) + \psi_2(x|t)|^2$, que leva ao fenômeno de interferência nas possíveis posições onde se pode encontrar uma partícula. A partir da Eq. (2.12), Ref. (DIAS; PARISIO, 2017) define uma função de onda global $\Psi(x, t)$ cujo módulo quadrado é a distribuição de probabilidade conjunta de x e t , $\mathcal{P}(x, t) = |\Psi(x, t)|^2$, e é normalizável por integração no espaço e no tempo.

Por outro lado, o teorema de Bayes permite que $\mathcal{P}(x, t)$ seja reescrito como

$$\mathcal{P}(x, t)dxdt = \mathcal{P}(t|x)\mathcal{P}(x)dxdt \equiv |\phi(t|x)|^2\mathcal{P}(x)dxdt, \quad (2.13)$$

onde $\mathcal{P}(t|x)$ é a densidade de probabilidade de encontrar a partícula em t , dado que a medição ocorre na posição x . Além disso, $\mathcal{P}(x)$ é a distribuição de probabilidade das medições de posição independentemente do momento em que ocorrem. Observe que x e t desempenham papéis opostos na Eq. (2.13) em comparação com a Eq. (2.12). A última igualdade da Eq. (2.13) é o ponto crucial da extensão STS. Essa relação conjectura que a distribuição de probabilidade temporal $\mathcal{P}(t|x)$, analogamente à distribuição espacial $P(x|t) = |\psi(x|t)|^2$, vem do módulo quadrado de uma função complexa, mas agora condicionada na posição x . Dessa forma, o fenômeno de interferência do instante em que uma partícula é observada surge naturalmente. A partir dessa perspectiva, a MQ ordinária não-relativística pode ser vista como uma MQ *temporalmente condicionada* (TC) e a extensão STS como uma MQ *espacialmente condicionada* (EC). O trabalho nessa dissertação tem como foco a função de onda EC, $\phi(t|x)$, ao invés da função de onda global $\Psi(x, t)$.

Agora, temos a intuição física para definir os elementos matemáticos da extensão STS fazendo um paralelo com a MQ usual. Na teoria quântica comum, o estado de uma partícula unidimensional sem spin é definido em um instante de tempo t e pertence a um espaço de Hilbert $\mathcal{H}|_t$. Além disso, posição é um operador atuando em $\mathcal{H}|_t$ tal que

$$\hat{X}|x\rangle_t = x|x\rangle_t \text{ e } [\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar, \quad (2.14)$$

onde ${}_t\langle x|x'\rangle_t = \delta(x - x')$ e $\hat{P}$ é o operador de momento. A notação $|\rangle_t$ não significa que este ket tem uma dependência temporal; em vez disso, apenas enfatiza que $|\rangle_t$ pertence a $\mathcal{H}|_t$. A relação de comutação (2.14) leva ao princípio de incerteza de posição e momento, $\Delta\hat{X}\Delta\hat{P} \geq \hbar/2$, onde Δ é a raiz quadrada do erro médio. Na representação da posição, $\hat{P}$ é

$${}_t\langle x|\hat{P}|x'\rangle_t = -\delta(x - x')i\hbar\frac{\partial}{\partial x'} \quad (2.15)$$

e seu autoestado $|P\rangle_t$, com $\hat{P}|P\rangle_t = P|P\rangle_t$, é

$$|P\rangle_t = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{iPx/\hbar} |x\rangle_t. \quad (2.16)$$

Aqui, a resolução da identidade é tal que

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle_t \langle x| = \int_{-\infty}^{\infty} dP |P\rangle_t \langle P| = \mathbb{I}. \quad (2.17)$$

A informação física sobre a posição da partícula em um instante de tempo t está contida em $|\psi(t)\rangle$ via a expansão

$$|\psi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x|t) |x\rangle_t, \quad (2.18)$$

que é solução da equação de Schrödinger

$$\hat{H}|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle, \quad (2.19)$$

onde $\hat{H}$ é obtida através do Hamiltoniano clássico via a regra de quantização $(x, P) \rightarrow (\hat{X}, \hat{P})$, i.e.,

$$H(x, P; t) = \frac{P^2}{2m} + V(x, t) \rightarrow \hat{H}(\hat{X}, \hat{P}; t) = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{X}, t). \quad (2.20)$$

Substituindo a Eq. (2.20) na representação de posição da Eq. (2.19), obtemos

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right] \psi(x|t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x|t). \quad (2.21)$$

Finalmente, a probabilidade de encontrar a partícula na região $[x, x + dx]$ dado que a medição ocorre no tempo t é

$$\rho(x|t)dx = |{}_t\langle x|\psi(t)\rangle|^2 dx = \psi^*(x|t)\psi(x|t)dx. \quad (2.22)$$

Agora, voltemos nossa atenção para a extensão STS proposta na Ref. (DIAS; PARISIO, 2017). Para facilitar o entendimento, vamos formular a extensão STS seguindo os mesmos passos executados acima para a MQ tradicional. Na extensão STS, o estado de uma partícula unidimensional sem spin, $|\phi(x)\rangle$, é definido em cada posição x e pertence a um espaço de Hilbert $\mathcal{H}|_x$. O tempo é um operador $\hat{\mathbb{T}}$ agindo sobre $\mathcal{H}|_x$ canonicamente conjugado ao operador hamiltoniano $\hat{\mathbb{H}}$ (que é diferente de $\hat{H}$ da Eq. (2.20)), ou seja,

$$\hat{\mathbb{T}}|t\rangle_x = t|t\rangle_x \text{ e } [\hat{\mathbb{H}}, \hat{\mathbb{T}}] = i\hbar, \quad (2.23)$$

onde ${}_x\langle t|t'\rangle_x = \delta(t - t')$. A relação de comutação leva à relação de incerteza energia-tempo, $\Delta\hat{\mathbb{T}}\Delta\hat{\mathbb{H}} \geq \hbar/2$. Semelhante a $|\rangle_t$ na MQ, o índice x não significa que $|\rangle_x$ tem uma

dependência espacial, mas sim que pertence à $\mathcal{H}|_x$. Essa notação não foi usada nas Refs. ((DIAS; PARISIO, 2017),(XIMENES; PARISIO; DIAS, 2018),(LARA; BEIMS, 2022)), e foi introduzida aqui para facilitar a interpretação dos autoestados da extensão STS que discutiremos no próximo capítulo.

É importante não confundir 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. A diferença entre eles vem do fato de seguirem regras de quantização distintas e pertencerem a diferentes espaços de Hilbert. Na representação de tempo, $\hat{\mathbb{H}}$ é definido como

$${}_x|\langle t|\hat{\mathbb{H}}|t'\rangle_x = \delta(t-t')i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \quad (2.24)$$

e seu autoestado $|E\rangle_x$, $\hat{\mathbb{H}}|E\rangle_x = E|E\rangle_x$, torna-se

$$|E\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-iEt/\hbar} |t\rangle_x. \quad (2.25)$$

Neste espaço de Hilbert, a resolução da identidade é

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt |t\rangle_x \langle t| = \int_{-\infty}^{\infty} dE |E\rangle_x \langle E| = \mathbb{I}. \quad (2.26)$$

Comparando as Eqs. (2.14)-(2.17) com as Eqs. (2.23)-(2.26), observamos que, assim como acontece com espaço e tempo, o momento e a energia desempenham papéis opostos em $\mathcal{H}|_t$ e $\mathcal{H}|_x$. Note que pela Eq. (2.26), E pode ser a priori negativo, da mesma forma que P na Eq. (2.17). Nesse cenário, assim como os coeficientes de $|\psi(t)\rangle$ na base $\{|P\rangle_t\}$ selecionam os possíveis momentos do sistema dependendo da situação física (definida pelo potencial e as condições iniciais e de contorno), os coeficientes de $|\phi(x)\rangle$ representados em $\{|E\rangle_x\}$ selecionam as energias do sistema. Como na própria formulação da teoria a base $\{|E\rangle_x\}$ inclui energias de menos a mais infinito, o argumento de Pauli não se aplica à extensão STS.

De forma análoga à Eq. (2.18), com $x \rightleftharpoons t$, a informação física do TOA de uma partícula na posição x está contida em $|\phi(x)\rangle$ via a expansão

$$|\phi(x)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt \phi(t|x) |t\rangle_x, \quad (2.27)$$

onde $\phi(t|x)$ é um vetor de duas componentes. Como fazemos $x \rightleftharpoons t$ (e $P \rightleftharpoons E$) na MQ usual para formular a extensão STS, vemos que $|\phi(x)\rangle$ deve mudar espacialmente de forma análoga a como $|\psi(t)\rangle$ evolui no tempo através da equação de Schrödinger (2.19). Como discutido acima, o gerador de translações temporais $\hat{H}$ é obtido pela quantização do hamiltoniano clássico dada pela Eq. (2.20). Portanto, para obter o gerador de translações espaciais correspondente na

extensão STS, devemos aplicar as novas regras de quantização (2.23) e (2.24) ao momento clássico, i.e.,

$$\begin{aligned} P(t, H; x) &= \pm \sqrt{2m[H - V(x, t)]} \\ \rightarrow \hat{\mathbb{P}}(\hat{\mathbb{T}}, \hat{\mathbb{H}}; x) &= \sigma_z \sqrt{2m[\hat{\mathbb{H}} - V(x, \hat{\mathbb{T}})]}. \end{aligned} \quad (2.28)$$

onde $\sigma_z = \text{diag}(+1, -1)$. Então, para que a translação espacial de $|\phi(x)\rangle$ seja análoga à translação temporal de $|\psi(t)\rangle$, $|\phi(x)\rangle$ deve obedecer

$$\hat{\mathbb{P}}|\phi(x)\rangle = -i\hbar \frac{d}{dx} |\phi(x)\rangle. \quad (2.29)$$

A partir de agora, iremos nos referir a Eq. (2.29) como a equação de Schrödinger EC. Na representação do tempo, $\{|t\rangle_x\}$, Eq. (2.29) é tal que

$$\sigma_z \sqrt{2m \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - V(x, t) \right)} \phi(t|x) = -i\hbar \frac{\partial \phi(t, x)}{\partial x}, \quad (2.30)$$

onde

$$\phi(t|x) = \begin{pmatrix} \phi^+(t|x) \\ \phi^-(t|x) \end{pmatrix}. \quad (2.31)$$

Análogo a t na MQ usual, x na extensão STS é um parâmetro contínuo que pode ser escolhido com precisão arbitrária para avaliar a amplitude de probabilidade temporal $\phi(t|x)$. Da mesma forma que ocorre com $\hat{\mathbb{H}}$ e t , $\hat{\mathbb{P}}$ e x não podem satisfazer o princípio da incerteza padrão.

A partir de $\phi(t|x)$, obtemos a probabilidade de medir a partícula no intervalo de tempo $[t, t + dt]$, dado que a observação ocorre na posição x ,

$$\rho(t|x)dt = \frac{|{}_x\langle t|\phi(x)\rangle|^2}{\langle \phi(x)|\phi(x)\rangle} dt = \frac{\phi^\dagger(t|x)\phi(t|x)}{\langle \phi(x)|\phi(x)\rangle} dt. \quad (2.32)$$

Aqui, o símbolo $\dagger$ é a operação de transposição conjugada. Na Eq. (2.32), a normalização com $\langle \phi(x)|\phi(x)\rangle$ é necessária já que $\hat{\mathbb{P}}$ não é sempre hermitiano. Como resultado, a equação de Schrödinger EC (2.29) não é unitária em geral. Perceba que $\langle \phi(x)|\phi(x)\rangle$ é a probabilidade da partícula chegar em x independentemente do TOA. Embora possamos observar uma partícula em qualquer instante de tempo (admitindo que ela exista, $\langle \psi(t)|\psi(t)\rangle = 1$), não podemos observá-la em qualquer posição, mesmo que esperemos por uma quantidade infinita de tempo; então $0 \leq \langle \phi(x)|\phi(x)\rangle \leq 1$ (XIMENES; PARISIO; DIAS, 2018).

Observe que a formulação da extensão STS não envolve os estados quânticos dos detectores e/ou relógios que medem o TOA, mas apenas as propriedades da própria partícula. Dessa

forma, $\phi(t|x)$ pode ser identificado como uma amplitude de probabilidade de um TOA ideal. Por outro lado, vale ressaltar que o formalismo de Page e Wootters considera um sistema adicional desempenhando o papel de um relógio. Além disso, a superposição temporal do formalismo de Page e Wootters refere-se à história do sistema (PAGE; WOOTTERS, 1983). Em contraste, na extensão STS, a superposição de tempo refere-se a um único evento, o TOA da partícula.

Por fim, Ref. (DIAS; PARISIO, 2017) considera o caso da partícula livre, $V = 0$, e escreve $\phi(t|x) \equiv \phi_P(t|x) = \phi_P(t) \exp(iPx/\hbar)$ e substitui essa equação em 2.30, obtendo $\hat{\sigma}_z \sqrt{2m(i\hbar d/dt)} \phi_P(t) = P \phi_P(t)$. Identificando $\sqrt{d/dt}$ com a derivada fracionária de Riemann-Liouville ${}_{-\infty}D_t^{1/2}$, que é equivalente à derivada fracionária de Caputo (PODLUBNY, 1998), temos que ${}_{-\infty}D_t^{1/2} \exp(-iwt) = \sqrt{-iw} \exp(-iwt)$. Considerando então uma solução do tipo $\phi_P^\pm(t) = A_P^\pm \exp(-iwt)$, obtemos a relação de dispersão $P = \pm \sqrt{2m\hbar w}$, onde não são utilizadas energias negativas visto que elas levam em valores de P imaginários. Como a Eq. 2.30 é linear, sua solução geral é $\phi^\pm(t|x) = \int_0^\infty \tilde{\phi}_P^\pm \exp(-iE_P t/\hbar) \exp(-iPx/\hbar) dP$, onde $E_P \equiv \hbar w = P^2/2m$.

Através da definição $\tilde{\phi}_P^\pm \equiv A_P^\pm \sqrt{|P|/2\pi m}$, a condição de normalização temporal para ρ leva em $\int_{-\infty}^\infty \rho(t|x) = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^\infty (|A_P^+|^2 + |A_P^-|^2) dP = 1$. Com isso, a densidade de probabilidade do tempo de chegada na posição x , Eq. (2.32), torna-se

$$\begin{aligned} \rho(t|x) = & \frac{1}{2\pi m\hbar} \left\{ \left| \int_0^\infty \tilde{\phi}^+(P) \sqrt{P} e^{iPx/\hbar - iE_P t/\hbar} dP \right|^2 \right. \\ & \left. + \left| \int_0^\infty \tilde{\phi}^-(P) \sqrt{P} e^{-iPx/\hbar - iE_P t/\hbar} dP \right|^2 \right\} \frac{1}{\langle \phi(x) | \phi(x) \rangle}, \end{aligned} \quad (2.33)$$

onde $|\tilde{\phi}^\pm(P)|^2$ é a densidade de probabilidade da partícula ter momento $\pm P$ (com $P > 0$), dado que sua observação ocorre em uma posição x . A Ref. (DIAS; PARISIO, 2017) reconhece a Eq. (2.33) como a distribuição normalizada de Kijowski definida na Eq. (2.10) identificando $\tilde{\phi}^\pm(P)$ como a função de onda de momento da MQ usual, $\tilde{\psi}(\pm P)$. No entanto, como as probabilidades na extensão STS estão condicionadas à uma determinada posição, essa identificação requer uma investigação mais cuidadosa. Posteriormente, depois de comparar a MQ usual e a extensão STS nas bases de energia e momento, respectivamente, e dar uma interpretação mais precisa da extensão STS, discutiremos as consequências de assumir $\tilde{\phi}^\pm(P) = \tilde{\psi}(\pm P)$.

Finalmente, vários problemas nas propostas de um TOA ideal obtidas dentro do domínio da MQ padrão não surgem aqui na extensão STS. Por exemplo, o próprio procedimento de quantização define um operador de tempo auto-adjunto que satisfaz a relação de comutação

canônica com o hamiltoniano. Além disso, diferente da densidade de corrente, a teoria STS fornece uma distribuição de probabilidade de tempo positivo definida, $\rho(t|x)$.

3 INTERPRETANDO A EXTENSÃO STS E COMPARANDO-A COM A MQ

Neste capítulo, vamos explorar algumas consequências da extensão STS, fornecendo uma interpretação mais precisa das soluções de sua equação "dinâmica", Eq. (2.29), e comparando as informações contidas em $|\psi(t)\rangle$ e $|\phi(x)\rangle$. Uma interpretação dos autoestados de observáveis na extensão STS também será discutida. Ressaltamos que a partir de agora os resultados apresentados são originais desta dissertação.

3.1 $|\psi(t)\rangle$ NA BASE DE ENERGIA VERSUS $|\phi(x)\rangle$ NA BASE DE MOMENTO

A equação de autovalor de energia na MQ usual é equivalente à equação de autovalor de momento na extensão STS. Assim, conforme investigaremos, um potencial dependente do tempo na equação de Schrödinger (2.19) tem um efeito análogo a um potencial dependente do espaço na equação de Schrödinger EC (2.29). Dito isso, consideramos $V = V(x, t)$ para lidarmos com o caso mais geral possível. Nesta seção iremos comparar as soluções gerais $|\psi(t)\rangle$ e $|\phi(x)\rangle$ nas bases de energia e momento, respectivamente. Vamos começar revisando a MQ usual para um hamiltoniano dependente do tempo (SAKURAI; NAPOLITANO, 2017). Primeiro, os autoestados de energia instantâneos satisfazem

$$\hat{H}(t)|E_a(t)\rangle = E_a(t)|E_a(t)\rangle, \quad (3.1)$$

onde a é uma variável contínua tal que $\langle E_{a'}(t)|E_a(t)\rangle = \delta(a' - a)$ e $\int da |E_a(t)\rangle \langle E_a(t)| = 1$. Semelhante a $|\psi(t)\rangle$, estamos omitindo o índice t em $|E_a(t)\rangle$.

Um estado arbitrário em $\mathcal{H}|_t$ pode então ser expandido nesta base instantânea de energia,

$$|\psi(t)\rangle = \int da \bar{\psi}(E_a|t) |E_a(t)\rangle, \quad (3.2)$$

onde

$$\bar{\psi}(E_a|t) \equiv \langle E_a(t)|\psi(t)\rangle = C(a|t)e^{i\theta_a(t)}, \quad (3.3)$$

com $\theta_a(t) = -1/\hbar \int_0^t dt' E_a(t')$ sendo a fase dinâmica. Da equação de Schrödinger (2.19), é fácil ver que o coeficiente $C(a|t)$ satisfaz

$$\frac{dC(a|t)}{dt} = - \int da' C(a'|t) e^{i\Delta\theta_{a'a}(t)} \langle E_a(t)| \frac{d}{dt} |E_{a'}(t)\rangle, \quad (3.4)$$

onde introduzimos $\Delta\theta_{a'a}(t) = \theta_{a'}(t) - \theta_a(t)$. Observe que $\mathcal{P}(E_a|t) = |\bar{\psi}(E_a|t)|^2 = |C(a|t)|^2$ ($\theta_a(t)$ é um número real) é a densidade de probabilidade de medir a partícula com energia E_a ,

dado que a medição ocorre no tempo t . Agora, projetando a Eq. (3.2) em $|x\rangle_t$ produz

$$\psi(x|t) = {}_t\langle x|\psi(t)\rangle = \int da \bar{\psi}(E_a|t)\psi_a(x|t), \quad (3.5)$$

onde $\psi_a(x|t) = {}_t\langle x|E_a(t)\rangle_t$ é a amplitude de probabilidade da partícula ser encontrada na posição x , dado que sua energia é E_a e o observação acontece no tempo t . Note que o índice a representa uma variável condicional de modo que $\psi(x|E_a, t)$ também seria uma notação conveniente para ${}_t\langle x|E_a(t)\rangle_t$.

Para o hamiltoniano (2.20), a projeção da Eq. (3.1) em $|x\rangle$ resulta em

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right] \psi_a(x|t) = E_a(t) \psi_a(x|t). \quad (3.6)$$

Em particular, para a situação de partícula livre, onde $[\hat{H}, \hat{P}] = 0$, $\psi_a(x|t) = {}_t\langle x|E_a(t)\rangle$ torna-se independente do tempo e é dado por

$$\psi_E^\pm(x) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar}} \frac{1}{(2E)^{1/2}} \exp\left\{ \pm \frac{i\sqrt{2mEx}}{\hbar} \right\}, \quad (3.7)$$

onde $\pm$ refere-se ao sinal do momento. Além disso, $\bar{\psi}(E_a|t)$ da Eq. (3.3) pode ser escrito como $\bar{\psi}^\pm(E|t) = \bar{\psi}^\pm(E)e^{-iEt/\hbar}$ e a solução geral (3.5) torna-se

$$\psi(x|t) = \int_0^\infty dE \left[\bar{\psi}^+(E)\psi_E^+(x) + \bar{\psi}^-(E)\psi_E^-(x) \right] e^{-iEt/\hbar}, \quad (3.8)$$

com $\mathcal{P}^\pm(E|t) = |\bar{\psi}^\pm(E)|^2$ independente do tempo.

A análise equivalente na extensão STS começa com a equação de autoestado do momento,

$$\hat{\mathbb{P}}(x) |\mathbf{P}_b(x)\rangle = P_b(x) |\mathbf{P}_b(x)\rangle \quad (3.9)$$

[analogamente à Eq. (3.1)], onde

$$|\mathbf{P}_b(x)\rangle = \begin{pmatrix} |P_b^+(x)\rangle \\ |P_b^-(x)\rangle \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

e, novamente, b é uma variável contínua onde, $\langle \mathbf{P}_{b'}(x) | \mathbf{P}_b(x) \rangle = \delta(b' - b)$ e $\int db |\mathbf{P}_b(x)\rangle \langle \mathbf{P}_b(x)| = 1$. Aqui também estamos omitindo o índice x nos autoestados de momento. Observe que, assim como os potenciais dependentes do tempo na MQ usual produzem auto-estados de energia dependentes do tempo, um potencial dependente do espaço na extensão STS leva a auto-estados de momento dependentes do espaço. Isso significa que os estados com momento bem definido dependem da posição em que descrevemos a partícula. Em contraste, lembre-se que

as autofunções de momento (energia) na MQ usual (extensão STS) são sempre as mesmas, proporcionais a $\exp\{iPx/\hbar\}$ ($\exp\{-iEt/\hbar\}$).

Analogamente à Eq. (3.2), utilizando da linearidade da equação de Shrödinger EC, um estado físico arbitrário em $\mathcal{H}|_x$ na posição x pode então ser expandido na base de momento como

$$|\phi(x)\rangle = \int db \tilde{\phi}(P_b|x) |\mathbf{P}_b(x)\rangle, \quad (3.11)$$

onde

$$\tilde{\phi}(P_b|x) \equiv \langle \mathbf{P}_b(x) | \phi(x) \rangle = C(b|x) e^{i\theta_b(x)}, \quad (3.12)$$

com $\theta_b(x) = 1/\hbar \int_0^x dx' P_b(x')$ sendo o equivalente à fase dinâmica $\theta_a(t)$ na MQ usual. A partir da equação de Schrödinger EC (2.29), pode-se verificar facilmente que o coeficiente $C_b(x)$ satisfaz uma equação semelhante à (3.4),

$$\frac{dC(b|x)}{dx} = - \int db' C(b'|x) e^{i\Delta\theta_{b'b}(x)} \langle \mathbf{P}_b(x) | \frac{d}{dx} | \mathbf{P}_{b'}(x) \rangle, \quad (3.13)$$

onde $\Delta\theta_{b'b}(x) = \theta_b'(x) - \theta_b(x)$. Agora, nós temos

$$\mathcal{P}(P_b|x) = \frac{|\tilde{\phi}(P_b|x)|^2}{\langle \phi(x) | \phi(x) \rangle} \quad (3.14)$$

como a amplitude de probabilidade de medir o estado com momento P_b , dado que a medição ocorre na posição x . Observe que $e^{i\theta_b(x)}$ é relevante para a Eq. (3.14), pois $\theta_b(x)$ pode ser um número puramente imaginário. Projetando a Eq. (3.11) em $|t\rangle|_x$, obtemos uma expansão análoga à Eq. (3.5) para a extensão STS,

$$\phi(t|x) = {}_x\langle t | \phi(x) \rangle = \int db \tilde{\phi}(P_b|x) \phi_b(t|x), \quad (3.15)$$

onde

$$\phi_b(t|x) = \begin{pmatrix} {}_x\langle t | P_b^+(x) \rangle \\ {}_x\langle t | P_b^-(x) \rangle \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \phi_b^+(t|x) \\ \phi_b^-(t|x) \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

é a amplitude de probabilidade da partícula chegar no tempo t , dado que seu momento é $P_b(x)$ e o detector está na posição x .

Agora, usando $\mathbb{P}$ definido na Eq. (2.28), a projeção da Eq. (3.9) em $|t\rangle|_x$ resulta em

$$\sigma_z \sqrt{2m \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - V(x, t) \right)} \phi_b(t|x) = P_b(x) \phi_b(t|x). \quad (3.17)$$

A Ref. (DIAS; PARISIO, 2017) analisou a equação de autovalor do momento para a situação de partícula livre, onde $[\hat{\mathbb{P}}, \hat{\mathbb{H}}] = 0$. Nessa situação, como vimos no Cap. 2 análogo à Eq. (3.7)

na MQ usual, $\phi_b(t|x)$ definido na Eq. (3.16) torna-se independente do espaço, e aqui é dado por duas funções vetoriais independentes,

$$\phi_{P_+}(t|x) = \begin{pmatrix} \phi_{P_+}^+(t|x) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

e

$$\phi_{P_-}(t|x) = \begin{pmatrix} 0 \\ \phi_{P_-}^-(t|x) \end{pmatrix}, \quad (3.19)$$

com

$$\phi_{P_\pm}^\pm(t|x) = \phi_{P_\pm}^\pm(t) = \sqrt{\frac{|P_\pm|}{2\pi m\hbar}} \exp\left\{-\frac{i(P_\pm)^2 t}{2m\hbar}\right\}. \quad (3.20)$$

e $P_\pm = \pm\sqrt{2mE}$, onde E é a energia da partícula. Além disso, $\tilde{\phi}(P_b|x)$ definido na Eq. (3.12) pode ser escrito como

$$\tilde{\phi}(P_\pm|x) = \tilde{\phi}(P_\pm)e^{iP_\pm x/\hbar}, \quad (3.21)$$

Considerando $E > 0$ e definindo $\tilde{\phi}^\pm(P) \equiv \tilde{\phi}(P_\pm)$, com $P = |P_\pm|$, a solução geral (3.15) torna-se

$$\phi(t|x) = \int_0^\infty dP \left[\tilde{\phi}^+(P) \phi_{P_+}(t) e^{iPx/\hbar} + \tilde{\phi}^-(P) \phi_{P_-}(t) e^{-iPx/\hbar} \right], \quad (3.22)$$

onde seu módulo quadrado normalizado é $\rho(t|x)$ dado na Eq. (2.33). Vale a pena notar a semelhança entre as Eqs. (3.6)-(3.8) e as Eqs. (3.17)-(3.22). Diferente da MQ usual, onde $\mathcal{P}(E|t) = |\bar{\psi}(E)|^2$ é independente do tempo para partículas livres, $\mathcal{P}(P_\pm|x) = |\tilde{\phi}^\pm(P)|^2 / \langle \phi(x) | \phi(x) \rangle$ [ver Eq. (3.14)] pode depender de x devido ao fator de normalização $\langle \phi(x) | \phi(x) \rangle$. Exploraremos essa diferença mais profundamente na próxima seção.

3.2 UMA INTERPRETAÇÃO MAIS PRECISA DO FORMALISMO STS E SUA CONEXÃO COM A MQ

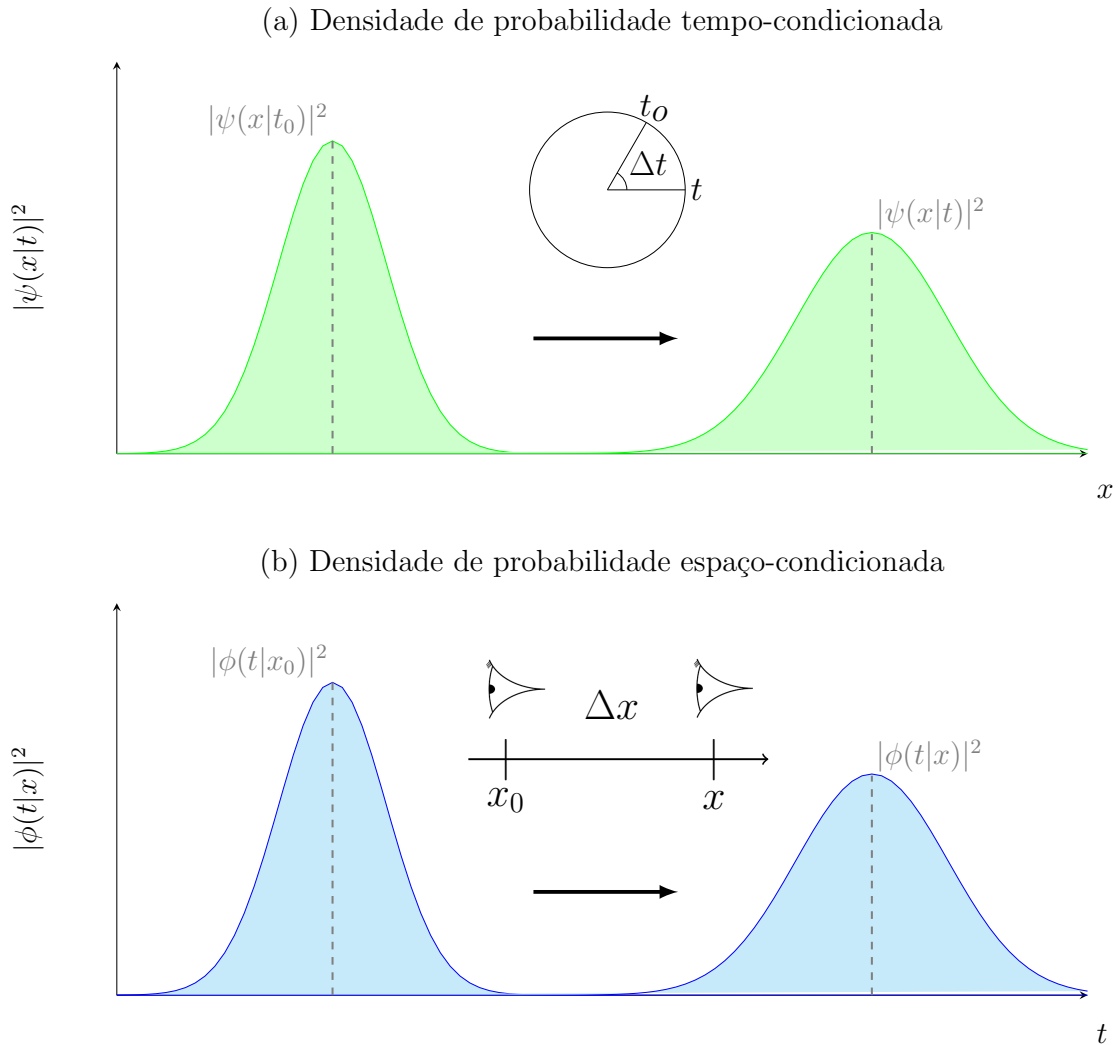
Vamos iniciar essa seção lembrando que os modelos existentes para o TOA ideal assumem que sua distribuição temporal é uma propriedade que depende apenas do estado quântico da partícula, $|\psi(t)\rangle$. Assim, se a extensão STS é uma teoria correta, devemos saber se é possível obter $|\phi(x)\rangle$ (que também visa prever TOA's ideais) apenas usando $|\psi(t)\rangle$ ou se $|\phi(x)\rangle$ contém informações sobre o sistema, sendo assim complementar à MQ.

Comecemos com a diferença física entre as notações $|\rangle|_t$ e $|\rangle|_x$. Quando se diz, por exemplo, que um sistema tem momento bem definido na MQ, implicitamente, está-se afirmando que $|\psi(t)\rangle = |P\rangle|_t$, ou seja, a partícula tem momento P no instante de tempo t . Portanto, autoestados na MQ referem-se à uma propriedade bem definida em um tempo fixo, justificando a notação $|\rangle|_t$. Por outro lado, na extensão STS, $|\phi^+(x)\rangle = |P\rangle|_x$ significa que a partícula tem momento P na posição x , ou seja, a partícula chega em x com momento P .

Para dar uma interpretação da solução da equação de Schrödinger EC (2.29), primeiramente, precisamos ter em mente a informação que a equação de Schrödinger dependente do tempo fornece: 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 $t > t_0$. Observe que o tempo é um parâmetro clássico externo (a hora do relógio do laboratório) e, portanto, pode ser escolhido com precisão arbitrária para avaliar o estado do sistema e suas probabilidades.

Conforme discutido na seção anterior, a extensão STS é formulada trocando os papéis de posição e tempo (e energia e momento) na MQ. Portanto, seguindo o mesmo raciocínio do parágrafo anterior sobre as soluções da equação de Schrödinger, e tomando $x \rightleftharpoons t$, a interpretação das soluções da equação de Schrödinger EC (2.30) torna-se a seguinte: Considerando uma função de onda EC “inicial” $\phi(t|x_0)$ — a amplitude de probabilidade da partícula chegar no instante t , dado que a posição “inicial” do detector é x_0 — a solução da Eq. (2.30), $\phi(t|x)$, é a amplitude de probabilidade da partícula chegar no instante t , dado que se move o detector para uma nova posição x . Para entender melhor esta interpretação, na Fig. 1, ilustramos a diferença entre a evolução temporal da MQ e a “evolução espacial” da sua extensão STS. Perceba que a condição “inicial” na extensão STS é na verdade uma condição de contorno para $\phi(t|x)$.

Figura 1 – Os dois sistemas descrevem diferentes situações físicas e têm diferentes propósitos experimentais; enquanto a densidade de probabilidade da mecânica quântica de Schrödinger (a) representada por $|\psi(x|t)|^2$ descreve uma situação em que medimos a posição de uma partícula dado um instante de tempo t , na teoria STS (b) representado por $|\phi(t|x)|^2$ medimos o tempo de chegada de uma partícula dada uma posição x no espaço.



Fonte: O autor (2023)

À primeira vista, pode-se pensar que a extensão STS não é projetada para responder ao problema tradicional TOA: Dada uma partícula com uma função de onda de momentos positivos em t_0 , $\psi(x|t_0)$, restrita à uma região $x < x^*$, quando essa partícula chega na posição x^* ? Seguindo a interpretação acima, assim como a equação de Schrödinger fornece translações temporais de uma função de onda previamente conhecida $\psi(x|t_0)$, a equação de Schrödinger EC (2.30) descreve translações espaciais de uma função de onda EC $\phi(t|x_0)$ que também deve ser conhecida. No entanto, se $\psi(x|t)$ e $\phi(t|x)$ compartilham informações comuns sobre outros observáveis, por exemplo, energia e/ou momento, $\psi(x|t_0)$ pode ajudar a descobrir $\phi(t|x_0)$ e vice-versa.

Com a discussão acima em mente, para buscar uma relação entre $|\psi(t)\rangle$ e $|\phi(x)\rangle$, devemos representá-los nas bases referentes à mesma grandeza física — que não são a mesma base, visto que se trata de espaços de Hilbert distintos (por exemplo, a base de energia/momento em $\mathcal{H}|_t$ é diferente da base de energia/momento em $\mathcal{H}|_x$). Precisamos decompor $|\psi(t)\rangle$ nos autoestados de momento se quisermos compará-lo com a Eq. (3.22). Sendo assim,

$$|\psi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dP \tilde{\psi}(P|t)|P\rangle|_t, \quad (3.23)$$

onde $|P\rangle|_t = 1/\sqrt{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{iPx/\hbar}|x\rangle|_t$. Observe que $|\tilde{\psi}(P|t)|^2$ — a densidade de probabilidade de medir a partícula com P , dado que a observação acontece em t — é independente do tempo apenas para a situação de partícula livre, onde

$$\tilde{\psi}(P|t) = \tilde{\psi}(P) e^{-iP^2t/(2m\hbar)}. \quad (3.24)$$

Por outro lado, para comparar $|\phi(x)\rangle$ com a Eq. (3.8), deve-se representá-lo nos autoestados de energia, ou seja,

$$|\phi(x)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dE \bar{\phi}(E|x)|E\rangle|_x, \quad (3.25)$$

onde ${}_x|\langle t|E\rangle|_x = 1/\sqrt{2\pi\hbar} \exp\{-iEt/\hbar\}$. Ressaltamos que $\bar{\phi}(E|x)$ é um vetor de duas componentes, $\bar{\phi}^{\pm}(E|x)$, e $|\bar{\phi}(E|x)|^2 = \bar{\phi}^{\dagger}(E|x)\bar{\phi}(E|x)$ é a densidade de probabilidade de medir a partícula com E , dado que a observação acontece em x . Para a situação de partícula livre (DIAS; PARISIO, 2017),

$$\bar{\phi}^{\pm}(E|x) = \bar{\phi}^{\pm}(E) e^{\pm i\sqrt{2mE}x/\hbar}. \quad (3.26)$$

No intuito de relacionar $|\psi(t)\rangle$ e $|\phi(x)\rangle$ usando a base de momento [Eqs. (3.11) e (3.23)], vamos comparar as amplitudes de probabilidade $\tilde{\phi}(P_b|x) = \langle P_b(x)|\phi(x)\rangle$ da Eq. (3.12) e $\tilde{\psi}(P|t) = {}_t|\langle P|\psi(x)\rangle$. Em geral, a impossibilidade de conectar essas duas funções de onda é porque enquanto $|\tilde{\psi}(P|t)|^2$ prevê dados experimentais sobre o momento da partícula coletados em um instante fixo t , independentemente da posição observada, $|\tilde{\phi}(P_b|x)|^2$ prevê dados sobre o momento coletados em uma posição fixa x , independentemente do tempo observado. Claramente, eles representam diferentes distribuições de probabilidade. Por exemplo, 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. Nessa situação, $\tilde{\phi}(P_{\pm}|x^*)$ da Eq. (3.21) é zero para todo P , enquanto $\tilde{\psi}(P, t) \neq 0$. Vemos que para vincular as funções de onda de momento, nós enfrentamos o mesmo problema de relacionar $\psi(x|t)$ e $\phi(t|x)$: enquanto $|\psi(t)\rangle$ descreve observáveis em um determinado instante de tempo, $|\phi(x)\rangle$ descreve os mesmos observáveis, mas em uma determinada posição.

Vamos focar a discussão acima na situação mais simples possível, uma partícula livre com momentos positivos $P^+ = P > 0$ que sempre chega a um determinado ponto x^* , ou seja, $\langle \phi(x^*) | \phi(x^*) \rangle = 1$. Essa situação é descrita pela solução (3.22) com $\tilde{\phi}^-(P) = 0$. À medida que todo o pacote de onda $\psi(x|t)$ passa por x^* , todos os momentos possíveis da distribuição independente do tempo $|\tilde{\psi}(P|t)|^2 = |\tilde{\psi}(P)|^2$ podem ser medidos se um detector estiver em x^* . Nesse cenário, pode-se esperar que $|\tilde{\psi}(P)|^2$ seja igual a $|\tilde{\phi}(P_+|x^*)|^2 = |\tilde{\phi}^+(P)|^2$ (a probabilidade da partícula ter momento P , dado que é observada em x^* , independentemente do instante em que chega). Se também assumirmos que suas fases são as mesmas, ou seja, $\tilde{\phi}^+(P) = \tilde{\psi}(P)$ (o que não é uma suposição trivial), $\rho(t|x)$ da Eq. (2.33) torna-se a distribuição de Kijowski, conforme considerado na Ref. (DIAS; PARISIO, 2017) sem maiores justificativas. No entanto, vale notar que mesmo que $\tilde{\phi}(P) = \tilde{\psi}^+(P)$, $\phi(t|x)$ ainda representa informação complementar à MQ pois a equação de Schrödinger EC (2.30) ainda é necessária para obter a solução (3.22).

Da discussão desta seção, concluímos que, se a extensão STS estiver correta, sua informação não está totalmente incorporada no estado *intrínseco* da partícula $|\psi(t)\rangle$ (um estado de medição livre). Por outro lado, como é o objetivo de qualquer modelo de TOA ideal, esperamos que as previsões de $|\phi(t|x)|^2$ possam ser confirmadas tomando alguns limites de medidas ideais, onde detectores bem projetados e/ou relógios acoplados à partícula registram seu TOA. Para descrever essa situação utilizando a MQ usual, a informação de $|\phi(t|x)|^2$ deve estar contida no estado do relógio ($\rho_C \in \mathcal{H}_t$), e não no estado de medição livre ($\psi(t|x)$). Outra forma de recuperar $|\phi(t|x)|^2$ (se $\tilde{\phi}^\pm(P) = \tilde{\psi}(\pm P)$) a partir de um modelo operacional é através do cálculo da densidade de probabilidade temporal de detectar o primeiro fóton emitido quando um átomo de dois níveis entra em uma região iluminada por um laser (NAVARRO et al., 2003). Usando as técnicas de salto quântico e a “normalização de operador” (BRUNETTI; FREDENHAGEN, 2002), esta densidade de probabilidade torna-se a distribuição de Kijowski no limite de campo forte e decaimento rápido (HEGERFELDT; SEIDEL; MUGA, 2003).

4 SOLUÇÕES PARA $V = V(x)$ E O TOA DE UMA PARTÍCULA ATRAVES- SANDO UMA BARREIRA DE POTENCIAL

Neste capítulo iremos resolver a equação de Schrödinger EC para um potencial arbitrário independente do tempo. Em seguida, aplicaremos esta solução para prever o TOA de uma partícula atravessando uma barreira de potencial quadrada, assumindo que $\tilde{\phi}^+(P) = \tilde{\psi}(P)$ para uma partícula livre incidindo com momento $P > 0$. Também compararemos nossos resultados com uma generalização da distribuição de Kijowski (DELGADO; MUGA, 1997; LEÓN et al., 2000; BAUTE; EGUSQUIZA; MUGA, 2001) e discutiremos as consequências de assumir $\tilde{\phi}^+(P) = \tilde{\psi}(P)$.

4.1 SOLUÇÃO GERAL DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER EC PARA $V = V(x)$

A equação de Schrödinger EC (2.29) para um potencial arbitrário independente do tempo $V = V(x)$ torna-se mais simples usando a representação de energia, $\{|E\rangle|_x\}$. Substituindo a Eq. (3.25) na equação de Schrödinger EC (2.29), nos leva a

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} dE \sigma_z \bar{\phi}(E|x) \sqrt{2m[\hat{\mathbb{H}} - V(x)\hat{\mathbb{I}}]} |E\rangle|_x \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} dE i\hbar \frac{d\bar{\phi}(E|x)}{dx} |E\rangle|_x. \end{aligned} \quad (4.1)$$

Ao expandir o operador $\sqrt{\hat{\mathbb{H}} - V(x)\hat{\mathbb{I}}}$, para $V(x) \neq 0$, em séries de potência, nós obtemos

$$\sqrt{\hat{\mathbb{H}} - V(x)\hat{\mathbb{I}}} = \sum_{n=0}^{\infty} \binom{\frac{1}{2}}{n} i^{1-2n} [V(x)]^{\frac{1}{2}-n} \hat{\mathbb{H}}^n, \quad (4.2)$$

que aplicado em $|E\rangle|_x$ nos leva a

$$\begin{aligned} & \sum_{n=0}^{\infty} \binom{\frac{1}{2}}{n} i^{1-2n} [V(x)]^{1/2-n} \hat{\mathbb{H}}^n |E\rangle|_x \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \binom{\frac{1}{2}}{n} i^{1-2n} [V(x)]^{1/2-n} E^n |E\rangle|_x \\ &= \sqrt{E - V(x)} |E\rangle|_x. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Substituindo essa equação de volta na Eq. (4.1), e projetando a expressão resultante em $|E'\rangle|_x$, obtemos uma equação diferencial para $\bar{\phi}(E'|x)$ dada por

$$\sigma_z \sqrt{2m[E' - V(x)]} \bar{\phi}(E'|x) = -i \frac{d}{dx} \bar{\phi}(E'|x), \quad (4.4)$$

cuja solução de cada componente é tal que

$$\bar{\phi}^{\pm}(E|x) = \frac{\bar{\phi}^{\pm}(E|x_0)}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\pm i \int_{x_0}^x dx' \sqrt{2m[E-V(x')]/\hbar}}, \quad (4.5)$$

onde substituímos E' por E . Substituindo a Eq. (4.5) em $|\phi(x)\rangle$ da Eq. (3.25), e então projetando a expressão resultante em $|t\rangle|_x$, obtemos

$$\phi^{\pm}(t|x) = \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{\bar{\phi}^{\pm}(E|x_0)}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\pm i \int_{x_0}^x dx' \sqrt{2m[E-V(x')]/\hbar} - iEt/\hbar}. \quad (4.6)$$

Essa é a solução geral para a amplitude de probabilidade do TOA ideal na posição x de uma partícula sob a ação de $V = V(x)$. Tomando $V(x) = 0$, impondo a normalização no tempo, e mudando a variável de integração para $P_{\pm}$, recuperamos a solução de partícula livre cuja amplitude de probabilidade é dada pela Eq. (3.22).

Vale notar a semelhança entre a Eq. (4.6), válida para $V = V(x)$, e a solução da equação de Schrödinger para potenciais dependentes exclusivamente do tempo, $V = V(t)$, que é dado por

$$\psi(x|t) = \int_{-\infty}^{\infty} dP \frac{\tilde{\psi}(P|t_0)}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i \int_{t_0}^t dt' [P^2/(2m) + V(t')]/\hbar + iPx/\hbar}. \quad (4.7)$$

Aqui observamos que se pode ir de uma solução para a outra através da transformação $(t, P, H(t)) \rightarrow (x, E, \pm P(x))$, com $H(t)$ e $P(x)$ dados pelas expressões clássicas das Eqs. (2.20) e (2.28), respectivamente. Essa simetria fica ainda mais evidente ao identificar a ação clássica S na Eq. (4.6), para $V = V(x)$, e na Eq. (4.7), para $V = V(t)$, o que nos permite reescrevê-las como

$$\phi^{\pm}(t|x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dE \bar{\phi}^{\pm}(E|x_0) e^{-iS(E,x)/\hbar} \quad (4.8)$$

e também

$$\psi(x|t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dP \tilde{\psi}(P|t_0) e^{-iS(P,t)/\hbar}. \quad (4.9)$$

Usando a solução da Eq. (4.6), na próxima seção, vamos calcular a distribuição TOA de uma partícula atravessando uma barreira de potencial.

4.2 COMPARANDO AS PREVISÕES DO STS COM UMA GENERALIZAÇÃO DA DISTRIBUIÇÃO DE KIJOWSKI

Aplicamos a solução (4.6) à uma partícula livre preparada muito à esquerda da origem e detectada após cruzar uma barreira quadrada de altura V_0 , largura L e localizada no intervalo

$0 < x < L$. A partícula inicialmente tem um estado na MQ usual dado por um pacote de onda gaussiano centrado em x_i ($\hbar = 1$),

$$\psi(x|t_i) = \frac{1}{(2\pi\delta^2)^{1/4}} e^{-[(x-x_i)/(2\delta)-iP_i\delta]^2 - P_i^2\delta^2}, \quad (4.10)$$

onde $\psi(x|t_i) = {}_t\langle x|\psi(t_i)\rangle$. Aqui x_i , P_i e δ assumirão valores tais que o pacote esteja à esquerda da origem e tenha apenas momentos positivos. Nesse contexto, para calcular o TOA no lado da transmissão usando a interpretação da equação de Schrödinger EC dada na seção anterior, devemos aplicar a solução (4.6) à uma amplitude de probabilidade inicial do TOA, $\phi(t|x_0)$, com x_0 localizado no lado esquerdo da barreira, $x_i < x_0 \leq 0$. Consideramos $\psi(x_0|t_i) \approx 0$, significando que no tempo t_i , a partícula não chegou a x_0 . Conforme discutido na Sec. (3.2), uma vez que a partícula viaja livremente no lado esquerdo da barreira e sempre passa pelo ponto x_0 , vamos assumir que $|\phi(t|x_0)|^2$ é a distribuição de Kijowski (2.33), ou seja, $\tilde{\phi}^+(P) = \tilde{\psi}(P)$, onde $\tilde{\psi}(P)$ é a função de onda de momento de $\psi(x|t_i)$,

$$\tilde{\psi}(P) = \left(\frac{2\delta^2}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\delta^2(P-P_i)^2 - iP_i x_i}. \quad (4.11)$$

Note que na formulação atual da extensão STS, $\phi^+(t|x)$ e $\phi^-(t|x)$ obedecem a duas equações independentes. Portanto, 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 essa independência entre $\phi^+(t|x)$ e $\phi^-(t|x)$ no final desta seção. Usando as Eqs. (3.22) e (4.11) nessas circunstâncias, a condição “inicial” em x_0 da função de onda EC torna-se

$$\phi^+(t|x_0) = \int_0^\infty dP \tilde{\psi}(P) \sqrt{\frac{|P|}{2\pi m\hbar}} e^{iPx_0/\hbar - iP^2t/(2m\hbar)}, \quad (4.12)$$

onde $P = \sqrt{2mE}$. Para aplicar a solução EC (4.6) à $\phi^+(t|x_0)$, temos que descobrir $\bar{\phi}^+(E|x_0)$ para essa condição “inicial” particular. Considerando $x_0 = 0$, Eq. (4.6) em $x = x_0$, onde $V(x_0) = 0$, se reduz a

$$\phi^+(t|x_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^\infty dE \bar{\phi}^+(E|x_0) e^{-iEt/\hbar}. \quad (4.13)$$

Mudando a variável de integração P na Eq. (4.12) para E , e comparando a expressão resultante com a Eq. (4.13), identificamos

$$\bar{\phi}^+(E|x_0) = \Theta(E) \left(\frac{m}{2E}\right)^{1/4} \tilde{\psi}(\sqrt{2mE}), \quad (4.14)$$

onde $\Theta(E)$ é a função degrau de Heaviside. Finalmente, substituindo a Eq. (4.14) na função de onda EC (4.6) para a barreira de potencial quadrada, e calculando em $x > L$, obtemos

$$\begin{aligned} \phi^+(t|x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left(\frac{m}{2E} \right)^{1/4} \tilde{\psi}(\sqrt{2mE}) \\ &\times e^{i\sqrt{2m(E-V_0)}L/\hbar + i\sqrt{2mE}(x-L)/\hbar - iEt/\hbar}. \end{aligned} \quad (4.15)$$

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

O fato de considerarmos $\tilde{\phi}^+(P) = \tilde{\psi}(P)$ para a partícula incidente, nos permite calcular o tempo de chegada após a barreira usando a extensão STS de outra forma. Como a partícula transmitida sempre passa por $x > L$ e ela também está livre nessa região, podemos considerar também $\tilde{\phi}_T^+(P) = \tilde{\psi}_T(P)$, onde $\tilde{\phi}_T^+(P)$ é o coeficiente da Eq. (3.22) para $x > L$ e $\tilde{\psi}_T(P) = T(P)\tilde{\psi}(P)$ é a função de onda de momento do pacote transmitido, com

$$T(P) = \frac{4PP'e^{-i(P-P')L/\hbar}}{(P+P')^2 - e^{2iP'L/\hbar}(P-P')^2} \quad (4.16)$$

sendo o coeficiente de transmissão e $P' = \sqrt{P^2 - 2mV_0}$. Substituindo $\tilde{\psi}_T(P)$ na Eq. (2.33), com $\tilde{\phi}^-(P) = 0$, $\rho(t|x)$ torna-se

$$\begin{aligned} \Pi_K^N(t|x) &= \frac{1}{\int_0^\infty dP |T(P)\tilde{\psi}(P)|^2} \\ &\times \frac{\hbar}{2\pi m\hbar} \left| \int_0^\infty dP T(P)\tilde{\psi}(P) e^{-i\hbar P^2 t/(2m\hbar) + i\hbar P(x-L)/\hbar} \right|^2. \end{aligned} \quad (4.17)$$

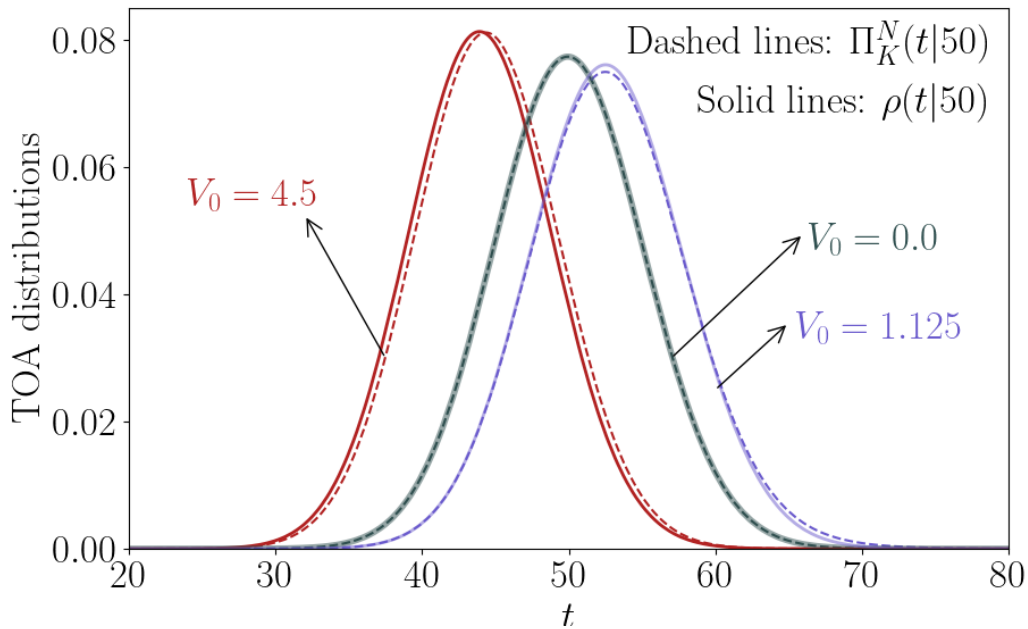
Note que aqui usamos que a probabilidade da partícula chegar em x , independentemente do tempo ($\langle \phi(x)|\phi(x) \rangle$) é igual a probabilidade da partícula ser transmitida ($(\int_0^\infty dP |T(P)\tilde{\psi}(P)|^2)$). A equação (4.17) é a distribuição Kijowski normalizada para o pacote 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. Essa abordagem já foi considerada anteriormente na Ref. (XIMENES; PARISIO; DIAS, 2018). Nesse trabalho, é mostrado que para um experimento eletromagnético que simula o tunelamento quântico (RANFAGNI et al., 1991), o tempo médio de percurso obtido via Eq. (4.17) concorda melhor com os dados experimentais do que os modelos Büttiker-Landauer e o *phase-time*.

Vale destacar que a Eq.(4.17) foi obtida por diferentes métodos usando a MQ usual (DELGADO; MUGA, 1997; LEÓN et al., 2000; BAUTE; EGUSQUIZA; MUGA, 2001). Em particular, ela surge do mesmo modelo operacional discutido no final do 3, o qual computa o tempo de

detecção do primeiro fóton emitido quando um átomo de dois níveis entra em uma região iluminada por um laser. Nessa situação, quando se adiciona uma barreira de potencial quadrada e se toma os limites de um campo de laser forte e decaimento rápido, a distribuição de TOA em $x > L$ torna-se a Eq. (4.17) para as partículas transmitidas (HEGERFELDT et al., 2004).

Abaixo comparamos as distribuições do TOA das Eqs. (4.15) e (4.17) e investigamos se as suposições $\tilde{\phi}^+(P) = \tilde{\psi}(P)$ e $\tilde{\phi}_T^+(P) = \tilde{\psi}_T(P)$ levam a inconsistências na extensão STS.

Figura 2 – 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 (tracejada) ilustra a previsão de $\rho(t|x)$ ($\Pi_K^N(t|x)$). Note que essas distribuições discordam no regime de tunelamento.



Fonte: O autor (2023)

Nós plotamos a distribuição de probabilidade de TOA na figura acima usando os mesmos parâmetros físicos de Ref. (LEÓN et al., 2000). Essa referência também utiliza a condição inicial (4.10) e obtém a Eq. (4.17) através de uma transformação canônica do TOA quântico da partícula livre. A largura da barreira é $L = 10$, o detector está em $x = 50$, e os parâmetros do pacote de onda inicial (4.10) são $x_i = -50$, $P_0 = 2$, $\delta = 10$, e $m = 1$. Note que a energia média da partícula incidente é $E_0 = P_0^2/(2m) = 2$. As curvas contínuas e tracejadas na Fig. 2 mostram a distribuição de TOA em $x = 50$ usando as Eqs. (4.15) e (4.17), respectivamente, para $V_0 = 0$, $V_0 = 1.125 (< E_0)$, e um regime de tunelamento com $V_0 = 4.5 (> E_0)$. Note que o TOA de uma partícula clássica livre com velocidade $P_0/m = 2$ é 50, já que o comprimento total do caminho da partícula é de 100 unidades.

Analisando a Fig. 2, observamos em primeiro lugar que, em comparação com a situação da partícula livre, $V_0 = 0$, ambas as curvas contínua e tracejada ilustram um atraso do TOA para $V_0 = 1.125$ e um adiantamento para $V_0 = 4.5$. Esse adiantamento é responsável pelo efeito Hartman (HARTMAN, 2004), como discutido em Ref. (LEÓN et al., 2000). Além disso, enquanto as expressões (4.15) e (4.17) são iguais para $V_0 = 0$, elas prevêm tempos de chegada muito semelhantes quando $V_0 \neq 0$. Verificamos que quanto maior o valor de V_0 , mais próximas as curvas contínua e tracejada se tornam, de modo que são visualmente indistinguíveis para $V_0 \gtrsim 20$ na escala da Fig. 2. Para mais detalhes sobre as previsões da Eq. (4.17) (e, consequentemente, o comportamento típico da Eq. (4.15)), sugerimos uma consulta detalhada à Ref. (LEÓN et al., 2000).

A leve discordância da Fig. 2 mostra que, se ambas as relações $\tilde{\phi}(P) = \tilde{\psi}(P)$ e $\tilde{\phi}_T(P) = \tilde{\psi}_T(P)$ estiverem corretas, algum cálculo e/ou interpretação da extensão STS deve ser reformulado de alguma forma. No entanto, se $\tilde{\phi}(P) \neq \tilde{\psi}(P)$ e/ou $\tilde{\phi}_T(P) \neq \tilde{\psi}_T(P)$, a solução (4.15) ainda pode ser válida. Em última análise, o formalismo correto (se houver) da extensão STS será definido ao se descobrir como $\phi(t|x)$ pode ser efetivamente medida no laboratório. Acreditamos que uma investigação mais elaborada das previsões da Eq. (4.6) deve ser realizada, incluindo comparações com outras abordagens de TOA na presença de interação e com o experimento da Ref. (RAMOS et al., 2020). Por exemplo, Ref. (HEGERFELDT et al., 2004) obtém outra generalização da distribuição de Kijowski similar à Eq. (4.17), mas com $\tilde{\psi}_T(P) = T(P)\tilde{\psi}(P)/|T(P)|$. Esperamos que essa análise ajude também a esclarecer a validade das relações usadas acima.

5 CONCLUSÃO E CONSIDERAÇÕES FINAIS

Nesta dissertação, revisitamos a ideia de que o problema do tempo na mecânica quântica está enraizado na objeção de Pauli, que questiona a relação de comutação entre operadores de tempo e energia. Essa objeção impulsionou o desenvolvimento de diversas abordagens para incorporar um operador tempo na mecânica quântica. No entanto, todas elas exigem o abandono da hermiticidade ou da relação de comutação com hamiltoniano. Além disso, o problema do tempo transcende a não existência de um operador auto adjunto temporal, pois envolve também o conceito de tempo de chegada, que não pode ser adequadamente definido no âmbito da mecânica quântica convencional.

Com esses fatos em mente, exploramos a extensão STS e as previsões de seus estados "espaço-condicionais" (EC) para potenciais arbitrários, comparando-as com as previsões "tempo-condicionais" da MQ usual. Vimos no Cap. 2 que o estado quântico (EC) $|\phi(x)\rangle$ definido em cada ponto do espaço é intrínseco à partícula, e quando expandido na base tempo, seus coeficientes representam a amplitude de probabilidade de TOA ideal na posição x . Ao investigarmos no Cap. 3 o comportamento da equação de autovalor do momento para um potencial arbitrário, constatamos que para potenciais dependentes do espaço, estados com momento bem definido dependem da posição, da mesma forma que estados com energia bem definida na MQ usual dependem do tempo para potenciais dependentes do tempo.

Buscamos então nesse trabalho apresentar uma interpretação clara para a equação de Schrödinger EC. Trabalhamos com a ideia que dada uma função de onda EC "inicial" $\phi(t|x_0)$, a solução $\phi(t|x)$ é a amplitude de probabilidade da partícula chegar no instante t , dado que iremos agora detectar a mesma em uma nova posição x . Além disso, tentamos estabelecer uma relação entre os estados TC ($|\psi(t)\rangle$) e EC ($|\phi(x)\rangle$). Para essa comparação utilizamos amplitudes de probabilidade $\tilde{\phi}(P_b|x)$ e $\tilde{\psi}(P|t)$ da base de momento. O problema é que essas duas funções de onda representam diferentes distribuições de probabilidade: enquanto $|\tilde{\psi}(P|t)|^2$ prevê dados experimentais sobre o momento da partícula coletados em um instante fixo t , independentemente da posição observada, $|\tilde{\phi}(P_b|x)|^2$ prevê dados coletados sobre o momento em uma posição fixa x , independentemente do tempo observado. A partir disso, ficou claro que se a extensão STS é uma teoria correta, ela deve fornecer informação complementar à MQ. Por fim, ao resolver a Eq. de Schrödinger EC para um potencial arbitrário $V = V(x)$ e aplicar para uma barreira de potencial, pudemos comparar seu comportamento com uma

generalização da distribuição de Kijowski. Concluimos que a diferença observada entre essas distribuições pode indicar que a extensão STS precisa de alguma forma ser reformulada.

Uma perspectiva de mudança da extensão STS é através do acoplamento das funções de onda EC $\phi^+(t|x)$ e $\phi^-(t|x)$, permitindo a interferência entre momentos positivos e negativos. Pretendemos também investigar modelos operacionais do TOA (via a MQ tradicional) que, ao assumir algumas idealizações dos equipamentos de medida, resultem nas previsões do TOA ideal fornecida pela extensão STS. Por fim, uma generalização natural da extensão STS é estender suas equações para descrever o TOA em três dimensões e considerar efeitos relativísticos.

REFERÊNCIAS

- AHARONOV, Y.; BOHM, D. Time in the quantum theory and the uncertainty relation for time and energy. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 122, p. 1649–1658, Jun 1961. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.122.1649>>.
- ALLCOCK, G. *The time of arrival in quantum mechanics II. The individual measurement*. 1969. 286-310 p. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0003491669902528>>.
- BAUTE, A. D.; EGUSQUIZA, I. L.; MUGA, J. G. Time-of-arrival distributions for interaction potentials. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 64, p. 012501, Jun 2001. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.64.012501>>.
- BRUNETTI, R.; FREDENHAGEN, K. Time of occurrence observable in quantum mechanics. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 66, p. 044101, Oct 2002. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.66.044101>>.
- BUSCH, P. The time–energy uncertainty relation. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, p. 73–105, 2008. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/978-3-540-73473-4_3>.
- BUTTIKER, M. *The Local Larmor Clock, Partial Densities of States, and Mesoscopic Physics*. 2001. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/quant-ph/0103164>>.
- BÜTTIKER, M.; LANDAUER, R. Traversal time for tunneling. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 49, p. 1739–1742, Dec 1982. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.49.1739>>.
- DAS, S.; NÖTH, M. Times of arrival and gauge invariance. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, The Royal Society, v. 477, n. 2250, jun 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.1098/rspa.2021.0101>>.
- DAS, S.; STRUYVE, W. Questioning the adequacy of certain quantum arrival-time distributions. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 104, p. 042214, Oct 2021. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.104.042214>>.
- DAVA SOBEL, D. *Longitude: The True Story of a Lone Genius Who Solved the Greatest Scientific Problem of His Time*. 1947. Disponível em: <https://www.goodreads.com/author/quotes/3277.Dava_Sobel>. Acesso em: 15 out. 1947.
- DELGADO, V.; MUGA, J. G. Arrival time in quantum mechanics. *Physical Review A*, American Physical Society (APS), v. 56, n. 5, p. 3425–3435, nov 1997. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.56.3425>>.
- DIAS, E. O.; PARISIO, F. Space-time-symmetric extension of nonrelativistic quantum mechanics. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 95, p. 032133, Mar 2017. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.95.032133>>.
- HALLIWELL, J.; YEARSLEY, J. Quantum arrival time formula from decoherent histories. *Physics Letters A*, Elsevier BV, v. 374, n. 2, p. 154–157, dec 2009. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.physleta.2009.10.077>>.

HALLIWELL, J. J. Arrival Times in Quantum Theory from an Irreversible Detector Model. *Progress of Theoretical Physics*, v. 102, n. 4, p. 707–717, 10 1999. ISSN 0033-068X. Disponível em: <<https://doi.org/10.1143/PTP.102.707>>.

HARTMAN, T. E. Tunneling of a Wave Packet. *Journal of Applied Physics*, v. 33, n. 12, p. 3427–3433, 06 2004. ISSN 0021-8979. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.1702424>>.

HEGERFELDT, G. C.; SEIDEL, D.; MUGA, J. G. Quantum arrival times and operator normalization. *Physical Review A*, American Physical Society (APS), v. 68, n. 2, aug 2003. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.68.022111>>.

HEGERFELDT, G. C.; SEIDEL, D.; MUGA, J. G.; NAVARRO, B. Operator-normalized quantum arrival times in the presence of interactions. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 70, p. 012110, Jul 2004. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.70.012110>>.

KIJOWSKI, J. On the Time Operator in Quantum Mechanics and the Heisenberg Uncertainty Relation for Energy and Time. *Rept. Math. Phys.*, v. 6, p. 361–386, 1974. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0034487774800042>>.

KIJOWSKI, J. Comment on “arrival time in quantum mechanics” and “time of arrival in quantum mechanics”. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 59, p. 897–899, Jan 1999. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.59.897>>.

LANDAUER, R.; MARTIN, T. Barrier interaction time in tunneling. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 66, p. 217–228, Jan 1994. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.66.217>>.

LARA, A. J. de; BEIMS, M. W. *Fractional integrodifferential equations and (anti-)hermiticity of time in a spacetime-symmetric extension of nonrelativistic Quantum Mechanics*. 2022. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/2212.13217>>.

LEAVENS, C. R. Bohm trajectory approach to timing electrons. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, p. 129–162, 2008. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/978-3-540-73473-4_5>.

LEÓN, J.; JULVE, J.; PITANGA, P.; URRÍES, F. J. de. Time of arrival through a quantum barrier. *arXiv: Quantum Physics*, 1999. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/quant-ph/9903060>>.

LEÓN, J.; JULVE, J.; PITANGA, P.; URRÍES, F. J. de. Time of arrival in the presence of interactions. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 61, p. 062101, May 2000. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.61.062101>>.

MARCHEWKA, A.; SCHUSS, Z. Feynman integrals with absorbing boundaries. *Physics Letters A*, v. 240, n. 4, p. 177–184, 1998. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960198001078>>.

MARCHEWKA, A.; SCHUSS, Z. Path-integral approach to the schrödinger current. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 61, p. 052107, Apr 2000. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.61.052107>>.

MARCHEWKA, A.; SCHUSS, Z. Measurement as absorption of feynman trajectories: Collapse of the wave function can be avoided. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 65, p. 042112, Apr 2002. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.65.042112>>.

MUGA, G.; MAYATO, R.; EGUSQUIZA, I. *Time in Quantum Mechanics*. Springer Berlin Heidelberg, 2007. (Lecture Notes in Physics). ISBN 9783540734734. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=fV1uCQAAQBAJ>>.

MUGA, G.; RUSCHHAUPT, A.; CAMPO, A. *Time in Quantum Mechanics* -. Springer Berlin Heidelberg, 2010. (Lecture Notes in Physics, v. 2). ISBN 9783642031755. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=uQfwd09A4AkC>>.

MUGA, J.; BROUARD, S.; MACIAS, D. Time of arrival in quantum mechanics. *Annals of Physics*, v. 240, n. 2, p. 351–366, 1995. ISSN 0003-4916. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003491685710482>>.

NAVARRO, B.; EGUSQUIZA, I. L.; MUGA, J. G.; HEGERFELDT, G. C. Optimal atomic detection of ultracold atoms by control of detuning and spatial dependence of laser intensity. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, IOP Publishing, v. 36, n. 19, p. 3899–3907, sep 2003. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088%2F0953-4075%2F36%2F19%2F002>>.

OLKHOVSKY, V. S.; RECAMI, E.; JAKIEL, J. Unified time analysis of photon and particle tunnelling. *Physics Reports*, Elsevier BV, v. 398, n. 3, p. 133–178, aug 2004. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.physrep.2004.06.001>>.

PUBLICO, D. A. L.; GALAPON, E. A. Quantum traversal time across a potential well. *Physical Review A*, American Physical Society (APS), v. 101, n. 2, feb 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103%2Fphysreva.101.022103>>.

PAGE, D. N.; WOOTTERS, W. K. Evolution without evolution: Dynamics described by stationary observables. *Phys. Rev. D*, American Physical Society, v. 27, p. 2885–2892, Jun 1983. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.27.2885>>.

PODLUBNY, I. *Fractional Differential Equations: An Introduction to Fractional Derivatives, Fractional Differential Equations, to Methods of Their Solution and Some of Their Applications*. Elsevier Science, 1998. (Mathematics in Science and Engineering). ISBN 9780125588409. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=F1idIAEACAAJ>>.

PRIVITERA, G.; SALESI, G.; OLKHOVSKY, V. S.; RECAMI, E. *Tunnelling times: An elementary introduction*. 2004. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/quant-ph/0412146>>.

RAMOS, R.; SPIERINGS, D.; RACICOT, I.; STEINBERG, A. Measurement of the time spent by a tunnelling atom within the barrier region. *Nature*, v. 583, p. 529–532, 07 2020.

RANFAGNI, A.; MUGNAI, D.; FABENI, P.; PAZZI, G. P. Delay-time measurements in narrowed waveguides as a test of tunneling. *Applied Physics Letters*, v. 58, n. 7, p. 774–776, 1991. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.104544>>.

RONCALLO, S.; SACHA, K.; MACCONE, L. When does a particle arrive? *Quantum*, Verein zur Forderung des Open Access Publizierens in den Quantenwissenschaften, v. 7, p. 968, mar 2023. Disponível em: <<https://doi.org/10.22331%2Fq-2023-03-30-968>>.

SAKURAI, J. J.; NAPOLITANO, J. *Modern Quantum Mechanics*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2017.

SOKOLOVSKI, D. Why does relativity allow quantum tunnelling to 'take no time'? *Proceedings: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, The Royal Society, v. 460, n. 2042, p. 499–506, 2004. ISSN 13645021. Disponível em: <<http://www.jstor.org/stable/4143133>>.

SOKOLOVSKI, D.; CONNOR, J. N. L. Quantum interference and determination of the traversal time. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 47, p. 4677–4680, Jun 1993. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.47.4677>>.

STEVENS, K. W. H. A one-dimensional barrier and time-dependent tunnelling. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, v. 16, n. 19, p. 3649, jul 1983. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/0022-3719/16/19/006>>.

WIGNER, E. P. Lower limit for the energy derivative of the scattering phase shift. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 98, p. 145–147, Apr 1955. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.98.145>>.

XIMENES, R.; PARISIO, F.; DIAS, E. O. Comparing experiments on quantum traversal time with the predictions of a space-time-symmetric formalism. *Physical Review A*, American Physical Society (APS), v. 98, n. 3, sep 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.98.032105>>.