

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
E MATEMÁTICA APLICADA

MECÂNICA ESTATÍSTICA DE UMA PARTÍCULA
ESCALAR NA CAIXA

Marco Aparecido de Brito

Itajubá, fevereiro de 2012

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
E MATEMÁTICA APLICADA

Marco Aparecido de Brito

MECÂNICA ESTATÍSTICA DE UMA PARTÍCULA
ESCALAR NA CAIXA

Dissertação submetida ao programa de Pós-Graduação em Física e Matemática Aplicada como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Ciências em Física e Matemática Aplicada.

Área de concentração: Teoria de Campos, Gravitação e Cosmologia

Orientador: Dr. Edisom de Souza Moreira Junior

Fevereiro de 2012
Itajubá - MG

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Mauá ó
Bibliotecária Cristiane N. C. Carpinteiro- CRB_6/1702

B862m

Brito, Marco Aparecido de
Mecânica estatística de uma partícula escalar na caixa. / por Marco
Aparecido de Brito. -- Itajubá (MG) : [s.n.], 2012.

59 p. : il.

Orientador: Prof. Dr. Edisom de Souza Moreira Junior
Dissertação (Mestrado) ó Universidade Federal de Itajubá.

1. Partícula na caixa. 2. Mecânica estatística clássica. 3. Mecânica
estatística quântica. I. Moreira Junior, Edisom de Souza, orient. II.
Universidade Federal de Itajubá. III. Título.

(“(...)Consegui meu equilíbrio cortejando a insanidade, tudo está perdido mas existem possibilidades.(...)”)
(Legião Urbana)

(“Aprenda com os erros dos outros. Você não vive tempo suficiente para cometer todos os erros.”)
(Desconhecido)

(“Sou imperfeito e limitado, por isso sou real, senão seria ideal.”)

Agradecimentos

Ao Professor e orientador Edison Moreira Jr., pelas incontáveis discussões sobre a maravilhosa ciência física, e pelas diversas sugestões na confecção do presente estudo.

À minha família e amigos, pelo apoio e incentivo, aparentemente tênue, mas singular e essencial. Aos colegas de mestrado, pelas preciosas oportunidades de discussões sobre temas diversos num nível tão intenso e profundo.

Aos tantos professores que me guiaram por este caminho tão árduo, mas tão belo e maravilhoso, como os professores Vitorio de Lorenci, Fabrício Rangel, Renato Klippert, entre tantos outros que não caberiam aqui neste pequeno pedaço de papel. À toda comunidade UNIFEI por suas ocultas e importantes contribuições.

Ao suporte financeiro concedido pela agência de fomento CAPES.

Resumo

No presente trabalho faremos uma análise do comportamento das grandezas físicas perante a mudança de temperatura, tal como o calor específico, para o sistema de uma partícula escalar confinada na caixa unidimensional. Determinaremos as médias termodinâmicas nos vários regimes de temperatura associados com as temperaturas características do sistema em questão, assim como as densidades de posição e de momento, com o intuito de prevermos o comportamento da partícula dentro da caixa.

Também faremos uma breve discussão sobre o tópico criação de pares. Tal efeito ocorre quando há uma quantidade apreciável de energia térmica. Mostraremos como as populações de partícula e antipartícula se comportam dentro de uma caixa quando aumentamos a temperatura. Alguns aspectos serão também discutidos no contexto da teoria quântica de campos.

Palavras-chave: partícula na caixa, mecânica estatística clássica, mecânica estatística quântica.

Abstract

In this work we will find how physical quantities associated with a scalar particle confined in an one-dimensional box depend on the temperature. Thermal averages will be determined in various regimes of temperature associated with the characteristic temperatures of the system. In order to have a clearer picture of the behaviour of the particle in the box, the position and momentum densities will be determined.

At very high thermal energies pair creation takes place. This topic will briefly be discussed, showing how the particle and antiparticle populations behave as the temperature increases. Some aspects will also be considered in the context of quantum field theory.

Keywords: particle in the box, classical statistical mechanics, quantum statistical mechanics.

Índice

Agradecimentos	iv
Resumo	v
Abstract	v
Índice	vii
Lista de Figuras	ix
1 Introdução	1
2 Equação de Klein-Gordon	3
2.1 Notação e Quadrivetores	5
2.2 Equação de Klein-Gordon	7
2.2.1 Quadricorrente e Estados de Energia	8
2.2.2 Limite Não-Relativístico	10
2.3 Solução para uma Partícula Confinada na Caixa	11
2.4 Paradoxo de Klein	13
3 Tópicos em Mecânica Estatística Relativística	17
3.1 Gás Clássico Relativístico Ideal	19
3.2 Equilíbrio Termodinâmico e Produção de Pares	21
3.3 Gás de Bose Ultrarrelativístico	24
4 Mecânica Estatística de uma Partícula na Caixa em uma Dimensão	27
4.1 Mecânica Estatística de uma Partícula Clássica Relativística na Caixa . . .	27
4.2 Partícula Quântica Não-Relativística na Caixa	31
4.2.1 Representação de Coordenada	32
4.2.2 Representação de Momento	33

4.3	Mecânica Estatística de uma Partícula Quântica Não-Relativística na Caixa	35
4.4	Partícula Quântica Relativística na Caixa	39
4.4.1	Representação de Coordenada	39
4.4.2	Representação de Momento	41
4.5	Mecânica Estatística de uma Partícula Quântica Relativística na Caixa . .	42
5	Conclusões e Perspectivas	53
A	Algumas Propriedades Úteis da Função de Kelvin	55
	Referências Bibliográficas	57

Lista de Figuras

1.1	Na primeira etapa (A), as ligações na gaiola C_{60} são quebradas quimicamente. Na segunda etapa (B), uma molécula dopante é introduzida através do orifício. Na terceira etapa (C), a “gaiola” C_{60} é restaurada quimicamente para dar ao produto final endoédrico. Figura retirada da Ref. [10].	2
2.1	Uma partícula de energia E , que viaja da esquerda para a direita, espalhada por um potencial tipo degrau como descrito no texto. Figura baseada na Ref. [20].	13
3.1	Comparação entre a proporção de população de partículas e antipartículas com o aumento da temperatura, neste exemplo foi usado o seguinte valor $n\lambda_c^3 = 10^{-10}$ para confecção do gráfico.	23
4.1	Comparação entre a velocidade térmica relativística, limitada à velocidade da luz no vácuo c , e não-relativística, não limitada.	30
4.2	Densidade de probabilidade quântica $\rho_n(p)$, para $n \gg 1$	34
4.3	Podemos verificar como a densidade de probabilidade para a posição varia como o aumento da temperatura, para a temperatura nula temos que a densidade é dada pelo estado fundamental e para temperaturas altas a densidade tende a $1/a$	38
4.4	Verificamos como varia a densidade de probabilidade para o momento com o aumento da temperatura. Para a temperatura nula temos que a densidade corresponde aquela do estado fundamental, e para temperaturas altas a densidade tende a uma gaussiana.	39
4.5	Regiões de interesse, para análise das grandezas termodinâmicas. A temperatura é comparada com as temperaturas características do sistema. Um esquema semelhante é encontrado na Ref. [7].	43

- 4.6 Energia interna menos a energia de repouso. A curva em amarelo se refere à partícula de massa nula e esta tende a ficar paralela a curva preta de inclinação igual à 1. A curva dourada se refere a uma partícula de massa muito grande ($\Theta_m/\Theta_a = 10^3$) e tem um regime ($T \ll \Theta_a$) onde a curva dourada tende a se alinhar com a curva vermelha, com inclinação igual à 1/2, e um outro regime, quando $T \gg \Theta_a$, onde a curva dourada tende a ficar paralela a curva preta. Para as outras curvas entre a amarela e a dourada, a única característica que muda entre elas é a massa, onde mais superior a curva menos massiva a partícula, exceto as curvas pretas e vermelhas. 45
- 4.7 Entropia. A curva em vermelho se refere a partícula de massa nula e tem dois regimes quânticos, um não-relativístico e outro relativístico, e um regime clássico relativístico. A curva em amarela refere-se a uma partícula muito massiva e tem dois regimes não-relativístico um quântico e outro clássico e um outro regime relativístico. Porém todas as curvas obedecem à terceira lei da termodinâmica. 46
- 4.8 Calor específico. A curva em amarelo se refere a uma partícula de massa nula e verificamos a inexistência de um regime clássico não-relativístico. A curva em vermelho se refere a uma partícula não-relativística. Para as outras curvas entre a amarela e a vermelha, a única característica que as diferenciam é a massa correspondente. Quanto mais superior a curva, menor a massa da partícula. Partículas com grandes massas possuem regimes não-relativísticos, onde as curvas correspondentes se alinham sobre a curva em vermelho por alguma faixa de temperatura. Porém todas as curvas tendem ao mesmo limite, ou seja, a 1, para T muito grande, exceto a curva em vermelho que tende a 1/2 ($m \rightarrow \infty$). 47
- 4.9 Densidade de probabilidade para a posição, no regime não-relativístico, $T \ll \Theta_m$, ilustrando como esta varia com o aumento da temperatura. Para temperatura nula a densidade é dada por aquela correspondente ao estado fundamental, e para temperaturas altas a densidade tende a $1/a$ 49
- 4.10 Densidade de probabilidade para a posição em função da temperatura, no regime ultrarrelativístico, $T \gg \Theta_m$. Como anteriormente para temperatura nula o comportamento é aquele correspondente ao estado fundamental. Para temperaturas altas, a densidade tende a $1/a$, mudando apenas a forma de sua evolução comparando com o caso anterior. 50
- 4.11 Densidade de probabilidade para o momento em função da temperatura, no regime não-relativístico, $T \ll \Theta_m$. Para a temperatura nula, a densidade é aquela do estado fundamental, e para altas temperaturas a mesma tende a uma gaussiana. . . 51

4.12 Densidade de probabilidade para o momento, no regime ultrarrelativístico, $T \gg \Theta_m$. Para temperatura nula, temos que a densidade é aquela associada ao estado fundamental. Para temperaturas altas, a densidade tende a exponencial do módulo do argumento. 51

Capítulo 1

Introdução

Efeitos em altas energias para um determinado sistema físico requerem um tratamento quântico e relativístico do sistema físico. Nas últimas décadas, este campo de pesquisa tem crescido de forma abrupta e já existem muitos artigos dedicados a assuntos desta natureza. Tais assuntos estão relacionados à temas de interesses astrofísicos (anãs brancas, pulsares, estrelas de nêutron, etc.) [1, 2, 3, 4], à física de partículas elementares (produção de pares partículas/antipartículas, colisões de íons pesados e plasma quark-glúon, dentre outros) [1, 2, 3, 4, 5, 6], aparecendo, também, na física da matéria condensada (por exemplo, o gás de Fermi e o condensado de Bose-Einstein) [1, 5, 6, 7, 8]. Estes tópicos são tratados pela mecânica estatística relativística, seja clássica ou quântica.

O problema de uma partícula confinada na caixa está na alma da mecânica quântica [9], sendo um dos mais simples problemas que ilustram a natureza ondulatória das partículas, implicando na quantização da energia. Uma aplicação do sistema de uma partícula quântica confinada na caixa, cuja verificação experimental é relativamente simples, consiste em analisar o comportamento térmico de uma molécula aprisionada em pequenos recipientes, ou como iremos exemplificar em macromoléculas conhecidas por fulerenos [10]. Quando Kroto et al. anunciaram a descoberta do C_{60} (que possui uma estrutura semelhante a uma bola de futebol, apresentando 32 faces, sendo 20 hexagonais e 12 pentagonais), uma forma alotrópica do carbono tal como o diamante e a grafite, estes observaram a possibilidade de inserção de átomos ou pequenas moléculas no interior destas “gaiolas” [10]. Desde então, uma série de estudos teóricos e experimentais têm elucidado as várias propriedades de diferentes famílias de fulerenos que incorporam átomos ou pequenas moléculas de gases nobres, metais ou outros elementos, em suas “gaiolas” (fulerenos endoédricos).

Avanços significativos na síntese de fulerenos endoédricos têm sido feitos recentemente empregando o conceito de cirurgia molecular. A idéia é descrita na Fig. (1.1), que consiste em três principais etapas. Primeiro, uma ou mais das ligações $C - C$ no C_{60} são rompidas para criar um orifício na “gaiola” de fulereno. Esta espécie é conhecida como

uma “gaiola” aberta de fulereno (OCF). Um dopante endoédrico é então inserido através do orifício recém formado, muitas vezes sob condições de pressão e temperatura elevadas. Finalmente, as ligações quebradas na “gaiola” C_{60} são reparadas por meios químicos [10].

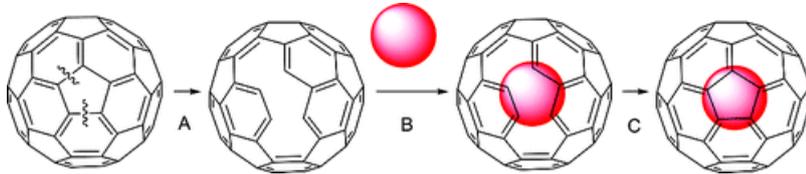


Figura 1.1: Na primeira etapa (A), as ligações na gaiola C_{60} são quebradas quimicamente. Na segunda etapa (B), uma molécula dopante é introduzida através do orifício. Na terceira etapa (C), a “gaiola” C_{60} é restaurada quimicamente para dar ao produto final endoédrico. Figura retirada da Ref. [10].

Certas simulações com uma molécula de metano (CH_4) confinada em uma “gaiola” de fulereno mostram que o comportamento da capacidade térmica da molécula de metano [10] é muito semelhante ao comportamento teórico previsto por Rosenstock para uma partícula quântica não-relativística confinada na caixa [11].

Neste trabalho, considerando o espectro relativístico de energia da partícula confinada na caixa unidimensional, existem duas temperaturas características, uma correspondendo à energia de repouso da partícula e a outra associada à dimensão da caixa, implicando na existência de diversos regimes de temperatura. Assim generalizaremos o estudo feito por Rosenstock [11], agora para o caso de uma partícula relativística. As grandezas termodinâmicas, como o calor específico, serão estudados nos diferentes regimes de temperatura.

Nosso trabalho terá o seguinte desenvolvimento:

No capítulo 2, introduzimos alguns conceitos da mecânica quântica e da relatividade restrita, bem como a equação de Klein-Gordon com suas principais características. Também mencionamos sobre o paradoxo de Klein e a dificuldade de interpretação da equação de Klein-Gordon para a descrição de uma única partícula.

Para o capítulo 3, discutiremos alguns tópicos em mecânica estatística relativística. Em todos os casos consideraremos sistemas de muitas partículas, havendo ou não criação de pares.

Porém o nosso foco principal de estudo se concentra no capítulo 4, onde temos como intuito investigar as propriedades acerca das grandezas térmicas relacionadas ao sistema de uma partícula na caixa em uma dimensão. Analisaremos também as densidades da posição e do momento da partícula, onde usamos uma definição intuitiva para estas densidades [12], assim poderemos prever como a partícula se comporta dentro da caixa.

Representações ilustrativas serão apresentadas sempre que houver necessidade, para elucidar os problemas propostos no decorrer do texto.

Capítulo 2

Equação de Klein-Gordon

Para uma descrição de fenômenos quânticos em altas energias requeremos uma representação relativística para a mecânica quântica, onde as leis físicas devem possuir uma invariância por transformações de Lorentz: tratando as variáveis espaciais e a temporal de forma mais simétrica. Desta forma, a teoria não é mais invariante por transformações de Galileu, onde a variável temporal é absoluta [13, 14, 15, 16].

A mecânica quântica não-relativística da partícula, inicia a partir da descrição da hamiltoniana clássica,

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x}), \quad (2.1)$$

e então as grandezas físicas são promovidos a operadores auto-adjuntos (observáveis) que atuam em um espaço de Hilbert, em um processo de quantização. Utilizando o princípio da correspondência quântica entre observáveis e operadores que atuam no espaço de Hilbert, o operador momento será representado por [13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20].

$$\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar\nabla, \quad (2.2)$$

da qual derivamos o operador hamiltoniano, sendo invariante por transformações de Galileu [14, 16],

$$\hat{H}\psi(t, \mathbf{x}) = \left[\frac{-\hbar^2\nabla^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{X}}) \right] \psi(t, \mathbf{x}). \quad (2.3)$$

Para formular uma teoria quântica relativística, devemos manter válidos os postulados da mecânica quântica e da teoria da relatividade restrita. Sendo estes descritos a seguir:

- Postulados da mecânica quântica [16, 20]:
 1. O estado físico do sistema físico em um dado tempo t_0 é definido especificando um *ket* $|\psi\rangle$ pertencente ao espaço dos estados ξ .
 2. Toda grandeza física A é descrita por um operador \hat{A} atuando no espaço dos

estados ξ .

3. Os resultados possíveis em uma medida de uma grandeza física A são os seus respectivos autovalores a_n do operador correspondente.
4. Sendo A uma grandeza física descrita pelo operador \hat{A} e supondo que o sistema físico esteja no estado normalizado $|\psi\rangle$, isto é, $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. Então, se for feita uma medida de A a probabilidade $P(a_n)$ de ser encontrado o autovalor a_n é dada por:

$$P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2,$$

onde g_n é o grau de degenerescência de a_n e $|u_n^i\rangle$ é autoestado do operador \hat{A} com autovalor a_n .

5. Se em uma medida da grandeza física A com o sistema no estado $|\psi\rangle$ encontramos um resultado a_n , imediatamente após a medida o estado do sistema será a projeção normalizado de $|\psi\rangle$ no subespaço ξ_n associado a a_n . Isto é,

$$\frac{P_n |\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_n|\psi\rangle}},$$

onde P_n é o operador de projeção sobre o subespaço ξ_n .

6. A evolução no tempo do vetor de estado de um sistema físico é governada por um operador hamiltoniano.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle.$$

- Postulados da relatividade restrita [21]:

1. As leis que governam as mudanças de estado em quaisquer sistemas físicos tomam a mesma forma em quaisquer sistemas de coordenadas inerciais.
2. A luz tem velocidade invariante igual a c em relação a qualquer sistema de coordenadas inercial.

A previsão feita por uma teoria relativística da partícula deve reproduzir os resultados antes previstos pela mecânica quântica não-relativística, isto é, para os casos em que $v \ll c$, onde v é a velocidade da partícula envolvida no processo físico. Seguimos de forma análoga ao caso não-relativístico, isto é, partimos da hamiltoniana clássica, porém agora dada por uma expressão relativística [13, 14, 15, 17, 18, 19, 20],

$$H = \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4}. \tag{2.4}$$

As grandezas físicas são promovidas a operadores, utilizando o princípio da correspondência, que em uma representação de coordenadas, toma a forma,

$$\hat{H}\psi(t, \mathbf{x}) = \sqrt{-c^2\hbar^2\nabla^2 + m^2c^4}\psi(t, \mathbf{x}). \quad (2.5)$$

Entretanto, esta equação possui duas grandes falhas. Primeiro, há uma assimetria entre as derivadas espaciais e temporais, resultando que a invariância relativística não seja aparente. A outra falha é a seguinte: este operador é uma raiz quadrada, e portanto não local [20].

2.1 Notação e Quadrivetores

Antes de seguirmos com uma análise sobre a mecânica quântica relativística apresentaremos uma notação para quadrivetores definidos no espaço de Minkowski¹, como por exemplo os quadrivetores contravariantes² [13, 14, 15, 21],

$$A^\mu = (A^0, A^i), \quad (2.6)$$

onde A^0 é chamada de componente temporal e A^i são as componentes espaciais. Também temos que os quadrivetores obedecem a seguinte lei de transformação³ [14],

$$A^\mu \rightarrow A'^\mu = \Lambda^\mu_\nu A^\nu, \quad (2.7)$$

onde Λ^μ_ν são os elementos da matriz transformação de Lorentz.

Esta transformação é compatível com os postulados da relatividade restrita, uma vez que a velocidade da luz é a mesma em qualquer referencial inercial. Se $v \ll c$, estas transformações recaem nas transformações de Galileu, tornando a relatividade newtoniana como um caso particular da relatividade restrita, em baixas velocidades.

No contexto da relatividade restrita, um evento localizado em um ponto do espaço e ocorrendo em um determinado tempo é descrito pelo quadrivetor contravariante, chamado de coordenadas de um ponto no espaço-tempo,

$$x^\mu = (x^0, x^i) = (ct, \mathbf{x}). \quad (2.8)$$

¹Onde será convencionado que índices gregos variam de 0 à 3 e índices latinos variam de 1 à 3, e ainda o próprio quadrivetor será identificado por sua componente $A \equiv A^\mu$.

²Indicados por índices na posição superior do quadrivetor.

³Onde utilizamos a convenção de soma de Einstein, índices repetidos significa somatório, para denotar contrações.

Definimos a distância infinitesimal entre dois pontos no espaço-tempo de Minkowski como,

$$ds^2 = (cdt)^2 - (d\mathbf{x})^2, \quad (2.9)$$

onde ds é um escalar de Lorentz⁴. Podemos reescrever ds , distância infinitesimal, em função da métrica de Minkowski [13, 14, 15, 21], isto é,

$$ds^2 = \eta_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu. \quad (2.10)$$

Assim, o tensor métrico covariante para a métrica de Minkowski pode ser escrito como,

$$\eta_{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1). \quad (2.11)$$

O tensor métrico se transforma da seguinte forma,

$$\Lambda_\mu^\alpha \eta_{\alpha\beta} \Lambda_\nu^\beta = \eta_{\mu\nu}. \quad (2.12)$$

Logo, neste espaço não-euclidiano podemos definir um produto escalar entre dois quadri-vetores arbitrários A^μ e B^μ como sendo,

$$AB := \eta_{\mu\nu} A^\mu B^\nu, \quad (2.13)$$

cujos resultados são escalares de Lorentz.

Temos também o fato de o produto escalar não ser positivo definido, e assim definimos três tipos de quadri-vetores [14, 21],

1. Tipo tempo: $AA > 0$;
2. Tipo espaço: $AA < 0$;
3. Tipo nulo: $AA = 0$.

A contração entre os tensores métricos covariante e contravariante deve necessariamente satisfazer,

$$\eta_{\mu\alpha} \eta^{\alpha\nu} = \delta_\mu^\nu = \text{diag}(1, 1, 1, 1). \quad (2.14)$$

A partir deste fato o tensor métrico contravariante tem a mesma forma que o covariante, ou seja, $\eta^{\mu\nu} = \eta_{\mu\nu}$, para a métrica de Minkowski.

Também ficam bem definidos os quadri-vetores covariantes, a partir da contração de

⁴Escalar de Lorentz é um objeto, definido no espaço de Minkowski, invariante por transformações de Lorentz.

quadrivetores contravariantes com o tensor métrico covariante,

$$A_\mu = \eta_{\mu\nu} A^\nu = (A^0, -A^i). \quad (2.15)$$

Observamos que os tensores métricos são usados para transformar quadrivetores covariantes em contravariantes e vice-versa.

Podemos também definir o quadrivetor momento-energia, para uma partícula material livre, a partir de sua ação. Primeiro definimos a ação como sendo um escalar de Lorentz. Entretanto, o único escalar que pode ser formado para a partícula livre é algo proporcional à distância infinitesimal [21],

$$S = -\alpha \int ds = -\alpha c \int \gamma^{-1}(v) dt := \int L dt, \quad (2.16)$$

onde definimos $\gamma(v) := 1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$ e α é uma constante que pode ser determinada pela expressão não-relativística de L ,

$$L = \frac{mv^2}{2} \Rightarrow \alpha = mc.$$

Logo a langrangiana relativística pode ser reescrita como,

$$L = -mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}. \quad (2.17)$$

Também podemos obter a hamiltoniana da partícula, que correspondente à energia total do sistema, a partir da transformada de Legendre $H = \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} - L$, onde $\mathbf{p} := \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}}$ [21], resultando na Eq. (2.4). Também definimos o quadrivetor momento-energia como [21],

$$p^\mu := \frac{\delta S}{\delta x_\mu} = \left(\frac{E}{c}, \mathbf{p} \right) = \frac{mc}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \left(1, \frac{\mathbf{v}}{c} \right), \quad (2.18)$$

que satisfaz a relação relativística $p^\mu p_\mu = m^2 c^2$ para uma partícula livre [21].

2.2 Equação de Klein-Gordon

Para obter uma equação equivalente à equação de Schrödinger, porém relativística, utilizamos o princípio da correspondência quântica. Então, para o operador quadrivetor momento-energia temos a representação [13, 14, 15, 17, 18, 19],

$$\hat{P}_\mu = i\hbar \partial_\mu = i\hbar \left(\frac{\partial}{c\partial t}, \nabla \right). \quad (2.19)$$

Usando a relação de Einstein, $p^\mu p_\mu = m^2 c^2$, e a correspondência quântica, obtemos,

$$\left(\hat{P}^\mu \hat{P}_\mu - m^2 c^2\right) \psi(x^\nu) = 0 \Rightarrow \left(\partial^\mu \partial_\mu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}\right) \psi(x^\nu) = 0, \quad (2.20)$$

sendo esta a equação de Klein-Gordon para uma partícula livre. Esta é invariante perante as transformações de Lorentz, devido à invariância de $p^\mu p_\mu$, tendo como solução,

$$\psi(x^\mu) = A e^{-\frac{i}{\hbar}(p_\mu x^\mu)} = A e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)}, \quad (2.21)$$

onde A é uma constante, com \mathbf{p} e E satisfazendo a seguinte relação,

$$E = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4}. \quad (2.22)$$

A Eq. (2.22) expressa a existência de energias tanto positivas quanto negativas (em um contexto de teoria quântica de campos, os estados de energia negativa são reinterpretados como estados de energia positiva de antipartículas⁵ [17, 18, 19]).

2.2.1 Quadricorrente e Estados de Energia

Podemos agora construir uma quadricorrente J_μ , a partir da equação de Klein-Gordon e de sua conjugada, isto é,

$$\left(\partial^\mu \partial_\mu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}\right) \psi = 0, \quad (2.23)$$

$$\left(\partial^\mu \partial_\mu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}\right) \psi^* = 0. \quad (2.24)$$

Multiplicando a esquerda da Eq. (2.23) por ψ^* e da Eq. (2.24) por ψ , e depois subtraindo a Eq. (2.24) da Eq. (2.23), obtemos,

$$\psi^* \partial^\mu \partial_\mu \psi - \psi \partial^\mu \partial_\mu \psi^* = \partial^\mu (\psi^* \partial_\mu \psi - \psi \partial_\mu \psi^*) = 0. \quad (2.25)$$

Então fica definida a quadricorrente,

$$J_\mu(x^\nu) := \frac{i\hbar}{2m} [\psi^*(x^\nu) \partial_\mu \psi(x^\nu) - \psi(x^\nu) \partial_\mu \psi^*(x^\nu)], \quad (2.26)$$

onde o fator $\frac{i\hbar}{2m}$, foi inserido para que desta forma a componente J_0/c seja real e posua dimensão $[L^{-3}]$ [13]. Observamos ainda que a quadricorrente satisfaz a equação da continuidade,

$$\partial^\mu J_\mu = 0 \Rightarrow \partial_0 \int_V dV J_0 = - \int_S d\mathbf{S} \cdot \mathbf{J} = 0, \quad (2.27)$$

⁵Antipartículas são da mesma natureza que as partículas, com mesma massa, spin, etc, porém com carga oposta a das partículas.

onde foi aplicado o teorema de Gauss e admitimos que \mathbf{J} tende para zero mais rapidamente do que $1/r^2$ quando r tende para o infinito. Concluimos que equação da continuidade implica em uma quantidade conservada no tempo [13, 18],

$$\int_V dV J_0 = \text{constante}. \quad (2.28)$$

Porém, a grandeza representada pela Eq. (2.28) não pode ter uma interpretação probabilística, pois não é positiva definida, observe a Eq. (2.26), devido ao fato da equação de Klein-Gordon ser de segunda ordem no tempo, Eq. (2.23). Então para descrevermos a função de onda para um dado tempo t , precisamos conhecer tanto $\psi(t)$ quanto $\partial_t \psi(t)$. Devido a esta dificuldade de interpretação para J_0 , a equação de Klein-Gordon foi abandonada na descrição de uma única partícula relativística. Entretanto esta equação é a base para teoria quântica de campos onde J_μ é reinterpretado como uma densidade de quadricorrente de cargas: conservação de probabilidade é substituída por conservação de carga. Deste modo há possibilidade de variação no número de partículas, ou seja, criação e/ou aniquilação de partículas, preservando a carga total [17, 18, 19].

Agora já temos ferramentas para uma interpretação das soluções com energia negativa da equação de Klein-Gordon. Para tal interpretação iremos considerar uma partícula com carga e , e por analogia com a mecânica clássica vamos admitir $\hat{\mathbf{p}}_\mu \rightarrow \hat{\mathbf{p}}_\mu - e\hat{\mathbf{A}}_\mu$. Com esta transformação é gerado uma interação entre a partícula e um campo eletromagnético $\hat{\mathbf{A}}_\mu$, conhecida como acoplamento mínimo [13, 20].

Aplicando o acoplamento mínimo nas Eqs. (2.23) e (2.24) obtemos,

$$\left[(\partial^\mu + \frac{ie}{\hbar} \hat{\mathbf{A}}^\mu) (\partial_\mu + \frac{ie}{\hbar} \hat{\mathbf{A}}_\mu) + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right] \psi = 0, \quad (2.29)$$

$$\left[(\partial^\mu - \frac{ie}{\hbar} \hat{\mathbf{A}}^\mu) (\partial_\mu - \frac{ie}{\hbar} \hat{\mathbf{A}}_\mu) + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right] \psi^* = 0. \quad (2.30)$$

Se ψ é solução da Eq. (2.29) com carga e isso implica que ψ^* é solução da mesma equação com carga $-e$. A conjugação complexa da função de onda equivale a uma operação denominada de conjugação de carga. Esta operação realiza a transformação das partículas nas respectivas antipartículas. O fato de ψ e ψ^* serem soluções da equação de Klein-Gordon para cargas opostas significa que a teoria prevê a existência de antipartículas [13, 17, 18, 19, 20].

Como a conjugação complexa da função de onda, Eq. (2.21), inverte o sinal da energia, concluimos que a função complexa conjugada de uma solução da Eq. (2.29) com energia negativa é uma solução da Eq. (2.30) com energia positiva. Assim, para interpretarmos uma solução de energia negativa, passamos para a função complexa conjugada e a consideramos como uma solução de energia positiva para uma partícula de carga de sinal

contrário.

No que diz respeito a densidade de quadricorrente, é fácil verificar que a conjugação de carga transforma J_μ em $-J_\mu$. Este resultado se torna compreensível se J_μ for uma densidade de quadricorrente de carga ao invés de uma densidade de probabilidade [17, 18, 19, 20].

2.2.2 Limite Não-Relativístico

Iremos estudar o limite não-relativístico da equação de Klein-Gordon, Eq. (2.29). Para este estudo vamos considerar uma partícula com carga e interagindo com um campo eletromagnético constante, ou seja, $A^\mu = [A_0(\mathbf{x}), \mathbf{A}(\mathbf{x})]$ [21]. Definindo $V(\mathbf{x}) := eA_0(\mathbf{x})$, então podemos reescrever a equação de Klein-Gordon como,

$$\left\{ \left[i\hbar \frac{\partial}{c\partial t} - V(\mathbf{x}) \right]^2 + \hbar^2 c^2 \left[\nabla + \frac{ie}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{x}) \right]^2 - m^2 c^4 \right\} \psi(x^\mu) = 0. \quad (2.31)$$

Segundo a Eq. (2.31) a partícula carregada está em interação com um campo eletromagnético estático. Supondo a seguinte solução para a equação de Klein-Gordon,

$$\psi(x^\mu) = \phi(\mathbf{x}) e^{-iwt}, \quad (2.32)$$

com $w \in \mathbb{R}$ e positivo. Ainda, observamos que $\psi(x^\mu)$ só será solução da Eq. (2.31) se $\phi(\mathbf{x})$ satisfizer,

$$\left\{ [\hbar w - V(\mathbf{x})]^2 + \hbar^2 c^2 \left[\nabla + \frac{ie}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{x}) \right]^2 - m^2 c^4 \right\} \phi(\mathbf{x}) = 0, \quad (2.33)$$

sendo esta conhecida por equação de Klein-Gordon estacionária. Definindo $E' := \hbar w - mc^2$, para o limite não-relativístico tomamos $mc^2 \rightarrow \infty$ [21]. Logo,

$$[E' + mc^2 - V(\mathbf{x})]^2 \cong m^2 c^4 \left\{ 1 + \frac{2[E' - V(\mathbf{x})]}{mc^2} \right\}. \quad (2.34)$$

Desta forma a equação de Klein-Gordon estacionária, no limite não-relativístico, será dada por,

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\nabla + \frac{ie}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{x}) \right]^2 + V(\mathbf{x}) \right\} \phi(\mathbf{x}) = E' \phi(\mathbf{x}), \quad (2.35)$$

sendo esta também a equação de Schrödinger estacionária para uma partícula não-relativística de spin nulo, com energia E' . Assim, podemos inferir que a equação de Klein-Gordon descreve partículas relativísticas de spin nulo.

2.3 Solução para uma Partícula Confinada na Caixa

Partiremos da solução de uma partícula livre, e definimos a densidade de quadricorrente, onde é válido a equação da continuidade $\partial^\mu J_\mu = 0$. Assim a componente temporal da quadricorrente, J_0 , implica numa quantidade conservada no tempo como visto na Eq. (2.25),

$$J_0 = \frac{i\hbar}{2mc} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right), \quad (2.36)$$

onde a densidade J_0 pode ser negativa, positiva ou nula, (isto indica a existência de partículas e antipartículas [17, 18, 19]). Este fato será usado para normalizar a função de onda.

A solução da equação de Klein-Gordon para uma partícula livre é da forma,

$$\psi_\pm(x^\mu) = A_\pm e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x} \mp E_p t)}, \quad (2.37)$$

sendo A_\pm constantes a serem determinadas e $E_p := \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4}$. Inserindo a Eq. (2.37) na Eq. (2.36), determinamos ρ , que é proporcional a uma densidade de carga, a partir da definição [13, 14],

$$\rho_\pm := \frac{J_0}{c} = \pm \frac{E_p}{mc^2} |\psi_\pm|^2. \quad (2.38)$$

Este fato sugere a seguinte interpretação: ψ_+ descreve partículas com cargas positivas e ψ_- descreve partículas com mesma massa, porém cargas negativas ou antipartículas [13, 18].

Desde o início ficou claro que uma interpretação consistente de uma partícula da teoria de Klein-Gordon só poderia ser aplicada às situações físicas em que não há mudança no número de partículas (criação/aniquiação). Isto só é possível em casos aos quais a energia e o momento da partícula obedeçam às seguintes condições [20],

$$|E - mc^2| < mc^2, \quad |\mathbf{p}| < mc, \quad \Delta E \ll mc^2, \quad |\Delta \mathbf{p}| \ll mc. \quad (2.39)$$

Devido ao princípio da incerteza de Heisenberg, a Eq. (2.39) implica em uma incerteza na posição, sendo grande em comparação com o comprimento de onda Compton correspondente [20],

$$|\Delta \mathbf{x}| \gg \lambda_c = \frac{\hbar}{mc}, \quad (2.40)$$

para o pacote de onda da partícula considerada.

Com esses pré-requisitos, a teoria de Klein-Gordon é separada em duas teorias de uma partícula, uma com densidade de carga positiva e outra com densidade de carga negativa, permitindo uma interpretação estatística de uma partícula. Para além destes limites o conceito de uma partícula leva a contradições que podem ser resolvidos de forma

satisfatória apenas dentro de considerações da teoria quântica de campos [20].

A solução mais geral da equação de Klein-Gordon é uma combinação linear das funções descritas na Eq. (2.37). A partir de agora iremos supor que a partícula esteja confinada em uma caixa cúbica de aresta com comprimento a , isto é, a corrente é nula nas paredes da caixa [9], ou melhor, $J_i(x_i = 0, x_{j \neq i}, t) = J_i(x_i = a, x_{j \neq i}, t) = 0$ para qualquer $0 \leq x_{j \neq i} \leq a$ e todo t , sendo as paredes da caixa situadas em $x_i = 0$ e $x_i = a$. Usamos a condição de contorno de Dirichlet, ou seja, $\psi_{\pm}(x_i = 0, x_{j \neq i}, t) = \psi_{\pm}(x_i = a, x_{j \neq i}, t) = 0$, para cada $i = 1, 2, 3$, pois esta é uma das condições de contorno compatíveis com a definição de confinamento da partícula na caixa [9]. A solução neste caso será,

$$\psi_{n(\pm)}(x^\mu) = A_{n(\pm)} e^{\mp i \frac{E_n t}{\hbar}} \sin\left(\frac{p_{n_x} x}{\hbar}\right) \sin\left(\frac{p_{n_y} y}{\hbar}\right) \sin\left(\frac{p_{n_z} z}{\hbar}\right), \quad (2.41)$$

onde,

$$\mathbf{p}_n = \frac{\hbar\pi}{a} \mathbf{n}, \quad \mathbf{n} = \{n_x, n_y, n_z\}; \quad n_x \in \mathbb{N}, \quad n_y \in \mathbb{N}, \quad n_z \in \mathbb{N}. \quad (2.42)$$

Notamos que \mathbf{n} é um vetor discreto com componentes n_x, n_y, n_z , e a energia satisfaz à relação,

$$E_n := c\sqrt{\mathbf{p}_n^2 + m^2 c^2}. \quad (2.43)$$

A solução com $n_x = n_y = n_z = 0$ não é possível, já que levaria a $\psi_{n(\pm)}(x^\mu) = 0$ para todo valor de \mathbf{x} . Também é necessário esclarecer que não há necessidade de considerar valores negativos, já que estes levam aos mesmos estados quânticos, como pode ser facilmente verificado.

Usando a definição de ρ , Eq. (2.38), e a condição descrita na Eq. (2.28), os fatores de normalização $A_{n(\pm)}$ são então determinados como,

$$\int_0^a d^3 \mathbf{x} \rho_{\pm}(x^\mu) = \pm 1 \Rightarrow A_{n(\pm)} = \sqrt{\frac{8mc^2}{a^3 E_n}}. \quad (2.44)$$

Logo, as soluções da equação de Klein-Gordon para a partícula na caixa são dadas por,

$$\psi_{n(\pm)}(x^\mu) = \sqrt{\frac{8mc^2}{a^3 E_n}} e^{\mp i \frac{E_n t}{\hbar}} \sin\left(\frac{p_{n_x} x}{\hbar}\right) \sin\left(\frac{p_{n_y} y}{\hbar}\right) \sin\left(\frac{p_{n_z} z}{\hbar}\right). \quad (2.45)$$

Também podemos construir soluções para partículas de spin-0 com carga nula, partículas neutras, e para isto a função de onda deve ser real, isto é, $\psi_{n(0)} = \psi_{n(0)}^*$. A partir de uma combinação linear conveniente entre as soluções com cargas positivas e negativas, temos por exemplo,

$$\psi_{n(0)}(x^\mu) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{n(+)}(x^\mu) + \psi_{n(-)}(x^\mu)], \quad (2.46)$$

$$\psi_{n(0)}(x^\mu) = 4\sqrt{\frac{mc^2}{a^3 E_n}} \cos\left(-\frac{E_n t}{\hbar}\right) \sin\left(\frac{p_{n_x} x}{\hbar}\right) \sin\left(\frac{p_{n_y} y}{\hbar}\right) \sin\left(\frac{p_{n_z} z}{\hbar}\right). \quad (2.47)$$

A partir desta análise concluímos que na teoria quântica relativística há novos graus de liberdade, ditos graus de liberdade de carga de partículas. Em uma teoria livre não-relativística, partículas de spin nulo podem se propagar livremente com momento bem definido. Já em uma teoria livre relativística existem três soluções correspondendo às cargas $+$, $-$ e 0 de partículas propagando livremente para cada momento. Esses estudos podem ser aplicados ao tripleto piônico $(\pi_+; \pi_-; \pi_0)$, por exemplo [13].

2.4 Paradoxo de Klein

Nesta seção, faremos uma breve discussão sobre o paradoxo de Klein. Para exemplificar trataremos o caso de uma partícula, $E > 0$, de spin nulo (um exemplo seria o mesón pi) viajando da esquerda para direita, espalhada por um potencial tipo degrau unidimensional, ocorrendo a possibilidade de transmissão da partícula através da barreira de potencial, em uma região classicamente proibida. Consideremos uma partícula carregada descrita pela Eq. (2.31), porém unidimensional. Assim o potencial degrau é expresso como [14],

$$V(x) = \begin{cases} 0 & , \text{ se } x < 0 \\ V_0 & , \text{ se } x > 0 \end{cases}, \quad (2.48)$$

onde V_0 é uma constante positiva. As regiões I e II e diversas zonas de energias por onde a partícula pode viajar, podem ser observadas na Fig. (2.1) [20].

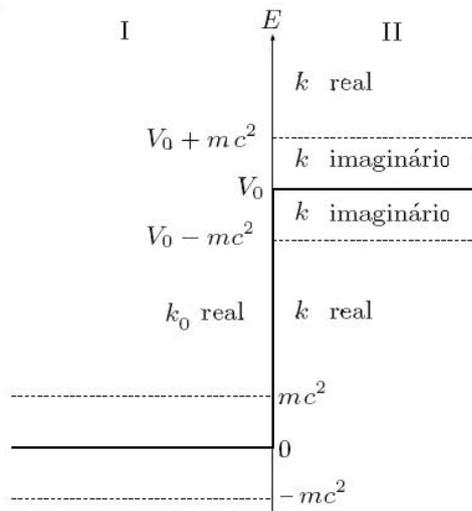


Figura 2.1: Uma partícula de energia E , que viaja da esquerda para a direita, espalhada por um potencial tipo degrau como descrito no texto. Figura baseada na Ref. [20].

As equações dinâmicas serão diferentes para cada uma das regiões, $x < 0$ (região I) e

$x > 0$ (região *II*). Para região I, a equação de Klein-Gordon apresenta soluções na forma de uma soma de autofunções do operador momento,

$$\phi_I(t, x) = \phi_{in}(t, x) + \phi_{ref}(t, x), \quad (2.49)$$

com o primeiro termo denotando uma onda incidente e o segundo termo uma onda refletida, ou seja,

$$\phi_{in}(t, x) = e^{-i\frac{Et}{\hbar}} e^{+ik_0x} \quad \text{e} \quad \phi_{ref}(t, x) = Ae^{-i\frac{Et}{\hbar}} e^{-ik_0x}. \quad (2.50)$$

sendo $k_0 > 0$. Por outro lado, para a região II, temos a seguinte solução, que denota uma onda transmitida,

$$\phi_{II}(t, x) = Be^{-i\frac{Et}{\hbar}} e^{+ikx}. \quad (2.51)$$

Devemos notar que A e B são constantes, e que a continuidade da função de onda requer a mesma energia em ambas as regiões.

Os momentos de cada região estão relacionadas com a energia a partir das expressões,

$$\hbar ck_0 = \sqrt{E^2 - m^2c^4}, \quad (2.52)$$

$$\hbar ck = \pm \sqrt{(E - V_0 - mc^2)(E - V_0 + mc^2)}. \quad (2.53)$$

Para determinar o sinal da Eq. (2.53) quando k é real, calculamos a velocidade de grupo da onda transmitida que é dada por [14, 22, 23],

$$v_{gr} := \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(k)}{\partial k} = \frac{\hbar c^2 k}{E - V_0}, \quad (2.54)$$

como a onda está viajando da esquerda para a direita, resulta da Eq. (2.54) que,

$$k > 0, \quad \text{para} \quad E - V_0 > 0, \quad (2.55)$$

$$k < 0, \quad \text{para} \quad E - V_0 < 0, \quad (2.56)$$

fixando portanto o sinal de k para os casos em que este é real.

Para calcularmos as constantes A e B , utilizamos as condições de continuidade da função de onda e de sua primeira derivada no ponto em $x = 0$, resultando nas relações,

$$1 + A = B, \quad 1 - A = \frac{k}{k_0} B. \quad (2.57)$$

Logo, determinamos as constantes A e B ,

$$A = \frac{k - k_0}{k + k_0}, \quad B = \frac{2k_0}{k + k_0}. \quad (2.58)$$

Agora podemos calcular as correntes associadas a cada uma das ondas incidente, refletida e transmitida, a partir da definição, Eq. (2.26),

$$J_{in} = \frac{\hbar k_0}{m}, \quad (2.59)$$

$$J_{ref} = \frac{\hbar k_0}{m} \frac{(k_0 - k)(k_0 - k^*)}{(k_0 + k)(k_0 + k^*)}, \quad (2.60)$$

$$J_{trans} = \frac{\hbar(k + k^*)}{2m} \frac{4k_0^2}{(k_0 + k)(k_0 + k^*)}, \quad (2.61)$$

onde J_{in} , J_{ref} e J_{trans} denotam as correntes incidente, refletida e transmitida, respectivamente.

Definimos também os coeficientes de reflexão e transmissão como [20],

$$R := \frac{J_{ref}}{J_{in}} = \frac{(k_0 - k)(k_0 - k^*)}{(k_0 + k)(k_0 + k^*)}, \quad (2.62)$$

$$T := \frac{J_{trans}}{J_{in}} = \frac{2k_0(k + k^*)}{(k_0 + k)(k_0 + k^*)}, \quad (2.63)$$

os quais satisfazem a relação $R + T = 1$.

Analisando a Eq. (2.53) e os coeficientes de reflexão e transmissão, concluímos que quando $E - mc^2 > V_0$, resulta em k real e então a onda é parcialmente refletida e transmitida, com $R < 1$ e $T > 0$. Além disto ρ e J são quantidades positivas na região $x > 0$. Porém no caso em que $V_0 - 2mc^2 < E - mc^2 < V_0$, temos que k é imaginário puro e assim a onda é totalmente refletida (J é nulo na região $x > 0$ e ρ é proporcional a $e^{-2|k|x}$), ou seja, $R = 1$ e $T = 0$. Estes resultados são semelhantes aos casos não-relativísticos, e podem ser interpretados como o espalhamento de uma partícula carregada por uma barreira de potencial [14, 15, 19, 20, 24].

No entanto, agora existe uma outra possibilidade completamente distinta. Quando $0 < E - mc^2 < V_0 - 2mc^2$, resulta que k é real e negativo, então os coeficientes de reflexão e transmissão se tornam $R > 1$ e $T < 0$ e a onda é parcialmente refletida e transmitida através da barreira. Este resultado é espantoso, pois implica em uma probabilidade não nula de encontrar a partícula em qualquer ponto dentro da barreira com energia cinética negativa ($E - mc^2 - V_0 < 0$). Este fato, caracteriza o paradoxo de Klein, que contradiz a intuição baseada em espalhamentos de partículas estudados em mecânica quântica não-relativística. O paradoxo de Klein é um resultado da insistência em querermos dar uma interpretação de partícula única à função de onda relativística. A explicação mais aceitável para este fato é que a reflexão da partícula pela barreira é acompanhada pela criação de pares partícula/antipartícula, onde as partículas se movem para a esquerda ($R > 1$) e as antipartículas para a direita ($T < 0$), no contexto de teoria quântica de campos. A

onda incidente estimula a emissão de partícula-antipartícula na barreira e os pares são criados com a energia provinda do potencial barreira [14, 15, 19, 20, 22, 23, 24, 25, 26, 27]. Observamos que, apesar de $v_{gr} > 0$, temos que J e ρ são negativos na região $x > 0$ e agora R e T estão associados à conservação da carga. Então há a propagação de carga de sinal contrário associado à onda incidente [20, 28].

Faremos aqui um breve comentário sobre a conservação da energia. Pois bem, a energia de uma partícula na região I é E_+ , enquanto que a energia de uma antipartícula na região II (região do potencial V_0) é E_- podendo ser obtida a partir da solução para equação de Klein-Gordon na região II . Assim, para a criação de pares partícula/antipartícula na região II , temos para a energia da partícula $E_+ = +\sqrt{(k_+\hbar c)^2 + (mc^2)^2} + V_0$, já para a energia da antipartícula $E_- = -\sqrt{(k_-\hbar c)^2 + (mc^2)^2} - V_0$. Entretanto, sendo $k_+^2 = k_-^2$, então $E_+ + E_- = 0$, não existindo violação da conservação da energia. Porém, o potencial $V_0 > 2mc^2$ é necessário para a indução na produção de pares partícula/antipartícula [20, 29].

Para efeitos práticos, mais realistas, Sauter e outros físicos [19, 24, 25, 26, 30, 31] estudaram casos em que, nas proximidades de $x = 0$, o potencial varia de forma mais suave (por exemplo linearmente) e não de forma descontínua. A região onde o potencial varia de forma mais suave é para distâncias superiores a um comprimento de onda Compton da partícula envolvida no processo, $\lambda_c := \hbar/mc$ (como exemplo, podemos citar o mesón pi para o qual temos que $\lambda_{c(\pi)} \approx 1,5 \cdot 10^{-15} \text{ m}$), para esta situação o paradoxo de Klein não mais ocorre. O paradoxo voltará a existir se o potencial suavizante estiver confinado numa região menor que um comprimento de onda Compton λ_c . O importante é que este resultado independe dos detalhes da curva de potencial [19, 20, 24, 25, 26, 27, 30, 31].

Capítulo 3

Tópicos em Mecânica Estatística Relativística

Neste capítulo será feita uma breve discussão de alguns tópicos que ilustram a utilização da mecânica estatística relativística.

Para a descrição de sistemas termodinâmicos, é utilizado o conceito de *ensemble* estatístico. Um *ensemble* estatístico é definido como um conjunto contendo uma infinidade de cópias idênticas, cópias fictícias (réplicas do sistema real), similares em sua natureza (macroestado), mas que diferem entre si nos valores particulares que seus parâmetros (coordenadas posição e momento) assumem num dado instante (microestado) [2, 3, 4, 32].

Para a descrição de um *ensemble* estatístico usamos a função partição que representa uma distribuição de probabilidades dos estados microscópicos do sistema em equilíbrio termodinâmico. A função partição é uma função da temperatura e outros parâmetros, tais como o volume onde se confina um gás, por exemplo. A maioria das variáveis termodinâmicas do sistema, tais como a energia interna, energia livre, entropia e pressão, pode ser expressa em termos da função partição [1, 2, 3, 4, 12, 32, 33].

Existem vários tipos de funções partição, cada uma correspondendo a diferentes tipos de *ensemble* estatístico. A função partição canônica se aplica a um *ensemble* canônico, em que ao sistema é permitido trocar de calor (energia) com o ambiente à temperatura constante (reservatório térmico), e onde o número de partículas e o volume são fixos. A função grã-partição canônica se aplica a um *ensemble* grã-canônico, no qual o sistema pode trocar calor e partículas com o ambiente, mantendo a temperatura, o potencial químico e o volume fixos. Outros tipos de funções partição podem ser definidos para outras diferentes configurações quando necessário. O reservatório térmico é infinitamente maior em relação ao sistema de interesse [1, 2, 3, 4, 12, 32, 33].

Em mecânica estatística quântica, a função partição canônica é definida pelo seguinte

traço sobre o espaço dos estados (independe da base escolhida) [1, 2, 3, 4, 12]:

$$Z_N(T, V) = \text{Tr} \left(e^{-\beta \hat{H}} \right), \quad (3.1)$$

onde H é o operador hamiltoniano e a exponencial de um operador é definida através da expansão em série de potência da exponencial. A constante β está associada à temperatura T por,

$$\beta := \frac{1}{k_B T}, \quad (3.2)$$

e k_B denota a constante de Boltzmann.

Já para o caso da mecânica estatística clássica, onde as variáveis posição e momento de uma partícula variam de forma contínua, devemos descrever a função partição canônica como uma integral ao invés de uma soma e esta integral será realizada sobre o espaço de fase. Por exemplo, a função de partição de um gás clássico de N partículas idênticas será [1, 2, 3, 4, 12, 33, 34],

$$Z_N(T, V) = \frac{1}{N! h^{3N}} \int e^{-\beta H(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N)} d\mathbf{x}_1 \dots d\mathbf{x}_N d\mathbf{p}_1 \dots d\mathbf{p}_N, \quad (3.3)$$

onde \mathbf{p}_i indicam os momentos das partículas, \mathbf{x}_i indicam as posições das partículas e H é a hamiltoniana clássica.

Para fazer com que a função partição canônica se torne uma quantidade adimensional, devemos dividi-la por h^{3N} , onde h é uma quantidade constante com unidades de ação. A razão para o fator $N!$ é para garantir que não haja um excesso na contagem dos microestados. Embora isso possa parecer uma exigência um pouco estranha, é necessário por preservar a existência do limite termodinâmico, conhecido como o paradoxo de Gibbs [2, 3, 4].

A função partição está relacionada com as propriedades termodinâmicas por possuir um significado estatístico importante. Por exemplo, para o *ensemble* canônico a probabilidade P_i de encontrar o sistema em um determinado microestado de nível i , com energia E_i , é dada por [1, 2, 3, 4, 12],

$$P_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z_N(T, V)}, \quad (3.4)$$

A função de partição está associada à normalização da probabilidade P_i ,

$$\sum_i P_i = \sum_i \frac{e^{-\beta E_i}}{Z_N(T, V)} = 1, \quad (3.5)$$

As médias térmicas ponderadas por P_i , dada pela Eq. (3.4), são associadas com as médias temporais realizadas em laboratório, correspondendo à hipótese ergótica [1, 2, 3,

4, 12, 32].

A função partição canônica Z se relaciona com a termodinâmica através da energia livre de Helmholtz A , pela definição [1, 2, 3, 4, 12, 33],

$$Z_N(T, V) := e^{-\beta A}, \quad (3.6)$$

Podemos, reescrever a energia livre de Helmholtz como,

$$A_N(T, V) = -k_B T \ln[Z_N(T, V)]. \quad (3.7)$$

Para obtermos a termodinâmica, temos as seguintes definições para a energia interna U , pressão P , entropia S e capacidade térmica C [1, 2, 3, 4],

$$U(N, T, V) := -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{A_N(T, V)}{T} \right], \quad (3.8)$$

$$P(N, T, V) := -\frac{\partial A_N(T, V)}{\partial V}, \quad (3.9)$$

$$S(N, T, V) := -\frac{\partial A_N(T, V)}{\partial T}, \quad (3.10)$$

$$C(N, T, V) := \frac{\partial U(N, T, V)}{\partial T}. \quad (3.11)$$

Podemos definir todas as outras grandezas termodinâmicas a partir da função partição, de acordo com o interesse, como por exemplo o calor específico, definido por $c_V := C/N$.

3.1 Gás Clássico Relativístico Ideal

Partimos de um sistema físico contendo N partículas idênticas, de massa m , confinadas em uma caixa tridimensional de volume V , onde a energia de cada partícula é dada por $E(\mathbf{p}) = \sqrt{(\mathbf{p}c)^2 + (mc^2)^2}$, em equilíbrio termodinâmico com um reservatório térmico. Assim, a função partição total $Z_N(T, V)$ é proporcional ao produto da função partição de uma partícula individual, ou seja, $Z_N(T, V) = [z(T, V)]^N/N!$, desde que a interação entre partículas ocorra somente por contato pontual, isto é, temos um modelo de gás ideal [2, 3, 4, 33].

Classicamente a função partição é dada pela integração no espaço de fase da expressão $e^{-\beta E(p)}$, no referencial comóvel do gás, então [1, 33, 34],

$$z(T, V) = \frac{V}{h^3} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta \sqrt{(\mathbf{p}c)^2 + (mc^2)^2}} d^3 \mathbf{p}. \quad (3.12)$$

A integral da Eq. (3.12) pode ser avaliada resultando em,

$$z(T, V) = 4\pi V \left(\frac{mc}{h}\right)^3 \frac{K_2(\beta mc^2)}{\beta mc^2}, \quad (3.13)$$

onde $K_2(\beta mc^2)$ é a função de Kelvin (função de Bessel modificada), veja o apêndice A [1, 34, 35].

A partir da Eq. (3.7), a energia livre de Helmholtz para este sistema será,

$$A_N(T, V) = -Nk_B T \left\{ \ln \left[\frac{V}{N} \frac{K_2(\beta mc^2)}{\beta mc^2} \right] + \ln \left[4\pi \left(\frac{mc}{h}\right)^3 + 1 \right] \right\}. \quad (3.14)$$

onde foi usado a aproximação de Stirling $\ln(N!) \approx N[\ln(N) - 1]$.

A partir das definições dadas nas Eqs. (3.8) e (3.9) e utilizando a Eq. (3.14), temos as grandezas termodinâmicas para esse sistema,

$$U(N, T, V) = Nk_B T \left[1 - \beta mc^2 \frac{K_2'(\beta mc^2)}{K_2(\beta mc^2)} \right], \quad (3.15)$$

$$P(N, T, V) = \frac{Nk_B T}{V}, \quad (3.16)$$

onde a plica significa derivada da função com relação ao argumento.

Agora analisaremos os limites não-relativístico e ultrarrelativístico. Primeiramente examinamos o limite não-relativístico, isto é, $\beta mc^2 \gg 1$, para o qual se considera a aproximação para $K_l(\xi)$ [1, 35],

$$K_l(\xi) = \sqrt{\frac{\pi}{2\xi}} e^{-\xi} \left[1 + \frac{4l^2 - 1}{8\xi} + \frac{(4l^2 - 1)(4l^2 - 3^2)}{2!(8\xi)^2} + \dots \right], \quad \xi \gg 1. \quad (3.17)$$

Com $\xi \doteq \beta mc^2$ resulta para energia interna U ,

$$U(N, T, V) = \frac{3}{2} Nk_B T + Nmc^2. \quad (3.18)$$

Notamos que o termo dominante é o mesmo obtido para o caso puramente não-relativístico, e ainda temos o termo da massa de repouso das partículas.

Para o outro caso extremo, o limite ultrarrelativístico, onde $\beta mc^2 \ll 1$, utilizamos a aproximação para $K_l(\xi)$ [1, 35],

$$K_l(\xi) = \frac{1}{2} \Gamma(l) \left(\frac{2}{\xi}\right)^l + \dots, \quad \xi \ll 1. \quad (3.19)$$

Neste caso obtemos,

$$U(N, T, V) = 3Nk_B T, \quad (3.20)$$

Neste limite encontramos a seguinte relação entre a pressão e a densidade de energia, $\epsilon := U/V$,

$$P = \frac{1}{3}\epsilon. \quad (3.21)$$

Este resultado está em perfeito acordo com os obtidos pela teoria quântica de campos à temperatura finita para radiação (partículas de massa nula) em uma cavidade tridimensional [1, 33].

3.2 Equilíbrio Termodinâmico e Produção de Pares

Para um sistema de N partículas em contato térmico com um reservatório, o potencial químico μ pode ser interpretado como o multiplicador de Lagrange introduzido para levar em conta a conservação de N . Agora, consideremos o seguinte sistema onde $N = N_+ - N_-$, sendo N constante (caracterizando a conservação da carga total do sistema), e onde N_+ e N_- são os números de partículas e antipartículas, respectivamente. Então a função partição deste sistema é dada por,

$$Z_N(T, V) = \sum_{N_+=0}^N Z_{N_+}(T, V) Z_{N_-}(T, V). \quad (3.22)$$

Tomando o maior termo da Eq. (3.22), temos,

$$Z_{\bar{N}_+}(T, V) Z_{\bar{N}_-}(T, V) \leq Z_N(T, V) \leq N Z_{\bar{N}_+}(T, V) Z_{\bar{N}_-}(T, V), \quad (3.23)$$

onde o máximo ocorre quando $N_+ = \bar{N}_+$. Considerando a variação do termo máximo identicamente nula,

$$\delta\{Z_{N_+}(T, V) Z_{N_-}(T, V)\}|_{\bar{N}_+} = 0, \quad (3.24)$$

e lembrando que a energia livre de Helmholtz é dada pela Eq. (3.7), a variação na Eq. (3.24) resulta na relação,

$$\left. \frac{\partial A(T, V, N)}{\partial N} \right|_{\bar{N}_+} = - \left. \frac{\partial A(T, V, N)}{\partial N} \right|_{\bar{N}_-}. \quad (3.25)$$

O potencial químico μ é definido por [1, 2, 3, 4, 33],

$$\mu := \frac{\partial A(T, V, N)}{\partial N}. \quad (3.26)$$

Consequentemente, $\mu_+ = -\mu_-$ é a condição para o equilíbrio termodinâmico entre o número de partículas e de antipartículas.

A baixas temperaturas, isto é, quando $k_B T \ll mc^2$, a energia térmica não é suficiente

para que haja criação de pares de partícula/antipartícula. Assim o número de partículas é efetivamente conservado. Agora, com o aumento da temperatura, ocorre a possibilidade de haver criação de pares, existindo um número médio, com flutuações, de partículas e antipartículas presentes no equilíbrio. Porém a diferença entre o número de partículas e antipartículas é estritamente constante, ou seja, a carga total é constante [2, 3, 4].

Para tratarmos uma situação de equilíbrio iniciamos a partir da definição da função partição (para um sistema de gás ideal) dada por,

$$Z_N(T, V) = \frac{(\int e^{-\beta H} d^3\mathbf{x} d^3\mathbf{p})^N}{N!} = \frac{[z(T, V)]^N}{N!}, \quad (3.27)$$

onde $\beta := 1/(k_B T)$ e H é a hamiltoniana do sistema. Logo, usando a aproximação de Stirling $\ln(N!) \approx N[\ln(N) - 1]$, a energia livre de Helmholtz será,

$$A(T, V, N) = -Nk_B T \left\{ \ln \left[\frac{z(T, V)}{N} \right] + 1 \right\}. \quad (3.28)$$

Definindo a densidade de partículas ou antipartículas como $n_{\pm} := N_{\pm}/V$ e utilizando a condição de equilíbrio descrita na Eq. (3.25), obtemos,

$$n_+ n_- = \left[\frac{z(T, V)}{V} \right]^2. \quad (3.29)$$

Sendo válida a relação $n = n_+ - n_-$, logo a densidade de partículas e de antipartículas em função da temperatura será dada pelas expressões,

$$n_{\pm} = \pm \frac{n}{2} + \sqrt{\frac{n^2}{4} + \left[\frac{z(T, V)}{V} \right]^2}. \quad (3.30)$$

Consideramos um o sistema físico de N partículas idênticas com massas m confinadas em uma caixa tridimensional de volume V , onde a hamiltoniana de cada partícula é dada pela expressão $H = \sqrt{(\mathbf{p}c)^2 + (mc^2)^2}$, assim $z(T, V)$ é dado pela Eq. (3.13). Então, obtemos para Eq. (3.30),

$$n_{\pm} = \pm \frac{n}{2} + \sqrt{\frac{n^2}{4} + \left[4\pi \left(\frac{mc}{h} \right)^3 \frac{K_2(\beta mc^2)}{\beta mc^2} \right]^2}. \quad (3.31)$$

Para uma melhor análise destes resultados, se calcula os limites para baixas temperaturas (caso não-relativístico) $k_B T \ll mc^2$, e altas temperaturas (caso ultrarrelativístico) $k_B T \gg mc^2$. Resultando assim nos seguintes limites, para a densidade de partículas,

respectivamente,

$$n_{\pm} = \frac{n}{2} \left[1 \pm 1 + \left(\frac{2\pi m}{h^2\beta} \right)^3 \left(\frac{e^{-\beta mc^2}}{2n} \right)^2 \right], \quad k_B T \ll mc^2, \quad (3.32)$$

$$n_{\pm} = \frac{n}{2} \left\{ \pm 1 + \frac{16\pi}{n(\hbar\beta c)^3} \left(1 + \left[\frac{n(\hbar\beta c)^3}{16\pi} \right]^2 \right)^{1/2} \right\}, \quad k_B T \gg mc^2. \quad (3.33)$$

Definiremos as proporções das populações das densidades de partículas e antipartículas como,

$$\rho_{\pm} := \frac{n_{\pm}}{n_+ + n_-} = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{2z(T,V)}{nV} \right)^2}} \right], \quad (3.34)$$

segue da definição a condição $\rho_+ + \rho_- = 1$, que caracteriza a conservação da carga total normalizada do sistema, ou melhor, a conservação de n (N).

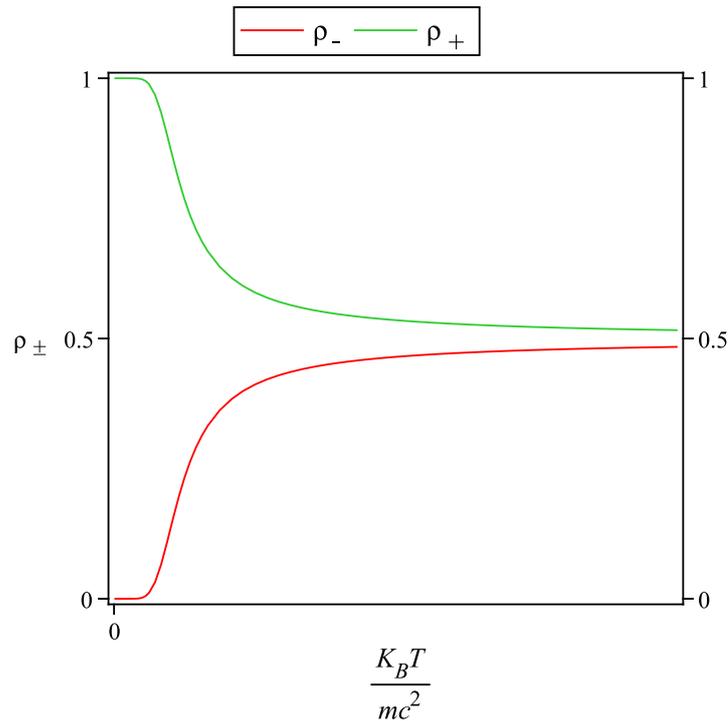


Figura 3.1: Comparação entre a proporção de população de partículas e antipartículas com o aumento da temperatura, neste exemplo foi usado o seguinte valor $n\lambda_c^3 = 10^{-10}$ para confecção do gráfico.

Para uma melhor visualização dos resultados observamos o gráfico da Fig. (3.1). Constatamos que se iniciarmos com um sistema termodinâmico que possua apenas partículas, com um pequeno acréscimo de temperatura o sistema ainda possuirá uma população predominantemente de partículas, $\rho_+ \approx 1$, a baixas temperaturas. Porém com o aumento

considerável da temperatura o efeito de criação de pares partículas/antipartículas se torna algo relevante, e sendo assim em altas temperaturas o sistema fica com uma população metade partículas e outra metade antipartículas, ou seja, $\rho_+ = \rho_- = 1/2$, para $T \rightarrow \infty$. A energia utilizada na criação de pares partículas/antipartículas é provinda do reservatório térmico.

3.3 Gás de Bose Ultrarrelativístico

A estatística quântica de gases ideais confinados em uma caixa tem sido usada para descrever sistemas de bósons. A característica dominante de um sistema de bósons é que estas partículas idênticas podem possuir o mesmo número quântico sob certas condições, e quando o número de partículas é conservado, ocorre a condensação de Bose-Einstein no gás de Bose, que constitui basicamente um superfluido. O tratamento não-relativístico tem sido usado com grande sucesso na explicação de transição de fase no condensado de Bose-Einstein [2, 3, 4].

Para a descrever um sistema de gás ideal de bósons (partículas ou antipartículas) utilizamos o *ensemble* grão-canônico. Em mecânica quântica relativística a expressão para o número de bósons é dado por,

$$N = \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{p}} - \mu)} - 1}, \quad (3.35)$$

onde $E_{\mathbf{p}} := \sqrt{(\mathbf{p}c)^2 + (mc^2)^2}$, sendo \mathbf{p} discreto pois o gás está confinado em uma caixa [9, 36], e para que o número de bósons com momento \mathbf{p} seja positivo-definido requeremos que $|\mu| \leq mc^2$.

Supondo uma caixa possua N bósons, onde N é uma quantidade conservada, sendo $N = N_+ - N_-$, com N_+ partículas e N_- antipartículas, se houver apenas partículas (ou antipartículas), para $k_B T < mc^2$, não temos o efeito de criação de pares, logo N_+ (ou N_-) será conservado. Entretanto, para o limite de altas temperaturas ($k_B T \gg mc^2$) a Eq. (3.35) não é correta na descrição de um sistema físico realístico [5], pois há criação de pares.

Em mecânica quântica, o número quântico conservado a altas temperaturas corresponde ao operador carga \hat{Q} , o qual comuta com o operador hamiltoniano \hat{H} . Todas as quantidades termodinâmicas podem ser obtidas a partir da função grã-partição $\mathcal{Z} := \text{Tr}\{e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{Q})}\}$, como função de T , V e μ [1, 2, 3]. A conservação da carga que substitui a Eq. (3.35) pode ser escrita da seguinte forma [5, 6, 8],

$$Q = \sum_p \left(\frac{1}{e^{\beta(E_p - \mu)} - 1} - \frac{1}{e^{\beta(E_p + \mu)} - 1} \right). \quad (3.36)$$

Para um estudo do gás de Bose ultra-relativístico, onde $V \rightarrow \infty$ e $N \rightarrow \infty$, a soma em \mathbf{p} é trocada por uma integral e definindo a densidade de carga $\rho := Q/V$, encontramos [2, 3, 4],

$$\rho = \frac{4\pi}{h^3} \int_0^\infty p^2 \left(\frac{1}{e^{\beta(E_p - \mu)} - 1} - \frac{1}{e^{\beta(E_p + \mu)} - 1} \right) dp, \quad (3.37)$$

onde h é a conhecida constante de Planck. Para a região de interesse, ou seja, onde $k_B T \gg mc^2$, a Eq. (3.37) se reduz a,

$$\rho \simeq \frac{\mu(k_B T)^2}{3(\hbar c)^3}. \quad (3.38)$$

A temperatura crítica T_c abaixo da qual a condensação de Bose-Einstein inicia, ocorre quando $|\mu| = mc^2$, isto é [5, 8],

$$k_B T_c = \sqrt{\frac{3(\hbar c)^3 |\rho|}{mc^2}}. \quad (3.39)$$

No caso ultrarrelativístico, onde $k_B T_c \gg mc^2$, teremos $\rho \gg (mc/\hbar)^3$. O caso não-relativístico, $k_B T_c \ll mc^2$, implica em $\rho \ll (mc/\hbar)^3$, sendo tratado usualmente em livros textos de mecânica estatística [2, 3, 4]. Para $T > T_c$ sempre é possível determinar μ em função de ρ e T na Eq. (3.37). E para $T < T_c$, a Eq. (3.37) tem a interpretação de densidade de carga dos estados excitados: $\rho - \rho_0$ [5, 8], onde ρ_0 é a densidade de carga do estado fundamental.

Na discussão das grandezas termodinâmicas, como por exemplo ρ e P , a altas temperaturas ($T > T_c$), introduzimos as seguintes variáveis $x := \beta p$, $\bar{m} := \beta mc^2$, e $\nu := \mu/mc^2$, e as integrais a serem avaliadas serão dadas pelas expressões [2, 3, 4, 6, 7],

$$\rho(\bar{m}, \nu) := \frac{4\pi(k_B T)^3}{h^3} \int_0^\infty x^2 dx \left(\frac{1}{e^{\sqrt{x^2 + \bar{m}^2} - \nu \bar{m}} - 1} - \frac{1}{e^{\sqrt{x^2 + \bar{m}^2} + \nu \bar{m}} - 1} \right), \quad (3.40)$$

$$P(\bar{m}, \nu) := \frac{4\pi(k_B T)^4}{h^3} \int_0^\infty x^2 dx \left[\ln \left(1 - e^{-\sqrt{x^2 + \bar{m}^2} - \nu \bar{m}} \right) - \ln \left(1 - e^{-\sqrt{x^2 + \bar{m}^2} + \nu \bar{m}} \right) \right]. \quad (3.41)$$

Assim, encontrando ρ e P e usando a relação termodinâmica $S/V = \partial P / \partial T$ (desde que V não dependa da temperatura), obtemos as grandezas termodinâmicas para $\bar{m} \ll 1$, a altas temperaturas, para três dimensões espaciais [5],

$$\rho \approx \frac{\mu(k_B T)^2}{3(\hbar c)^3} - \frac{\mu(k_B T)(m^2 c^4 - \mu^2)^{1/2}}{2(\hbar c)^3 \pi} + \frac{\mu(3m^2 c^4 - 2\mu^2)}{12(\hbar c)^3 \pi^2}, \quad (3.42)$$

$$P \approx \frac{\pi^2(k_B T)^4}{45(\hbar c)^3} - \frac{(k_B T)^2(m^2 c^4 - 2\mu^2)}{12(\hbar c)^3} + \frac{(k_B T)(m^2 c^4 - \mu^2)^{3/2}}{6(\hbar c)^3 \pi}, \quad (3.43)$$

$$\frac{S}{k_B V} \approx \frac{4\pi^2(k_B T)^3}{45(\hbar c)^3} - \frac{(k_B T)(m^2 c^4 - 2\mu^2)}{6(\hbar c)^3} + \frac{(m^2 c^4 - \mu^2)^{3/2}}{6(\hbar c)^3 \pi}. \quad (3.44)$$

Ainda, podemos obter a energia interna através da relação termodinâmica $U = \mu\rho V - PV + TS$, e a partir desta a capacidade térmica C (dada pela Eq. (3.11)),

$$\frac{U}{V} \approx \frac{\pi^2(k_B T)^4}{15(\hbar c)^3} - \frac{(k_B T)^2(m^2 c^4 - 6\mu^2)}{12(\hbar c)^3} - \frac{\mu^2(k_B T)(m^2 c^4 - \mu^2)^{1/2}}{2(\hbar c)^3 \pi}, \quad (3.45)$$

$$\frac{C}{k_B V} \approx \frac{4\pi^2(k_B T)^3}{15(\hbar c)^3} - \frac{(k_B T)(m^2 c^4 - 6\mu^2)}{6(\hbar c)^3} - \frac{\mu^2(m^2 c^4 - \mu^2)^{1/2}}{2(\hbar c)^3 \pi}. \quad (3.46)$$

Notamos que a energia interna U depende de V e T , mas não do número de partículas do sistema, isso porque o número de partículas não é mais conservado. Vemos também que U se torna idêntica à energia de um gás de fótons para $m = 0$ ($\Rightarrow \mu = 0$). Também temos que partículas e antipartículas contribuem igualmente quando $\mu = 0$. Em comparação com o gás de fótons, os dois estados de polarização compensam o fato de que o fóton é a sua própria antipartícula [5].

Capítulo 4

Mecânica Estatística de uma Partícula na Caixa em uma Dimensão

Apresentaremos uma discussão sobre uma partícula escalar (spin nulo) confinada em uma caixa unidimensional de comprimento a em contato com um reservatório térmico. Exemplificaremos o caso de uma partícula clássica com o tratamento relativístico e também o caso de uma partícula quântica com uma visão tanto não-relativística (puramente) quanto relativística, onde faremos uma extrapolação no conceito de uma partícula para obtenção de resultados para o caso de partícula com massa nula.

Vale salientar que o sistema de uma partícula está em equilíbrio com um reservatório térmico infinitamente grande (*ensemble* canônico), e a estatística é feita sobre o conjunto reservatório térmico mais o sistema de uma partícula, justificando a mecânica estatística de uma partícula.

4.1 Mecânica Estatística de uma Partícula Clássica Relativística na Caixa

Partimos de um sistema físico contendo uma partícula escalar de massa m , confinada em uma caixa unidimensional de comprimento a , onde a energia é dada por $E(p) = \sqrt{(pc)^2 + (mc^2)^2}$. A interação ocorre somente por contato pontual, isto é, temos um modelo de gás ideal unidimensional e onde as paredes da caixa se encontram em $x = 0$ e $x = a$. Classicamente a função partição é dada pela integração no espaço de fase da

expressão $e^{-\beta E(p)}$ [$\beta = 1/(k_B T)$], em um referencial inercial, então [1, 33, 34],

$$z(T, a) = \frac{a}{h} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta \sqrt{(pc)^2 + (mc^2)^2}} dp. \quad (4.1)$$

A integral da Eq. (4.1) pode ser avaliada resultando em,

$$z(T, a) = 2a \frac{mc}{h} K_1(\beta mc^2), \quad (4.2)$$

onde $K_1(\beta mc^2)$ é a função de Bessel modificada ou função de Kelvin [1, 34, 35].

Da definição para energia livre de Helmholtz, dada pela Eq. (3.7),

$$A(T, a) = -k_B T \left\{ \ln[aK_1(\beta mc^2)] + \ln \left(2 \frac{mc}{h} \right) \right\}. \quad (4.3)$$

Para obtermos a termodinâmica, a partir das definições, para a energia interna U , pressão P , entropia S e calor específico c_V , dadas pelas Eqs. (3.8) - (3.11), e utilizando a Eq. (4.3). Estas grandezas termodinâmicas são dadas por,

$$U(T, a) = -mc^2 \frac{K_1'(\beta mc^2)}{K_1(\beta mc^2)}, \quad (4.4)$$

$$P(T, a) = \frac{k_B T}{a}, \quad (4.5)$$

$$S(T, a) = k_B \left\{ \ln[aK_1(\beta mc^2)] - \beta mc^2 \frac{K_1'(\beta mc^2)}{K_1(\beta mc^2)} + \ln \left(2 \frac{mc}{h} \right) \right\}, \quad (4.6)$$

$$c_V(T, a) = k_B (\beta mc^2)^2 \left\{ \frac{K_1''(\beta mc^2)}{K_1(\beta mc^2)} - \left[\frac{K_1'(\beta mc^2)}{K_1(\beta mc^2)} \right]^2 \right\}, \quad (4.7)$$

onde a plica significa derivada da função com relação ao argumento.

Agora analisaremos os limites não-relativístico e ultrarrelativístico. Primeiramente examinamos o limite não-relativístico, isto é, $\beta mc^2 \gg 1$, para o qual se considera a aproximação para $K_l(\xi)$ [1, 35], dada pela Eq. (3.17), com $\xi = \beta mc^2$, resultando,

$$U(T, a) = \frac{1}{2} k_B T + mc^2 + \frac{3}{8} \frac{(k_B T)^2}{mc^2}, \quad (4.8)$$

$$S(T, a) = \frac{1}{2} k_B \left\{ 1 + \ln \left[2\pi a^2 \left(\frac{mc}{h} \right)^2 \frac{k_B T}{mc^2} \right] + \frac{3}{2} \frac{k_B T}{mc^2} \right\}, \quad (4.9)$$

$$c_V(T, a) = \frac{1}{2} k_B \left(1 + \frac{3}{2} \frac{k_B T}{mc^2} \right). \quad (4.10)$$

Notamos que os termos dominantes são os mesmos que os obtidos para o caso puramente não-relativístico, e temos ainda suas primeiras correções relativísticas.

Para o outro caso extremo, o limite ultrarrelativístico, onde $\beta mc^2 \ll 1$, utilizamos a aproximação para $K_l(\xi)$ [1, 35], dada pela Eq. (3.19), neste caso obtemos, para as grandezas em questão,

$$U(T, a) = k_B T, \quad (4.11)$$

$$S(T, a) = k_B \left[1 + \ln \left(\frac{2ak_B T}{hc} \right) \right], \quad (4.12)$$

$$c_V(T, a) = k_B. \quad (4.13)$$

Neste limite encontramos a seguinte relação entre a pressão e a densidade de energia, $\epsilon := U/a$,

$$P = \epsilon. \quad (4.14)$$

Resultado em pleno acordo com os obtidos pela teoria quântica de campos à temperatura finita para radiação (partículas de massa nula) em uma cavidade unidimensional [1].

Agora, faremos uma discussão sobre os valores médios da posição $\langle x \rangle$, do momento $\langle p \rangle$, e da velocidade térmica v_{th} da partícula. O valor médio de uma grandeza física $A(x, p)$ é classicamente definido como,

$$\langle A \rangle := \frac{\int_{-\infty}^{\infty} A(x, p) e^{-\beta \sqrt{(pc)^2 + (mc^2)^2}} dx dp}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta \sqrt{(pc)^2 + (mc^2)^2}} dx dp}. \quad (4.15)$$

A partir desta definição e de que as paredes da caixa se encontram em $x = 0$ e $x = a$, obtemos,

$$\langle x \rangle = \frac{a}{2}, \quad (4.16)$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{a^2}{3}. \quad (4.17)$$

O $\langle x \rangle$ e o $\langle x^2 \rangle$ independem da temperatura, mesmo se o sistema físico em questão for ou não relativístico.

$$\langle p \rangle = 0, \quad (4.18)$$

$$\langle p^2 \rangle = mk_B T \frac{K_2(\beta mc^2)}{K_1(\beta mc^2)}. \quad (4.19)$$

Vemos que o $\langle p \rangle$ também independe da temperatura, mas já o $\langle p^2 \rangle$ possui uma certa dependência com a temperatura, de acordo com os limites não-relativístico e ultrarrelativístico.

Também podemos analisar as incertezas (ΔA) destas grandezas físicas, tomemos a definição $(\Delta A)^2 := \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$, resultando para a posição $\langle x \rangle$ e o momento $\langle p \rangle$ nos resultados,

$$(\Delta x)^2 = \frac{a^2}{12}, \quad (4.20)$$

$$(\Delta p)^2 = mk_B T \frac{K_2(\beta mc^2)}{K_1(\beta mc^2)}. \quad (4.21)$$

Temos que Δx , como $\langle x \rangle$ e $\langle p \rangle$, independe da temperatura, já o Δp temos os seguintes limites não-relativístico e ultrarrelativístico,

$$(\Delta p)^2 = mk_B T \left(1 + \frac{3k_B T}{2mc^2} \right), \quad k_B T \ll mc^2, \quad (4.22)$$

$$(\Delta p)^2 = 2 \left(\frac{k_B T}{c} \right)^2, \quad k_B T \gg mc^2. \quad (4.23)$$

Observamos que (Δp) tende a zero quando $T \rightarrow 0$.

Já para a velocidade térmica v_{th} , consideramos a seguinte definição [1],

$$U := \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \left(\frac{v_{th}}{c}\right)^2}} \Rightarrow v_{th}^2 = \frac{U^2 - (mc^2)^2}{U^2} c^2. \quad (4.24)$$

Usando o valor obtido para a energia interna U , na Eq. (4.8), encontramos o seguinte para v_{th}^2 ,

$$v_{th}^2 = \left\{ 1 - \left[\frac{K_1(\beta mc^2)}{K_1'(\beta mc^2)} \right]^2 \right\} c^2. \quad (4.25)$$

A Fig. (4.1) ilustra uma comparação entre os comportamentos relativístico e não-relativístico da velocidade térmica.

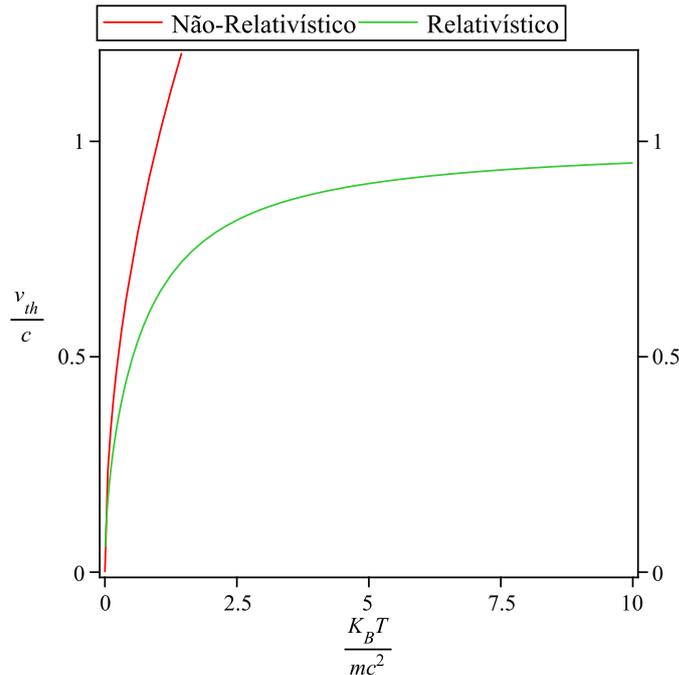


Figura 4.1: Comparação entre a velocidade térmica relativística, limitada à velocidade da luz no vácuo c , e não-relativística, não limitada.

Para os casos limites não-relativístico e ultrarrelativístico, respectivamente, determinamos,

$$v_{th}^2 = \left[\frac{k_B T}{mc^2} + \frac{3}{4} \left(\frac{k_B T}{mc^2} \right)^2 \right] c^2, \quad k_B T \ll mc^2, \quad (4.26)$$

$$v_{th}^2 = \left[1 - \left(\frac{mc^2}{k_B T} \right)^2 \right] c^2, \quad k_B T \gg mc^2. \quad (4.27)$$

No caso não-relativístico (baixas temperaturas) resgatamos o resultado esperado com uma correção relativística. E no caso ultrarrelativístico a velocidade térmica tende à c .

Também podemos definir as densidades de probabilidades de posição e de momento como sendo,

$$\rho(x) = \frac{1}{a}, \quad (4.28)$$

$$\rho(p) = \frac{e^{-\beta \sqrt{(pc)^2 + (mc^2)^2}}}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta \sqrt{(pc)^2 + (mc^2)^2}} dp}. \quad (4.29)$$

A densidade de posição é dada por uma constante $1/a$, já para o momento temos os limites,

$$\rho(p) = \frac{e^{-\beta \frac{p^2}{2m}}}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} dp}, \quad k_B T \ll mc^2, \quad (4.30)$$

$$\rho(p) = \frac{e^{-\beta pc}}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta pc} dp}, \quad k_B T \gg mc^2. \quad (4.31)$$

Onde a densidade tende para uma gaussiana no limite não-relativístico, $k_B T \ll mc^2$, e uma exponencial negativa do módulo do momento para o limite ultrarrelativístico, $k_B T \gg mc^2$.

4.2 Partícula Quântica Não-Relativística na Caixa

Suponhamos um sistema físico quântico contendo uma partícula de massa m , confinada em uma caixa unidimensional de comprimento a , com paredes em $x = 0$ e $x = a$, ou seja, $J(0, t) = J(a, t) = 0$ para todo t [9]. Uma condição de contorno que implementa esta definição é a condição de Dirichlet, isto é, $\varphi(0, t) = \varphi(a, t) = 0$. A equação que governa este sistema físico é dada por [16, 36, 37],

$$\left(\hat{H} - \frac{\hat{P}^2}{2m} \right) |\varphi \rangle = 0, \quad (4.32)$$

onde o caso de interesse em nosso trabalho é o caso estacionário do problema descrito anteriormente, onde $\hat{H}|\varphi \rangle = E|\varphi \rangle$, sendo E uma constante positiva.

4.2.1 Representação de Coordenada

Na representação de coordenadas o sistema estacionário da Eq. (4.32) é descrito pela equação de Schrödinger independente do tempo,

$$\left(E + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \varphi(x) = 0, \quad (4.33)$$

cujas soluções são dadas por (em cada uma das três regiões), onde foi usada a condição de Dirichlet,

$$\varphi_I(x) = \varphi_{III}(x) = 0, \quad \text{para } x < 0 \text{ e } x > a, \quad (4.34)$$

$$\varphi_{II}(x) = A_{II}e^{ik_0x} + B_{II}e^{-ik_0x}, \quad \text{para } 0 \leq x \leq a, \quad (4.35)$$

onde o momento $\hbar k_0$ deve satisfazer,

$$\hbar k_0 = \sqrt{2mE}, \quad (4.36)$$

Assumindo a condição de continuidade da autofunção nos pontos $x = 0$ e $x = a$ [16, 36, 37], pois esta condição de contorno é compatível com a definição de confinamento da partícula na caixa [9], e encontramos assim as relações entre as constantes A_{II} e B_{II} ,

$$A_{II} + B_{II} = 0, \quad (4.37)$$

$$A_{II}e^{ik_0a} + B_{II}e^{-ik_0a} = 0. \quad (4.38)$$

A partir destas equações temos os seguintes valores possíveis para k_0 [16],

$$k_0 = \frac{n\pi}{a}, \quad \text{com } n \in \mathbb{N}, \quad n \neq 0. \quad (4.39)$$

A partir da Eq. (4.36) segue que a energia do estado n arbitrário é definida como,

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}. \quad (4.40)$$

Utilizando a condição de normalização $\int_0^a |\varphi_n(x)|^2 dx = 1$, obtemos a seguinte a autofunção [16],

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \quad \text{para } 0 \leq x \leq a, \quad (4.41)$$

Podemos avaliar os valores esperados de grandezas físicas, definidos a partir de,

$$\langle A \rangle_n = \int_0^a \varphi_n^*(x) \hat{A} \varphi_n(x) dx, \quad (4.42)$$

onde $\varphi_n(x)$ é dada pela Eq. (4.42). Para $\langle x \rangle_n$ e $\langle x^2 \rangle_n$ e a incerteza da posição $(\Delta x)_n$, definida por $(\Delta x)_n^2 := \langle x^2 \rangle_n - \langle x \rangle_n^2$ [16], temos,

$$\langle x \rangle_n = \frac{a}{2}, \quad (4.43)$$

$$\langle x^2 \rangle_n = \frac{a^2}{3} \left(1 - \frac{3}{2n^2\pi^2} \right), \quad (4.44)$$

$$(\Delta x)_n^2 = \frac{a^2}{12} \left(1 - \frac{6}{n^2\pi^2} \right). \quad (4.45)$$

Como era de se esperar, o valor mais provável da posição será o centro da caixa, $\langle x \rangle_n = a/2$. Agora, para os valores médios, $\langle p \rangle_n$ e $\langle p^2 \rangle_n$, e a incerteza do momento, $(\Delta p)_n$, utilizando a seguinte representação para o operador momento $\hat{P} = -i\hbar\partial_x$ (representação de coordenadas) obtemos [16],

$$\langle p \rangle_n = 0, \quad (4.46)$$

$$\langle p^2 \rangle_n = \left(\frac{n\pi\hbar}{a} \right)^2, \quad (4.47)$$

$$(\Delta p)_n^2 = \left(\frac{n\pi\hbar}{a} \right)^2. \quad (4.48)$$

Observamos que a incerteza do momento cresce linearmente com n .

Também temos que $(\Delta x)_n(\Delta p)_n > \hbar/2$, confirmando o princípio da incerteza de Heisenberg.

4.2.2 Representação de Momento

A função de onda correspondente ao estado estacionário de uma partícula confinada em uma caixa unidimensional é dada pela Eq. (4.41), e com energia dada pela Eq. (4.40). A probabilidade de medir o momento da partícula e obter o resultado entre p e $p + dp$ é dado por [16],

$$\rho_n(p)dp = |\bar{\varphi}_n(p)|^2 dp. \quad (4.49)$$

Com $\bar{\varphi}_n(p)$ obtida a partir da transformada de Fourier de $\varphi_n(x)$, ou seja,

$$\bar{\varphi}_n(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^a \varphi_n(x) e^{-ipx/\hbar} dx. \quad (4.50)$$

Esta integral é facilmente resolvida resultando em [16],

$$\bar{\varphi}_n(p) = \frac{1}{2i} \sqrt{\frac{a}{\pi\hbar}} e^{-\frac{ia}{2\hbar}(p - \frac{n\pi\hbar}{a})} [F_-(n, p) - (-1)^n F_+(n, p)], \quad (4.51)$$

onde $F_{\pm}(n, p)$ são conhecidas como funções difração centradas em $p = \mp \frac{n\pi\hbar}{a}$, e são definidas como [16],

$$F_{\pm}(n, p) := \frac{\sin [a/2\hbar (p \pm n\pi\hbar/a)]}{a/2\hbar (p \pm n\pi\hbar/a)}. \quad (4.52)$$

A largura das funções difração (distância entre os dois primeiros zeros da função) é sempre igual a $4\pi\hbar/a$ independentemente de n .

A paridade da expressão $\bar{F}(n, p) := [F_-(n, p) - (-1)^n F_+(n, p)]$ é dada por,

- Se n é par, então $\bar{F}(n, p)$ é ímpar.
- Se n é ímpar, então $\bar{F}(n, p)$ é par.

Resultando na correspondente densidade de probabilidade [16],

$$\rho_n(p) = \frac{a}{4\pi\hbar} |F_-(n, p) - (-1)^n F_+(n, p)|^2. \quad (4.53)$$

Traçando a curva para a densidade de probabilidade $\rho_n(p)$ para um valor $n \gg 1$,

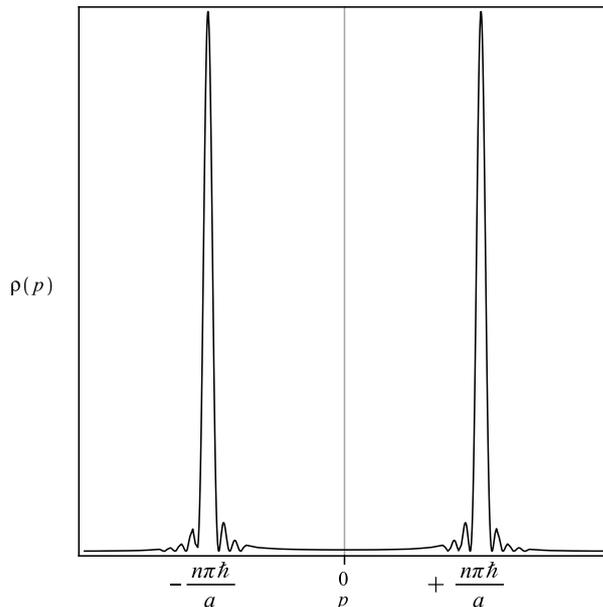


Figura 4.2: Densidade de probabilidade quântica $\rho_n(p)$, para $n \gg 1$.

observamos que $\rho_n(p)$ apresenta dois picos simétricos de largura $4\pi\hbar/a$, e centrados em $p = \pm n\pi\hbar/a$, cujos centros estão associados com movimentos clássicos da partícula de mesma energia [16], como mostrado na Fig. (4.2). Então podemos afirmar que uma medida do momento da partícula num estado $|\varphi_n\rangle$, com n grande, resulta em valores de $p = \pm n\pi\hbar/a$, cuja a precisão aumenta com o aumento de n , sendo estes valores de p igualmente prováveis. Esse resultado é facilmente compreendido, pois para valores de $n \gg 1$, $\varphi_n(x)$ varia senoidalmente com várias oscilações dentro da caixa, isso pode

ser considerado praticamente a soma de duas ondas planas progressivas com momentos opostos [16].

Para $n \gg 1$, o valor absoluto do momento é bem definido, em módulo, isso porque $(\Delta p)_n$ cresce linearmente com n , para a distribuição de probabilidade com dois máximos, como visto na Fig. (4.2), o valor médio quadrático, incerteza $(\Delta p)_n$, se refere a distância entre os dois picos, e não é mais está relacionado com as larguras dos picos [16].

4.3 Mecânica Estatística de uma Partícula Quântica Não-Relativística na Caixa

Agora analisaremos as grandezas termodinâmicas para o sistema de uma partícula quântica em uma caixa unidimensional de comprimento a , utilizando o *ensemble* canônico. O operador hamiltoniano dado pela Eq. (4.32) [2, 3, 4].

A função partição é dada pelo traço da expressão $e^{-\beta\hat{H}}$ [2, 3, 4], Eq. (3.1),

$$z(T, a) = \text{Tr} \left(e^{-\beta \frac{\hat{p}^2}{2m}} \right). \quad (4.54)$$

Usamos como base para avaliar o traço, os autoestados de energia, dados pela Eq. (4.41),

$$z(T, a) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{\Theta}{T} n^2}, \quad (4.55)$$

onde definimos uma temperatura característica,

$$\Theta := \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2 k_B}. \quad (4.56)$$

Calculamos a função partição para limites de baixas e altas temperaturas. Para baixas temperaturas somente os primeiros termos contribuirão,

$$z(T, a) = e^{-\frac{\Theta}{T}} \left(1 + e^{-3\frac{\Theta}{T}} \right), \quad T \ll \Theta. \quad (4.57)$$

A altas temperaturas trocamos o somatório por uma integral, do qual resulta em,

$$z(T, a) = \sqrt{\frac{\pi T}{\Theta}} - \frac{1}{2}, \quad T \gg \Theta. \quad (4.58)$$

Desde estejamos cientes de que para temperaturas muito elevadas (dependendo dos parâmetros m e a) esta representação não é mais válida, devido aos efeitos relativístico. Em outras palavras, para $a \lesssim \lambda_c$ devemos adotar uma representação relativística para a mecânica estatística quântica.

A energia livre de Helmholtz é dada por (definição dada pela Eq. (3.7)),

$$A(T, a) = k_B \left[\Theta - T e^{-3\frac{\Theta}{T}} \right], \quad T \ll \Theta, \quad (4.59)$$

$$A(T, a) = -\frac{k_B T}{2} \left[\ln \left(\frac{\pi T}{\Theta} \right) - \sqrt{\frac{\Theta}{\pi T}} \right], \quad T \gg \Theta. \quad (4.60)$$

A partir das definições das outras grandezas termodinâmica, dadas pelas Eqs. (3.8) - (3.11), para $T \ll \Theta$, obtemos,

$$U(T, a) = k_B \Theta \left(1 + 3e^{-3\frac{\Theta}{T}} \right), \quad (4.61)$$

$$P(T, a) = \frac{2\Theta k_B}{a} \left(1 + 3e^{-3\frac{\Theta}{T}} \right), \quad (4.62)$$

$$S(T, a) = k_B \left(3\frac{\Theta}{T} - 1 \right) e^{-3\frac{\Theta}{T}}, \quad (4.63)$$

$$c_V(T, a) = k_B \left(\frac{3\Theta}{T} \right)^2 e^{-3\frac{\Theta}{T}}. \quad (4.64)$$

No caso de altas temperaturas $T \gg \Theta$ teremos,

$$U(T, a) = \frac{k_B T}{2} \left(1 + \sqrt{\frac{\Theta}{4\pi T}} \right), \quad (4.65)$$

$$P(T, a) = \frac{k_B T}{a} \left(1 + \sqrt{\frac{\Theta}{4\pi T}} \right), \quad (4.66)$$

$$S(T, a) = \frac{k_B}{2} \left[\ln \left(\frac{\pi T}{\Theta} \right) + 1 - \sqrt{\frac{\Theta}{4\pi T}} \right], \quad (4.67)$$

$$c_V(T, a) = \frac{k_B}{2} \left(1 + \sqrt{\frac{\Theta}{16\pi T}} \right). \quad (4.68)$$

Agora faremos um estudo dos valores médios da posição e do momento da partícula e as incertezas relacionadas. Para este estudo iremos partir da definição de valor médio de um dado operador \hat{A} , em mecânica estatística quântica [1, 2, 3, 4],

$$\langle A \rangle := \frac{\text{Tr} \left(\hat{A} e^{-\beta \hat{H}} \right)}{\text{Tr} \left(e^{-\beta \hat{H}} \right)}. \quad (4.69)$$

Sendo \hat{H} dado pela Eq. (4.32). Calculamos este traço na base de coordenadas $|x\rangle$, e usamos também a relação de completeza $\sum_{n=1}^{\infty} |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| = \hat{\mathbb{1}}$, para os autoestados de

energia. Então teremos os seguintes valores médios,

$$\langle x \rangle_{nr} = \frac{a}{2}, \quad (4.70)$$

$$\langle x^2 \rangle_{nr} = \frac{a^2}{3} \left(1 - \frac{3}{4\pi^2 z} \sum_{n \neq 0} \frac{e^{-\frac{\Theta}{T} n^2}}{n^2} \right), \quad (4.71)$$

$$\langle p \rangle_{nr} = 0, \quad (4.72)$$

$$\langle p^2 \rangle_{nr} = \left(\frac{\pi \hbar}{a} \right)^2 \frac{1}{z} \sum_{n=1}^{\infty} n^2 e^{-\frac{\Theta}{T} n^2}. \quad (4.73)$$

Onde z é dada pela Eq. (4.56).

A partir da definição, as incertezas são dadas por,

$$(\Delta x)_{nr}^2 = \frac{a^2}{12} \left(1 - \frac{3}{\pi^2 z} \sum_{n \neq 0} \frac{e^{-\frac{\Theta}{T} n^2}}{n^2} \right), \quad (4.74)$$

$$(\Delta p)_{nr}^2 = \left(\frac{\pi \hbar}{a} \right)^2 \frac{1}{z} \sum_{n=1}^{\infty} n^2 e^{-\frac{\Theta}{T} n^2}. \quad (4.75)$$

Ainda teremos que quando $T \rightarrow 0$ as incertezas $(\Delta x)_{nr}$ e $(\Delta p)_{nr}$ tendem as incertezas do estado fundamental $[(\Delta x)_{n=1}$ e $(\Delta p)_{n=1}]$, Eqs. (4.45) e (4.48) para $n = 1$.

Também podemos definir a densidade de probabilidade para a posição como,

$$\rho_{nr}(x) = \frac{1}{z} \langle x | e^{-\beta \hat{H}} | x \rangle. \quad (4.76)$$

Usando a base de autoestados de energia podemos reescrevê-la,

$$\rho_{nr}(x) = \frac{1}{z} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{\Theta}{T} n^2} |\varphi_n(x)|^2 = \frac{1}{z} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{\Theta}{T} n^2} \rho_n(x). \quad (4.77)$$

Porém sendo $\varphi_n(x) = \sqrt{2/a} \sin(n\pi x/a)$, logo $\rho_{nr}(x)$ será,

$$\rho_{nr}(x) = \frac{2}{za} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{\Theta}{T} n^2} \sin^2(n\pi x/a). \quad (4.78)$$

Observamos na Fig. (4.3) os limites quântico ($T \ll \Theta$) e clássico ($T \gg \Theta$) para $\rho_{nr}(x)$. O caso quântico é simplesmente dado pelo estado fundamental, com contribuições proporcionais a $e^{-\alpha/T}$ dos primeiros níveis excitados, sendo α uma constante dependente de Θ , para a confecção da curva adotamos o valor $T/\Theta = 10^{-5}$. Já o clássico a densidade tende a constante $1/a$, como o obtido por integração no espaço de fase [Eq. (4.28)], e para

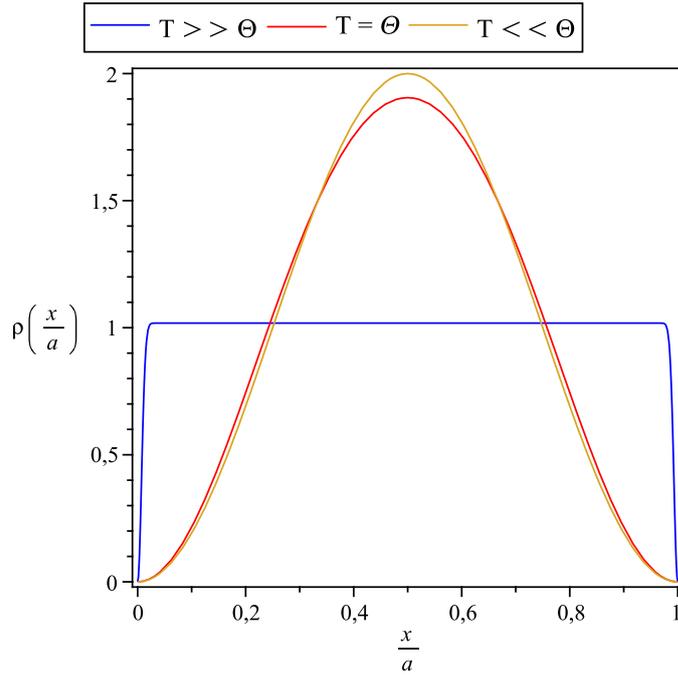


Figura 4.3: Podemos verificar como a densidade de probabilidade para a posição varia como o aumento da temperatura, para a temperatura nula temos que a densidade é dada pelo estado fundamental e para temperaturas altas a densidade tende a $1/a$.

esta curva adotamos o valor $T/\Theta = 10^3$.

Definimos também a densidade de probabilidade para o momento. Usando a base de autoestados de energia, podemos escrevê-la como,

$$\rho_{nr}(p) = \frac{1}{z} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{\Theta}{T}n^2} \rho_n(p). \quad (4.79)$$

Como $\rho_n(p)$ é dado pela Eq. (4.53), então teremos,

$$\rho_{nr}(p) = \frac{a}{4\pi\hbar z} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{\Theta}{T}n^2} |F_-(n, p) - (-1)^n F_+(n, p)|^2. \quad (4.80)$$

Podemos verificar os limites quântico e clássico para $\rho_{nr}(p)$. O caso quântico é simplesmente o estado fundamental, com contribuições proporcionais a $e^{-\alpha/T}$ dos primeiros níveis excitados, sendo α dependente de Θ , como no caso da posição adotamos para o valor $T/\Theta = 10^{-5}$ na confecção do gráfico. No caso clássico a densidade tende a uma gaussiana [Eq. (4.30)], onde adotamos o valor $T/\Theta = 10^3$ para traçarmos esta curva, podendo ser visto na Fig. (4.4).

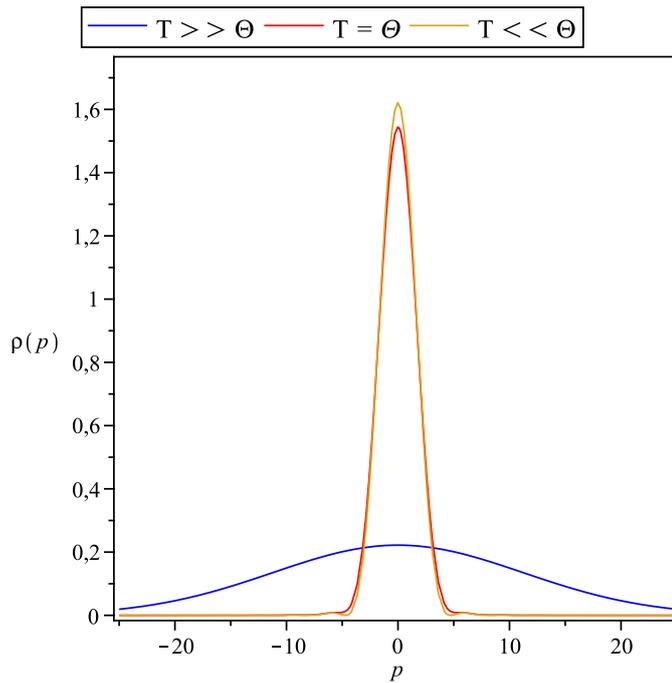


Figura 4.4: Verificamos como varia a densidade de probabilidade para o momento com o aumento da temperatura. Para a temperatura nula temos que a densidade corresponde aquela do estado fundamental, e para temperaturas altas a densidade tende a uma gaussiana.

4.4 Partícula Quântica Relativística na Caixa

Como no caso não-relativístico, temos um sistema físico quântico contendo uma partícula de massa m confinada em uma caixa unidimensional de comprimento a , com as paredes em $x = 0$ e $x = a$, e para implementar esta definição utilizaremos a condição de Dirichlet, isto é, $\psi(0, t) = \psi(a, t) = 0$ [9]. Porém, agora o sistema é governado pelo operador relativístico [13, 14, 15, 17, 18, 19, 20],

$$\left(\hat{H}^2 - \hat{P}^2 c^2 - m^2 c^4 \right) |\psi\rangle = 0. \quad (4.81)$$

Como no caso não-relativístico, novamente o nosso caso de interesse é o caso estacionário para uma partícula, onde $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, sendo E uma constante positiva (por considerarmos partícula e não antipartícula).

4.4.1 Representação de Coordenada

Na representação de coordenadas o sistema estacionário da Eq. (4.81) é descrito pela conhecida equação de Klein-Gordon estacionária [13, 14, 15, 17, 18, 19, 20],

$$\left(E^2 + \hbar^2 c^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - m^2 c^4 \right) \psi(x) = 0. \quad (4.82)$$

Sendo as soluções estacionárias dadas por (para cada uma das três regiões distintas),

$$\psi_I(x) = \psi_{III}(x) = 0, \quad \text{para } x < 0 \text{ e } x > a, \quad (4.83)$$

$$\psi_{II}(x) = A_{II}e^{ik_0x} + B_{II}e^{-ik_0x}, \quad \text{para } 0 \leq x \leq a, \quad (4.84)$$

onde $\hbar k_0$ satisfaz a seguinte definição,

$$\hbar k_0 := \sqrt{E^2 - m^2c^4}, \quad (4.85)$$

Adotando a condição de continuidade da função de onda nos pontos $x = 0$ e $x = a$ [13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 37, 38], encontramos as seguintes relações entre as constantes A_{II} e B_{II} ,

$$A_{II} + B_{II} = 0, \quad (4.86)$$

$$A_{II}e^{ik_0a} + B_{II}e^{-ik_0a} = 0. \quad (4.87)$$

Destas equações temos a discretização do momento $\hbar k_0$ [36, 37, 38], ou seja,

$$k_0 = \frac{n\pi}{a}, \quad \text{com } n \in \mathbb{N}, \quad n \neq 0. \quad (4.88)$$

Consequentemente, da Eq. (2.43) segue que a energia do estado n arbitrário fica definida como,

$$E_n = \sqrt{\frac{\pi^2 \hbar^2 c^2}{a^2} n^2 + m^2 c^4}. \quad (4.89)$$

Usando a condição de normalização $\int_0^a \frac{E_n}{mc^2} |\psi_n(x)|^2 dx = 1$, descrita pela Eq. (2.44), [13, 20], encontramos a seguinte autofunção,

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2mc^2}{aE_n}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \quad \text{para } 0 \leq x \leq a. \quad (4.90)$$

Como no caso não-relativístico, avaliamos os valores médios de grandezas físicas, definidos a partir de [13, 14, 15, 18, 19, 20],

$$\langle A \rangle_n = \int_0^a \frac{E_n}{mc^2} \psi_n^*(x) \hat{A} \psi_n(x) dx, \quad (4.91)$$

onde $\psi_n(x)$ é dada pela Eq. (4.90). Resultando para os valores $\langle x \rangle_n$, $\langle x^2 \rangle_n$, $\langle p \rangle_n$ e $\langle p^2 \rangle_n$, e as incertezas da posição, $(\Delta x)_n$, e do momento, $(\Delta p)_n$,

$$\langle x \rangle_n = \frac{a}{2}, \quad (4.92)$$

$$\langle x^2 \rangle_n = \frac{a^2}{3} \left(1 - \frac{3}{2n^2\pi^2} \right), \quad (4.93)$$

$$(\Delta x)_n^2 = \frac{a^2}{12} \left(1 - \frac{6}{n^2\pi^2} \right), \quad (4.94)$$

$$\langle p \rangle_n = 0, \quad (4.95)$$

$$\langle p^2 \rangle_n = \left(\frac{n\pi\hbar}{a} \right)^2, \quad (4.96)$$

$$(\Delta p)_n^2 = \left(\frac{n\pi\hbar}{a} \right)^2. \quad (4.97)$$

Podemos observar que não existe correções relativísticas, pois a função de onda possui a mesma forma funcional em ambos os casos. Ou melhor, o valor mais provável da posição é o centro da caixa, como no caso não-relativístico, e o $(\Delta p)_n$ cresce linearmente com n . Novamente temos que $(\Delta x)_n(\Delta p)_n > \hbar/2$, sendo válido o princípio da incerteza de Heisenberg.

4.4.2 Representação de Momento

Partindo da função de onda correspondente ao estado estacionário de uma partícula relativística confinada em uma caixa unidimensional, dada pela Eq. (4.90), e com energia dada pela Eq. (4.89) definimos a probabilidade de medir o momento da partícula e obter o resultado entre p e $p + dp$ de forma semelhante ao caso não-relativístico,

$$\rho_n(p)dp = \frac{E}{mc^2} |\bar{\psi}_n(p)|^2 dp. \quad (4.98)$$

Com $\bar{\psi}_n(p)$ obtida a partir da seguinte definição [16],

$$\bar{\psi}_n(p) := \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^a \psi_n(x) e^{-ipx/\hbar} dx. \quad (4.99)$$

Como no caso não-relativístico esta integral resulta em,

$$\bar{\psi}_n(p) = \frac{1}{2i} \sqrt{\frac{amc^2}{E\pi\hbar}} e^{-\frac{ia}{2\hbar}(p - \frac{n\pi\hbar}{a})} [F_-(n, p) - (-1)^n F_+(n, p)], \quad (4.100)$$

onde $F_{\pm}(n, p)$ são dadas pela Eq. (4.52). Resultando na densidade de probabilidade,

$$\rho_n(p) = \frac{a}{4\pi\hbar} |F_-(n, p) - (-1)^n F_+(n, p)|^2. \quad (4.101)$$

Como no caso não-relativístico, para um valor de $n \gg 1$, $\rho_n(p)$ apresenta dois picos simétricos de largura $4\pi\hbar/a$, e centrados em $p = \pm n\pi\hbar/a$, e seus centros estão associados

a movimentos clássicos da partícula de mesma energia, como mostrado na Fig. (4.2). Podemos afirmar que uma medida do momento da partícula num estado $|\psi_n\rangle$, com n grande, resulta em valores de $p = \pm n\pi\hbar/a$, com os dois valores igualmente prováveis.

4.5 Mecânica Estatística de uma Partícula Quântica Relativística na Caixa

Faremos agora uma análise das grandezas termodinâmicas para o sistema de uma partícula quântica relativística em uma caixa unidimensional de comprimento a . Utilizamos o *ensemble* canônico, e o operador relativístico dado pela Eq. (4.81). A função partição é dada pelo traço da expressão $e^{-\beta\hat{H}}$ [1, 2, 3, 4, 34],

$$z(T, a) = \text{Tr} \left(e^{-\beta\hat{H}} \right). \quad (4.102)$$

Utilizando os autoestados de energia dados pela Eq. (4.90) encontramos,

$$z(T, a) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{\sqrt{\Theta_m^2 + \Theta_a^2 n^2}}{T}}, \quad (4.103)$$

onde definimos as temperaturas características do sistema,

$$\Theta_m := \frac{mc^2}{k_B}, \quad (4.104)$$

$$\Theta_a := \frac{\pi\hbar c}{ak_B}. \quad (4.105)$$

Para um melhor estudo das grandezas termodinâmicas, faremos uma análise das mesmas em temperaturas extremas. Para tal estudo, a temperatura foi comparada com as temperaturas características do sistema em questão. Podemos observar esta comparação na Fig. (4.5).

Neste ponto, devemos nos lembrar que a interpretação de uma partícula só é consistente na teoria de Klein-Gordon se esta for aplicada as situações físicas em que não há mudança no número de partículas (criação/aniquiação). Isto só é possível nos casos em que a energia e o momento da partícula obedecem às condições descritas nas Eqs. (2.39) e (2.40), que implicam nas condições (para o caso em estudo),

$$|U - mc^2| < mc^2, \quad | \langle p \rangle | < mc, \quad \Delta x \gg \frac{\hbar}{mc}. \quad (4.106)$$

Para além destes limites, o conceito de uma partícula pode gerar contradições. Porém, faremos um abuso neste conceito em nosso estudo, para uma melhor compreensão dos

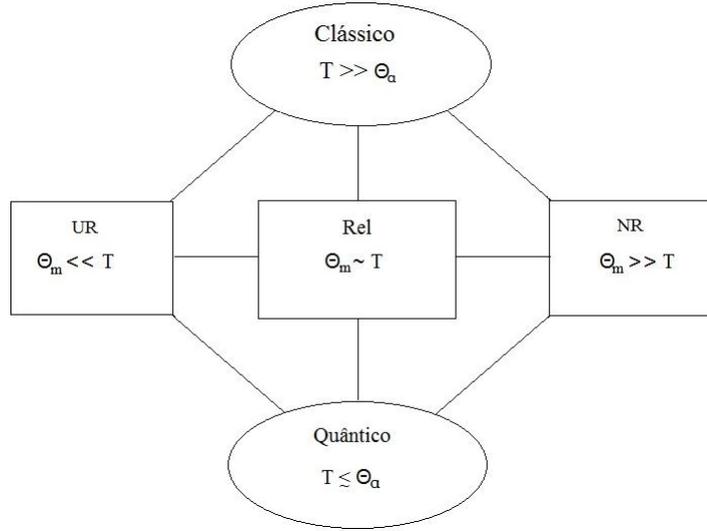


Figura 4.5: Regiões de interesse, para análise das grandezas termodinâmicas. A temperatura é comparada com as temperaturas características do sistema. Um esquema semelhante é encontrado na Ref. [7].

fenômenos térmico-relativísticos do sistema de uma partícula na caixa. Em outras palavras, ignoraremos os limites superiores na temperatura T , para efeitos de cálculos.

Primeiramente, calcularemos a função partição a baixas temperaturas, $T \ll \Theta_a$, no regime quântico,

$$z(T, a) = e^{-\frac{E_1}{k_B T}} \left(1 + e^{-\frac{E_2 - E_1}{k_B T}} \right). \quad (4.107)$$

No regime clássico, $T \gg \Theta_a$, trocamos o somatório por uma integral, resultando em,

$$z(T, a) = \frac{\Theta_m K_1 \left(\frac{\Theta_m}{T} \right)}{\Theta_a} - \frac{e^{-\frac{\Theta_m}{T}}}{2}. \quad (4.108)$$

A partir da Eq. (4.107), obtemos as grandezas termodinâmicas para o regime quântico, a partir das definições. Primeiramente, para o caso não-relativístico, $T \ll \Theta_m$, temos,

$$A(T, a) = k_B \left(\frac{\Theta_a^2}{2\Theta_m} - T e^{-\frac{3\Theta_a^2}{2\Theta_m T}} \right) + k_B \Theta_m \left[1 + \frac{3}{8} \left(\frac{\Theta_a}{\Theta_m} \right)^4 \right], \quad (4.109)$$

$$U(T, a) = \frac{k_B \Theta_a^2}{2\Theta_m} \left(1 + 3e^{-\frac{3\Theta_a^2}{2\Theta_m T}} \right) + k_B \Theta_m \left[1 + \frac{3}{8} \left(\frac{\Theta_a}{\Theta_m} \right)^4 \right], \quad (4.110)$$

$$P(T, a) = \frac{k_B \Theta_a^2}{a \Theta_m} \left(1 + 3e^{-\frac{3\Theta_a^2}{2\Theta_m T}} \right) + \frac{3k_B \Theta_m}{2a} \left(\frac{\Theta_a}{\Theta_m} \right)^4, \quad (4.111)$$

$$S(T, a) = k_B \left(1 + \frac{3\Theta_a^2}{2\Theta_m T} \right) e^{-\frac{3\Theta_a^2}{2\Theta_m T}} + \frac{45k_B \Theta_m}{8T} \left(\frac{\Theta_a}{\Theta_m} \right)^4 e^{-\frac{3\Theta_a^2}{2\Theta_m T}}, \quad (4.112)$$

$$c_V(T, a) = k_B \left(\frac{3\Theta_a^2}{2\Theta_m T} \right)^2 \left[1 + \frac{15}{2} \left(\frac{\Theta_a}{\Theta_m} \right)^2 \right] e^{-\frac{3\Theta_a^2}{2\Theta_m T}}. \quad (4.113)$$

Agora, para o caso ultrarrelativístico, $T \gg \Theta_m$, encontrando,

$$A(T, a) = k_B \Theta_a \left(1 + \frac{\Theta_m^2}{2\Theta_a^2} - \frac{T}{\Theta_a} e^{-\frac{\Theta_a}{T}} \right), \quad (4.114)$$

$$U(T, a) = k_B \Theta_a \left(1 + \frac{\Theta_m^2}{2\Theta_a^2} + e^{-\frac{\Theta_a}{T}} \right), \quad (4.115)$$

$$P(T, a) = \frac{k_B \Theta_a}{a} \left(1 - \frac{\Theta_m^2}{2\Theta_a^2} + e^{-\frac{\Theta_a}{T}} \right), \quad (4.116)$$

$$S(T, a) = k_B \left\{ 1 + \frac{\Theta_a}{T} \left[1 - \left(\frac{\Theta_m}{2\Theta_a} \right)^2 \right] \right\} e^{-\frac{\Theta_a}{T}}, \quad (4.117)$$

$$c_V(T, a) = k_B \left(\frac{\Theta_a}{T} \right)^2 \left[1 - \left(\frac{\Theta_m}{2\Theta_a} \right)^2 \right]^2 e^{-\frac{\Theta_a}{T}}. \quad (4.118)$$

Para o regime clássico, calculamos as grandezas termodinâmicas a partir da Eq. (4.108). Inicialmente, para o caso não-relativístico, $T \ll \Theta_m$,

$$A(T, a) = -\frac{k_B T}{2} \left[\ln \left(\frac{2\pi\Theta_m T}{\Theta_a^2} \right) - \sqrt{\frac{\Theta_a^2}{2\pi\Theta_m T}} \right] + k_B \Theta_m \left[1 - \frac{3}{8} \left(\frac{T}{\Theta_m} \right)^2 \right], \quad (4.119)$$

$$U(T, a) = \frac{k_B T}{2} \left(1 + \sqrt{\frac{\Theta_a^2}{8\pi\Theta_m T}} \right) + k_B \Theta_m \left[1 + \frac{3}{8} \left(\frac{T}{\Theta_m} \right)^2 \right], \quad (4.120)$$

$$P(T, a) = \frac{k_B T}{a} \left(1 + \sqrt{\frac{\Theta_a^2}{8\pi\Theta_m T}} \right), \quad (4.121)$$

$$S(T, a) = \frac{k_B}{2} \left[1 + \ln \left(\frac{2\pi\Theta_m T}{\Theta_a^2} \right) - \sqrt{\frac{\Theta_a^2}{8\pi\Theta_m T}} + \frac{3T}{2\Theta_m} \right], \quad (4.122)$$

$$c_V(T, a) = \frac{k_B}{2} \left(1 + \frac{3T}{2\Theta_m} + \sqrt{\frac{\Theta_a^2}{32\pi\Theta_m T}} \right). \quad (4.123)$$

Agora, para o caso ultrarrelativístico, $T \gg \Theta_m$,

$$A(T, a) = -k_B T \ln \left(\frac{T}{\Theta_a} \right) + \frac{k_B \Theta_a}{2} e^{-\frac{\Theta_m}{T}}, \quad (4.124)$$

$$U(T, a) = k_B T + \frac{k_B \Theta_a}{2} \left(1 - \frac{\Theta_m}{T} \right) e^{-\frac{\Theta_m}{T}}, \quad (4.125)$$

$$P(T, a) = k_B \left(\frac{T}{a} + \frac{\Theta_a}{2a} e^{-\frac{\Theta_m}{T}} \right), \quad (4.126)$$

$$S(T, a) = k_B \left[1 + \ln \left(\frac{T}{\Theta_a} \right) - \frac{\Theta_a \Theta_m}{2T^2} e^{-\frac{\Theta_m}{T}} \right], \quad (4.127)$$

$$c_V(T, a) = k_B \left(1 - \frac{\Theta_a \Theta_m}{2T^2} e^{-\frac{\Theta_m}{T}} \right). \quad (4.128)$$

Para uma melhor percepção faremos uma verificação visual de algumas destas grandezas termodinâmicas. Para tal análise escolhemos as grandezas $K := U - mc^2$, S e c_V , então analisamos os gráficos expostos nas Figs. (4.6) – (4.8), onde traçamos várias curvas para distintas massas, inclusive a massa nula.

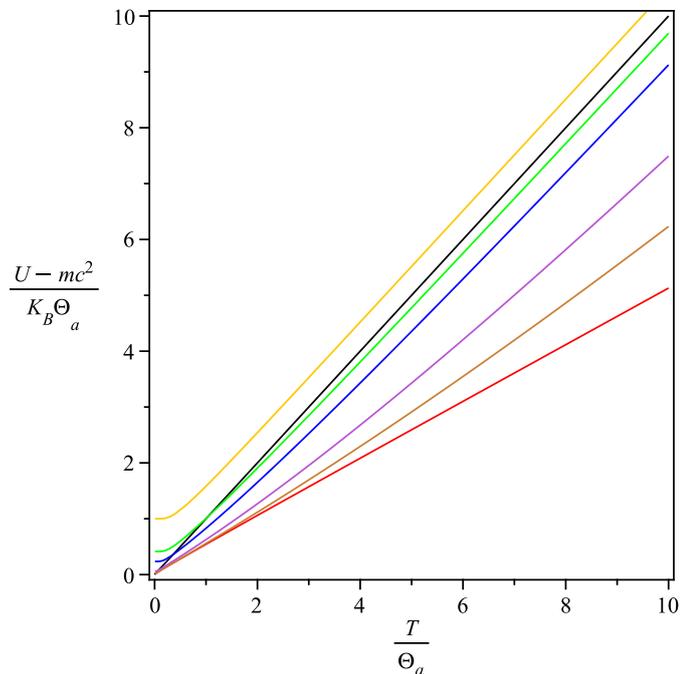


Figura 4.6: Energia interna menos a energia de repouso. A curva em amarelo se refere à partícula de massa nula e esta tende a ficar paralela a curva preta de inclinação igual à 1. A curva dourada se refere a uma partícula de massa muito grande ($\Theta_m/\Theta_a = 10^3$) e tem um regime ($T \ll \Theta_a$) onde a curva dourada tende a se alinhar com a curva vermelha, com inclinação igual à 1/2, e um outro regime, quando $T \gg \Theta_a$, onde a curva dourada tende a ficar paralela a curva preta. Para as outras curvas entre a amarela e a dourada, a única característica que muda entre elas é a massa, onde mais superior a curva menos massiva a partícula, exceto as curvas pretas e vermelhas.

Primeiro observamos a Fig. (4.6), a qual se refere a energia interna U do sistema. As curvas em preto e em vermelho possuem inclinação igual à 1 e 1/2, respectivamente, ou seja, limites clássicos ultrarrelativísticos e não-relativísticos, nesta ordem. E ainda quanto menor a massa da partícula, isto é, mais relativística, maior deve ser a energia cinética $K = U - mc^2$ da partícula, veja Fig. (4.6). Para baixas temperaturas temos que a energia cinética tende ao estado fundamental menos a energia de repouso da partícula, como podemos verificar nas Eqs. (4.110) e (4.115). A altas temperaturas resgatamos os

limites clássicos com correções, como podemos observar nas Eqs. (4.120) e (4.125).

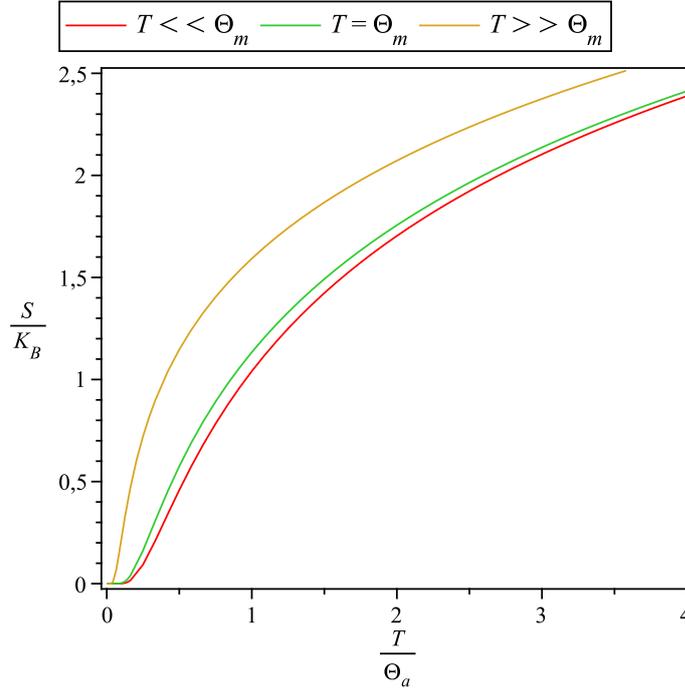


Figura 4.7: Entropia. A curva em vermelho se refere a partícula de massa nula e tem dois regimes quânticos, um não-relativístico e outro relativístico, e um regime clássico relativístico. A curva em amarela refere-se a uma partícula muito massiva e tem dois regimes não-relativístico um quântico e outro clássico e um outro regime relativístico. Porém todas as curvas obedecem à terceira lei da termodinâmica.

Verificamos agora a Fig. (4.7), que faz referência à entropia S do sistema. Para baixas temperaturas temos concordância com a terceira lei da termodinâmica, conforme as Eqs. (4.112) e (4.117). Em altas temperaturas, resgatamos os limites clássicos com correções, o que é consistente com as Eqs. (4.122) e (4.127).

Por último, vejamos a Fig. (4.8), que se refere o calor específico c_V do sistema. Para baixas temperaturas o calor específico tende exponencialmente à zero (podemos conferir nas Eqs. (4.113) e (4.118)). A altas temperaturas resgatamos os limites clássicos com correções, verificados nas Eqs. (4.123) e (4.128). As curvas em amarelo e em vermelho são os casos de massa nula (ultrarrelativístico) e não-relativístico (resultado obtido por Rosenstock [11]), respectivamente. Notamos que quanto menor for a massa da partícula (isto é, quanto mais relativística for a partícula), mais superior estará a curva do calor específico c_V e ainda verificamos que o pico que se encontra na curva do calor específico c_V se torna menos apreciável (até o seu desaparecimento total) quando $m \rightarrow 0$, podemos observar na Fig. (4.8).

Neste ponto é importante notarmos que para $T \gg \Theta_m$ se considerarmos a expressão para carga Q (Eq. (3.36)) como constante, ao invés do número de partícula N (Eq. (3.35)), temos para a energia interna U uma dependência em T^4 (de um corpo negro

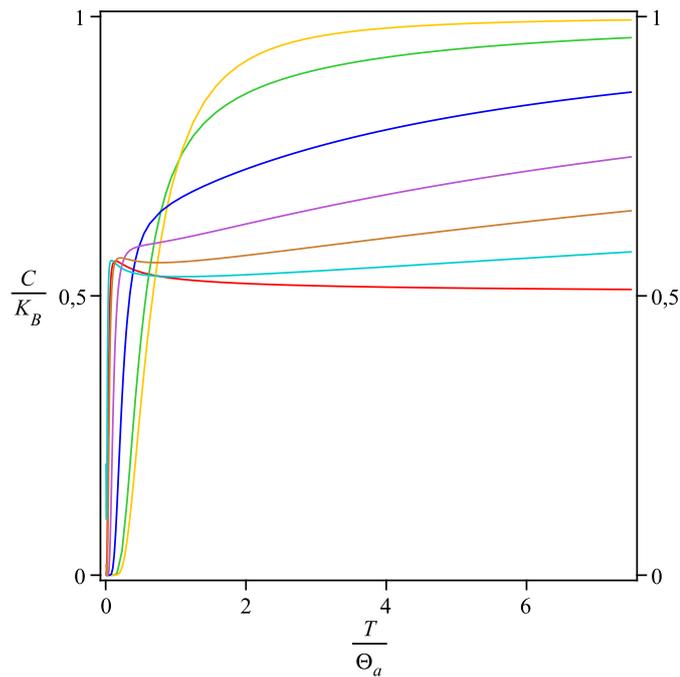


Figura 4.8: Calor específico. A curva em amarelo se refere a uma partícula de massa nula e verificamos a inexistência de um regime clássico não-relativístico. A curva em vermelho se refere a uma partícula não-relativística. Para as outras curvas entre a amarela e a vermelha, a única característica que as diferencia é a massa correspondente. Quanto mais superior a curva, menor a massa da partícula. Partículas com grandes massas possuem regimes não-relativísticos, onde as curvas correspondentes se alinham sobre a curva em vermelho por alguma faixa de temperatura. Porém todas as curvas tendem ao mesmo limite, ou seja, a 1, para T muito grande, exceto a curva em vermelho que tende a $1/2$ ($m \rightarrow \infty$).

em três dimensões) [39], veja a Eq. (3.45), e não em T (independente do número de dimensões), observe as Eqs. (3.20), (4.11) e (4.125). Essa diferença se deve ao fato de levarmos em conta ou não a produção de pares [5, 6, 7, 8].

Também avaliaremos os valores médios da posição e do momento da partícula e as incertezas relacionadas. Para este estudo partiremos da definição de valor esperado de um dado operador \hat{A} em mecânica estatística quântica, dado pela Eq. (4.69),

$$\langle A \rangle_r = \frac{\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta E_n} \langle \psi_n | \hat{A} | \psi_n \rangle}{\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta E_n}}, \quad (4.129)$$

onde E_n é dado pela Eq. (4.89). Resultando em,

$$\langle x \rangle_r = \frac{a}{2}, \quad (4.130)$$

$$\langle x^2 \rangle_r = \frac{a^2}{3} \left(1 - \frac{3}{4\pi^2} \sum_{n \neq 0} \frac{e^{-\beta E_n}}{n^2} \right), \quad (4.131)$$

$$\langle p \rangle_r = 0, \quad (4.132)$$

$$\langle p^2 \rangle_r = \left(\frac{\pi \hbar}{a} \right)^2 \frac{1}{z} \sum_{n=1}^{\infty} n^2 e^{-\beta E_n}, \quad (4.133)$$

onde z é dada pela Eq. (4.103).

A partir da definição, as incertezas são dadas por,

$$(\Delta x)_r^2 = \frac{a^2}{12} \left(1 - \frac{3}{\pi^2 z} \sum_{n \neq 0} \frac{e^{-\beta E_n}}{n^2} \right), \quad (4.134)$$

$$(\Delta p)_r^2 = \left(\frac{\pi \hbar}{a} \right)^2 \frac{1}{z} \sum_{n=1}^{\infty} n^2 e^{-\beta E_n}. \quad (4.135)$$

Outra vez, para $T \rightarrow 0$, temos que $(\Delta x)_r$ e $(\Delta p)_r$ tendem as incertezas do estado fundamental $[(\Delta x)_{n=1}$ e $(\Delta p)_{n=1}]$, Eqs. (4.94) e (4.97) para $n = 1$.

Obteremos os limites das incertezas para baixas e altas energias. Primeiramente, para o regime quântico, $T \ll \Theta_a$, para o limite não-relativístico, $T \ll \Theta_m$,

$$(\Delta x)_r^2 = \frac{a^2}{12} \left[1 - \frac{6}{\pi^2} \left(1 - \frac{3}{4} e^{-\frac{3\Theta_a^2}{2\Theta_m T}} \right) \right], \quad (4.136)$$

$$(\Delta p)_r^2 = \left(\frac{\pi \hbar}{a} \right)^2 \left(1 + 3e^{-\frac{3\Theta_a^2}{2\Theta_m T}} \right). \quad (4.137)$$

Para o limite ultrarrelativístico, $T \gg \Theta_m$, encontramos,

$$(\Delta x)_r^2 = \frac{a^2}{12} \left[1 - \frac{6}{\pi^2} \left(1 - \frac{3}{4} e^{-\frac{\Theta_a}{T}} \right) \right], \quad (4.138)$$

$$(\Delta p)_r^2 = \left(\frac{\pi \hbar}{a} \right)^2 \left(1 + 3e^{-\frac{\Theta_a}{T}} \right). \quad (4.139)$$

Para o regime clássico, $T \gg \Theta_a$, calculamos também os limites das incertezas. Inicialmente, para o limite não-relativístico, $T \ll \Theta_m$,

$$(\Delta x)_r^2 = \frac{a^2}{12} \left[1 + \frac{6\Theta_a^2}{\pi^2 \Theta_m T} \left(1 + \sqrt{\frac{\Theta_a^2}{8\pi \Theta_m T}} \right) \right], \quad (4.140)$$

$$(\Delta p)_r^2 = mk_B T \left(1 + \frac{3T}{2\Theta_m} \right) \left(1 + \sqrt{\frac{\Theta_a^2}{8\pi \Theta_m T}} \right). \quad (4.141)$$

Agora, para o ultrarrelativístico, $T \gg \Theta_m$,

$$(\Delta x)_r^2 = \frac{a^2}{12} \left[1 + 6 \left(\frac{\Theta_a}{\pi T} \right)^2 \ln \left(\frac{\Theta_a}{T} \right) \left(1 + \frac{\Theta_a}{2T} e^{-\frac{\Theta_m}{T}} \right) \right], \quad (4.142)$$

$$(\Delta p)_r^2 = 2 \left(\frac{k_B T}{c} \right)^2 \left(1 + \frac{\Theta_a}{2T} e^{-\frac{\Theta_m}{T}} \right). \quad (4.143)$$

Definimos, também a densidade de probabilidade para a posição como,

$$\rho_r(x) := \frac{E_n}{zmc^2} \langle x | e^{-\beta \hat{H}} | x \rangle. \quad (4.144)$$

Usando a base de autoestados de energia podemos reescrevê-la como,

$$\rho_r(x) = \frac{E_n}{zmc^2} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta E_n} |\psi_n(x)|^2 = \frac{1}{z} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta E_n} \rho_n(x). \quad (4.145)$$

Porém, como $\psi_n(x) = \sqrt{2mc^2/aE_n} \sin(n\pi x/a)$, então,

$$\rho_r(x) = \frac{2}{za} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta E_n} \sin^2(n\pi x/a). \quad (4.146)$$

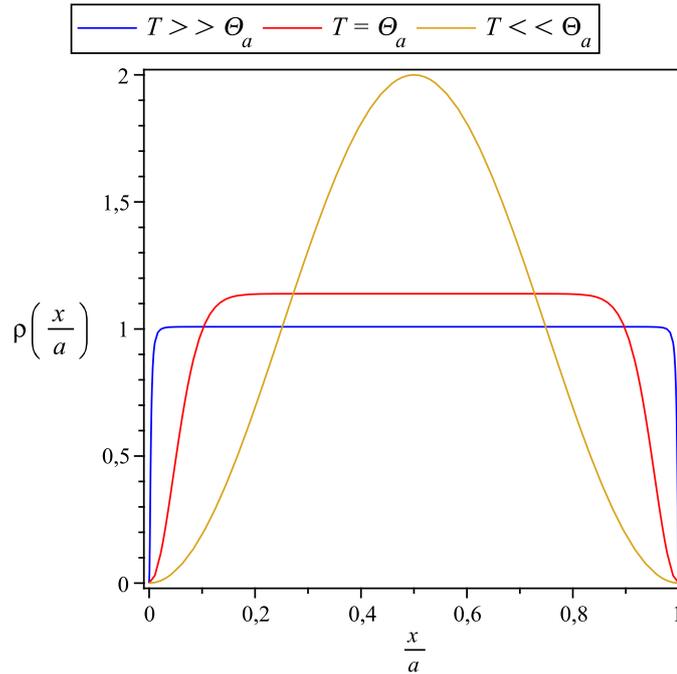


Figura 4.9: Densidade de probabilidade para a posição, no regime não-relativístico, $T \ll \Theta_m$, ilustrando como esta varia com o aumento da temperatura. Para temperatura nula a densidade é dada por aquela correspondente ao estado fundamental, e para temperaturas altas a densidade tende a $1/a$.

Verificamos na Fig. (4.9), os limites quântico e clássico para o regime não-relativístico, $T \ll \Theta_m$, de $\rho_r(x)$. O caso quântico, $T \ll \Theta_a$, é dado basicamente por $\rho_r(x)$ associado ao estado fundamental, com contribuições devido aos primeiros níveis excitado. Já no caso clássico ($T \gg \Theta_a$) a densidade tende a constante $1/a$, de acordo com a Eq. (4.28).

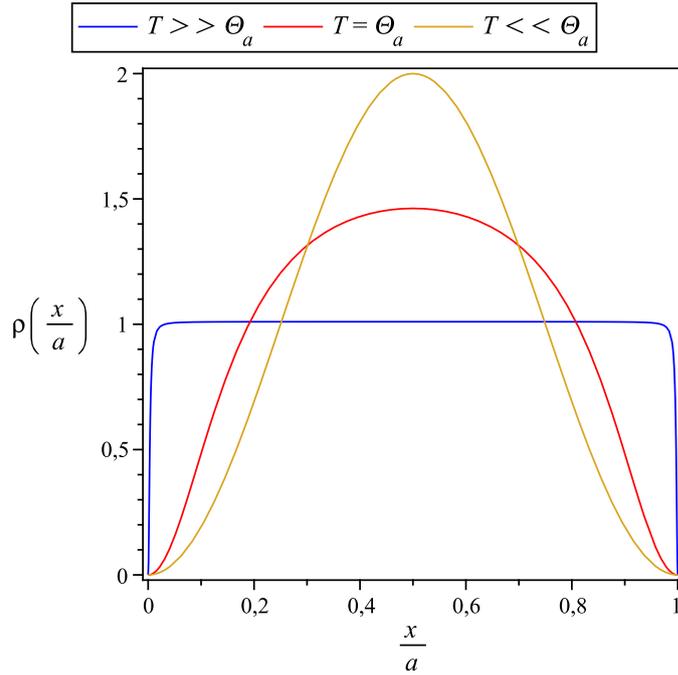


Figura 4.10: Densidade de probabilidade para a posição em função da temperatura, no regime ultrarrelativístico, $T \gg \Theta_m$. Como anteriormente para temperatura nula o comportamento é aquele correspondente ao estado fundamental. Para temperaturas altas, a densidade tende a $1/a$, mudando apenas a forma de sua evolução comparando com o caso anterior.

Agora podemos ver na Fig. (4.10), os limites quântico e clássico para o regime ultrarrelativístico, $T \gg \Theta_m$, de $\rho_r(x)$. Novamente, o caso quântico corresponde ao estado fundamental, com correções devidos aos primeiros estados excitados. No caso clássico a densidade tende a constante $1/a$ como antes. Porém a diferença está em como a densidade evolui com o aumento da temperatura. Vemos que quanto maior a massa da partícula, mais rapidamente ela se tornará clássica (compare as Figs. (4.9) e (4.10)).

Também podemos definir a densidade de probabilidade para o momento, onde utilizamos a base de autoestados de energia para escrevê-la,

$$\rho_r(p) := \frac{1}{z} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta E_n} \rho_n(p). \quad (4.147)$$

Contudo, como $\rho_n(p)$ é dado pela Eq. (4.101), logo,

$$\rho_r(p) = \frac{a}{4\pi\hbar z} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta E_n} |F_-(n, p) - (-1)^n F_+(n, p)|^2. \quad (4.148)$$

Podemos verificar os limites quântico e clássico para o regime não-relativístico ($T \ll \Theta_m$) de $\rho_r(p)$. O caso quântico corresponde simplesmente ao estado fundamental, com contribuições dos níveis excitados. No caso clássico a densidade tende a uma gaussiana,

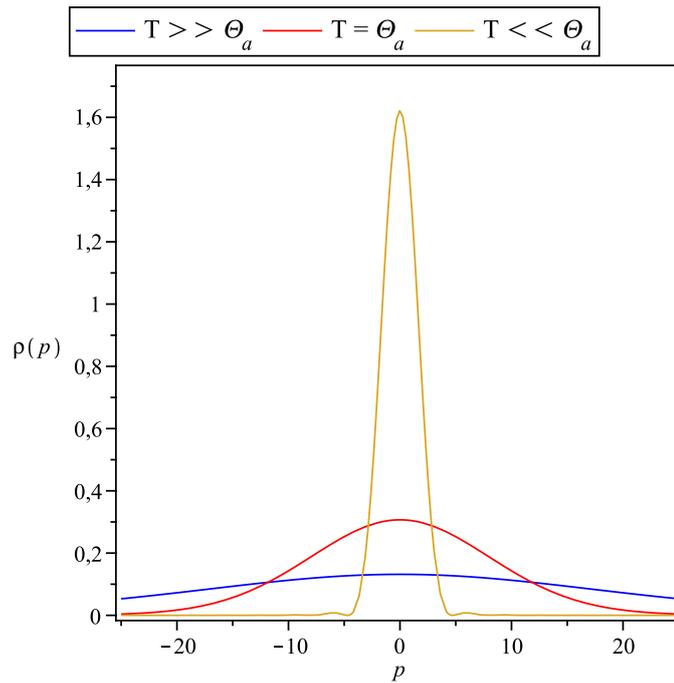


Figura 4.11: Densidade de probabilidade para o momento em função da temperatura, no regime não-relativístico, $T \ll \Theta_m$. Para a temperatura nula, a densidade é aquela do estado fundamental, e para altas temperaturas a mesma tende a uma gaussiana.

como no caso clássico (integração no espaço de fase), dado pela Eq. (4.30), podendo ser visto na Fig. (4.11).

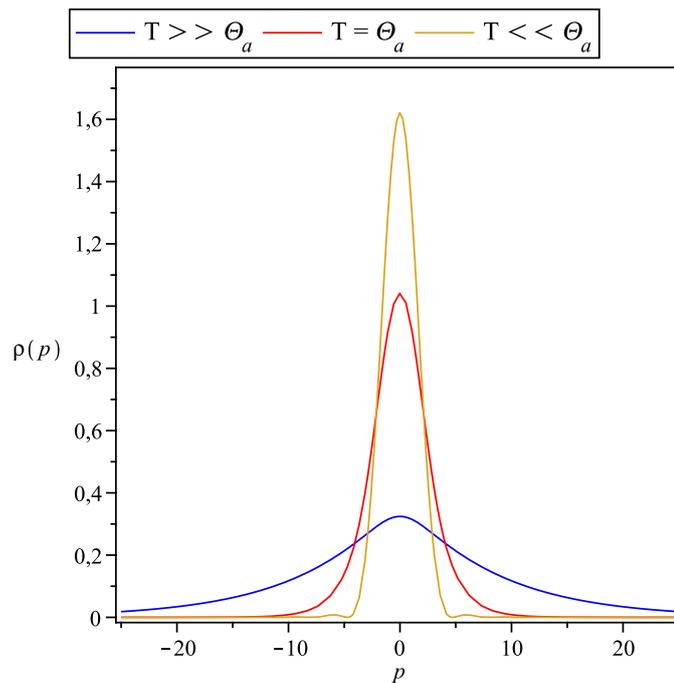


Figura 4.12: Densidade de probabilidade para o momento, no regime ultrarrelativístico, $T \gg \Theta_m$. Para temperatura nula, temos que a densidade é aquela associada ao estado fundamental. Para temperaturas altas, a densidade tende a exponencial do módulo do momento.

Observamos ainda os limites quântico e clássico para o caso ultrarrelativístico ($T \gg \Theta_m$) de $\rho_r(p)$. Outra vez, o caso quântico corresponde a aquele do estado fundamental. Já no limite clássico a densidade tende a uma exponencial do módulo do argumento, como a densidade clássica, dada pela Eq. (4.31), podemos verificar na Fig. (4.12).

Podemos ainda verificar que quanto maior for a massa da partícula, maior será a dispersão no seu momento (veja as Figs. (4.11) e (4.12)).

Capítulo 5

Conclusões e Perspectivas

Neste trabalho investigamos a termodinâmica de uma partícula relativística confinada em uma caixa unidimensional. Com o intuito de fornecer resultados teóricos que possam ser eventualmente confrontados com dados experimentais referentes a moléculas confinadas em “gaiolas” de fulereno.

O calor específico c_V é uma grandeza que caracteriza a facilidade (ou dificuldade) em que o sistema (em nosso estudo temos o sistema de uma partícula) tem para variar sua temperatura quando troca energia na forma de calor. Este efeito pode ser observado em um experimento calorimétrico cuidadosamente controlado, como a diferença no calor específico entre caixas vazias e caixas com uma partícula dentro.

No cálculo do calor específico c_V do sistema de uma partícula na caixa em uma dimensão, concluímos que para baixas temperaturas ($T \ll \Theta_a$) c_V tende exponencialmente a zero, e em altas temperaturas ($T \gg \Theta_a$) resgatamos os limites clássicos (isto é, aqueles correspondentes a integração no espaço de fase). Para uma partícula de massa nula verificamos que seu comportamento se quer faz menção ao regime clássico não-relativístico ($T \ll \Theta_m$), existindo apenas o regime ultrarrelativístico clássico ($T \gg \Theta_m$), $c_V \rightarrow k_B$. Contudo, partículas com massa apreciável possuem regimes não-relativísticos, quântico e clássico, atingindo eventualmente o regime ultrarrelativístico clássico ($c_V \rightarrow k_B$). Um aspecto interessante no regime clássico é que o calor específico c_V se concentra entre $k_B/2$ e k_B , dependendo da massa da partícula. Outro importante resultado, porém no caso ultrarrelativístico, é que $P = \epsilon$, que está em perfeito acordo com os resultados obtidos pela teoria quântica de campos à temperatura finita (em uma dimensão espacial).

Fizemos um estudo sobre os valores médios da posição $\langle x \rangle$ e do momento $\langle p \rangle$ da partícula e de suas incertezas, Δx e Δp , nos vários regimes de temperatura. Para o limite clássico ($T \gg \Theta_a$) estes valores estão em pleno acordo com os obtidos pela integração no espaço de fase. Mostramos que $\langle x \rangle$ é o centro da caixa e $\langle p \rangle$ é nulo para toda temperatura. Para as incertezas, concluímos que tanto Δx quanto Δp , nos limites de

$T \rightarrow 0$ e $T \rightarrow \infty$, independem da massa da partícula, mas para temperaturas finitas há uma dependência significativa com m .

Também analisamos as densidades da posição e do momento, mostrando que quanto menor for a massa da partícula, maior a persistência do seu comportamento quântico para crescentes valores de T . Em outras palavras, partículas com maior massa se tornam “clássicas” mais rapidamente.

Naturalmente, somos levados a ideia de podermos inserir pequenas moléculas em “gaiolas” de fulereno. Com os notáveis avanços experimentais nessa área, parece ser plausível pensarmos na possibilidade de testar as predições feitas em nosso estudo.

Agora, algo que precisa ser estudado com seus devidos cuidados, devido à sua importância, são os casos de partículas em dimensões arbitrárias e de spins não nulos. Por exemplo, férmions confinados em “gaiolas” com dimensões arbitrárias.

Antes de finalizarmos, é importante observarmos que para $T \gg \Theta_m$ nossos resultados não são inteiramente confiáveis sob o ponto de vista experimental, visto que neste regime de temperatura há criação de pares. Este fato compromete a própria concepção de “uma partícula” confinada na caixa, isto é, um tratamento no contexto da teoria quântica de campos à temperatura finita é necessário.

Apêndice A

Algumas Propriedades Úteis da Função de Kelvin

Em nosso presente trabalho as funções de Kelvin são consideradas quando estamos tratando a mecânica estatística relativística. Podemos definir as funções de Kelvin como,

$$K_n(x) = \int_0^\infty \cosh(pn) e^{-x \cosh(p)} dp, \quad (\text{A.1})$$

$$K_n(x) = \left(\frac{x}{2}\right)^n \frac{\Gamma(1/2)}{\Gamma(n+1/2)} \int_0^\infty \sinh^{2n}(p) e^{-x \cosh(p)} dp, \quad (\text{A.2})$$

onde satisfazem as relações de recorrências,

$$K_{n+1}(x) - K_{n-1}(x) = \frac{2n}{x} K_n(x), \quad (\text{A.3})$$

$$\frac{d}{dx} [x^{\pm n} K_n(x)] = -x^{\pm n} K_{n\mp 1}(x). \quad (\text{A.4})$$

Combinando as Eqs. (A.3) e (A.4) podemos reescrever as relações de recorrências como,

$$xK'_n(x) - nK_n(x) = -xK_{n+1}(x), \quad (\text{A.5})$$

$$xK'_n(x) + nK_n(x) = -xK_{n-1}(x), \quad (\text{A.6})$$

$$2K'_n(x) = -[K_{n+1}(x) + K_{n-1}(x)], \quad (\text{A.7})$$

$$2nK'_n(x) = x[K_{n+1}(x) - K_{n-1}(x)]. \quad (\text{A.8})$$

Também temos que as funções de Kelvin obedecem a equação diferencial de segunda ordem,

$$K_n''(x) + x^{-1}K_n'(x) - \left[1 + \left(\frac{n}{x}\right)^2\right] K_n(x) = 0. \quad (\text{A.9})$$

As expansões assintóticas para as funções de Kelvin são dadas por,

$$K_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} e^{-x} \left[1 + \frac{4n^2 - 1^2}{8x} + \frac{(4n^2 - 1)(4n^2 - 3^2)}{2!(8x)^2} + \dots \right], \quad x \gg 1. \quad (\text{A.10})$$

Enquanto para pequenos valores de x as funções de Kelvin serão dadas por,

$$K_0(x) = -0,5772 - \ln\left(\frac{x}{2}\right) + \dots, \quad x \ll 1. \quad (\text{A.11})$$

$$K_n(x) = \frac{1}{2} \Gamma(l) \left(\frac{2}{\xi}\right)^l + \dots, \quad x \ll 1. \quad (\text{A.12})$$

Estas definições e propriedades são extremamente úteis no estudo da mecânica estatística relativística. Mais propriedades podem ser consultadas em I. S. Gradshteyn [35].

Referências

- [1] R. Hakim, *Introduction to Relativistic Statistical Mechanics: Classical and Quantum*, World Scientific, Cingapura (2011).
- [2] L. D. Landau, E.M. Lifshitz, *Statistical Physics*, Vol.5, Elsevier, Moscou (1980).
- [3] K. Huang, *Statistical Mechanics*, John Wiley & Sons (1987).
- [4] R. K. Pathria, *Statistical Mechanics*, Elsevier, Burlington (1996).
- [5] H. E. Haber, H. A. Weldon, *Thermodynamics of an Ultrarelativistic Ideal Bose Gas*, Phys. Rev. Lett. **46**, 1497 (1981).
- [6] S. Singh, P. N. Pandita, *Scaling and Universality of Thermodynamics and Correlations of an Ideal Relativistic Bose Gas with Pair Production*, Phys. Rev. A **28**, 1752 (1983).
- [7] C. A. de Carvalho, S. G. Rosa Jr., *The Relativistic Bose Gas*, J. Phys. A **13**, 3233 (1980).
- [8] L. Burakovsky, L. P. Horwitz, W. C. Schieve, *New Relativistic High-Temperature Bose-Einstein Condensation*, J. Phys. D **54**, 4029 (1996).
- [9] V. Alonso, S. de Vincenzo, *Ehrenfest-Type Theorems for a One-Dimensional Dirac Particle*, Phys. Scr. **61**, 396 (2000).
- [10] K. E. Whitener Jr., *Theoretical Studies of CH₄ Inside an Open-Cage Fullerene: Translation-Rotation Coupling and Thermodynamic Effects*, J. Phys. Chem. A **114**, 12075 (2010).
- [11] H. B. Rosenstock, *Specific Heat of a Particle in a Box*, Am. J. Phys. **30**, 38 (1962).
- [12] S. J. Gustafson, I. M. Sigal, *Mathematical Concepts of Quantum Mechanics*, Springer, Berlim (2011).
- [13] W. Greiner, *Relativistic Quantum Mechanics: Wave Equations*, 3rd ed., Springer, Nova Iorque (2000).

- [14] A. Das, *Lectures on Quantum Field Theory*, World Scientific Publishing, Cingapura (2008).
- [15] J. D. Bjorken, S. D. Drell, *Relativistic Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, Nova Iorque (1964).
- [16] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, *Quantum Mechanics*, Wiley-VCH, Cingapura, (2005).
- [17] S. Weinberg, *The Quantum Theory of Fields - Vol 1 - Foundations*, Cambridge University Press, Nova Iorque (1995).
- [18] F. Gross, *Relativistic Quantum Mechanics and Field Theory*, Wiley-VCH Verlag GmbH e Co. KGaA, Mörlenbach (1999).
- [19] L. Álvarez-Gaumé, M. A. Vázquez-Mozo, *Introductory Lectures on Quantum Field Theory*, CERN Yellow Report **001**, 1 (2010).
- [20] A. Wachter, *Relativistic Quantum Mechanics*, Springer, Nova Iorque (2011).
- [21] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *The Classical Theory of Fields*, Vol.2, Elsevier, Moscou (1975).
- [22] S. de Leo, P. P. Rotelli, *Barrier Paradox in the Klein Zone*, Phys. Rev. A **73**, 042107 (2006).
- [23] N. Dombey, A. Calogheracos, *Seventy Years of the Klein Paradox*, Phys. Rep. **315**, 41 (1999).
- [24] N. S. Todorov, *On Klein's Paradox*, Annales de la Fondation Louis de Broglie **25**, 209 (2000).
- [25] B. R. Holstein, *Klein's Paradox*, Am. J. Phys. **66**, 6 (1998).
- [26] A. Hansen, F. Ravndal, *Klein's Paradox and Its Resolution*, Phys. Scr. **23**, 1036 (1981).
- [27] B. L. Coulter, C. G. Adler, *The Relativistic One-Dimensional Square Potential*, Am. J. Phys. **39**, 3 (1971).
- [28] T. R. Cardoso, A. S. Castro, *Sobre o Limiar para a Produção de Pares e Localização de partículas sem Spin*, Rev. Bras. Ens. Fís. **29**, 203 (2007).
- [29] D. L. Schaffer, *The Magnetic Vector Potential, Klein-Gordon Equation and Klein's Paradox in Relativistic Quantum Mechanics*, Dissertação de Mestrado, Universidade do Estado de Wichita, Cansas (2007).

- [30] R. G. Winter, *Klein Paradox for the Klein-Gordon Equation*, Am. J. Phys. **27**, 355 (1959).
- [31] F. Sauter, *Zum Kleinschen Paradoxon*, Z. Phys. **547**, 73 (1932).
- [32] C. C. Laranjeiras, J. R. N. Chiappin, *A Construção de uma Teoria de Ensembles: Antecedentes em Maxwell e Boltzmann*, Rev. Bras. Ensino Fís. **30**, 1601 (2008).
- [33] J. L. Anderson, *Principles of Relativity Physics*, Academic Press Inc., Nova Iorque (1967).
- [34] G. Chacón-Acosta, L. Dagdug, H. A. Morales-Técotl, *Manifestly Covariant Jüttner Distribution and Equipartition Theorem*, Phys. Rev. E **81**, 021126 (2010).
- [35] I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products*, Seventh Ed., Elsevier, Nova Iorque (2007).
- [36] F. A. B. Coutinho, Y. Nogami, F. M. Toyama, *General Aspects of the Bound-State Solutions of the One-Dimensional Dirac Equation*, Am. J. Phys. **56**, 10 (1988).
- [37] P. Alberto, C. Fiolhais, V. M. S. Gil, *Relativistic Particle in a Box*, Eur. J. Phys. **17**, 19 (1996).
- [38] P. Alberto, S. Das, E. C. Vagenas, *Relativistic Particle in a Three-Dimensional Box*, Phys. Lett. A **375**, 1436 (2011).
- [39] T. R. Cardoso, A. S. Castro, *The Blackbody Radiation in a D-Dimensional Universes*, Rev. Bras. Ens. Fís. **27**, 559 (2005).