Interação de uma partícula quântica eletricamente carregada com um campo magnético clássico

The interaction of a quantum charged particle with a classical magnetic field

Deyvid William da Mata Pastana¹⁰, Manuel Eleuterio Rodrigues^{*20}

¹Universidade Federal do Pará, Faculdade de Ciências Exatas e Tecnologia, Abaetetuba, PA, Brasil. ²Universidade Federal do Pará, Faculdade de Física, Programa de Pós-Graduação em Física, Belém, PA, Brasil.

Recebido em 18 de novembro de 2022. Revisado em 10 de fevereiro de 2023. Aceito em 15 de fevereiro de 2023.

Este trabalho tem como objetivo apresentar uma abordagem introdutória ao tratamento quântico de sistemas de uma partícula carregada imersa em um campo magnético constante. Em primeiro lugar, este trabalho inicia resgatando alguns conceitos básicos de Mecânica Quântica, como equação de Schrödinger e equação de Heisenberg, evolução temporal dos estados, estados e operadores no espaço de posição, etc. Esta revisão serve como uma etapa do trabalho que complementa o seguinte: a construção das ferramentas essenciais para o estudo da interação de uma partícula carregada sub ação de um campo magnético constante. Por fim, tratamos do objetivo principal do trabalho, que é mostrar que o estudo dessa interação, no formalismo da Mecânica Quântica ondulatória de Schrödinger, pode ser feito através do estudo dos níveis de Landau e o efeito Aharonov–Bohm. **Palavras chave:** Campos e partículas carregadas, níveis de landau e o efeito Aharonov–Bohm.

This work aims to make an introduction to the study of a quantum system of a charged particle immersed in a constant magnetic field. First of all, this work starts by recovering some basic concepts of Quantum Mechanics: as Schrödinger equation and Heisenberg equation, time evolution of states, states and operators in position space. This review is a step of the work that complements the next one: the construction of the essential tools for the study of the interaction of a charged particle under the action of a constant magnetic field. Finally, we present the main objective of the paper, which is to show that the study of this interaction, in the Schrödinger wave quantum mechanics formalism, can be realized through Landau levels and the Aharonov–Bohm effect. **Keywords:** Fields and charged particles, landau levels, and the Aharonov–Bohm effect.

1. Introdução

A interação de uma partícula carregada com campos eletromagnéticos é um tema que tem o interesse dos físicos desde a criação da teoria eletromagnética (século XIX). Dentro desse amplo tema, um dos aspectos que teve destaque ascendente nos últimos 100 anos foi o estudo do aprisionamento de partículas carregadas. Hoje, esse ramo do conhecimento científico lidera grandes projetos de pesquisas com orçamentos gigantescos em todo o mundo, como Sirius, Large Hadron Collider (LHC), Max IV, Paul Scherrer Institut (PSI) e European Spallation Source (ESS). Contudo, o estopim dessa linha de pesquisa foi o surgimento das armadinhas magnéticas de Penning e Paul, dispositivos que por serem capazes de fazer medições com uma alta precisão foram contempladas com o prêmio Nobel de física no ano de 1989.

Em 1920, o físico holandês Frans Michel Penning (1894–1953) terminou a pesquisa do seu doutorado, que foi conduzido juntamente com seu orientador Heike Kamerlingh Onnes, considerado um entre os

mais renomados físicos holandeses da época, por suas contribuições ao fenômeno da supercondutividade. O trabalho de doutorado de Penning versa sobre um tema *Metingen over isopyknen van gassen bij lage temperaturen* (medições das linhas constantes de densidade em um diagrama de pressão-temperatura de gases a baixas temperaturas). Mais tarde, esse tema levou o físico Penning ao ramo da exploração da interação de um campo magnético com descargas elétricas em meio gasoso, em regimes de baixas temperaturas [1]. No ano de 1924, Penning recebeu o título de doutor e, nesse mesmo ano, consegue ingressar no *Philips Natuurkundig Laboratorium* (Laboratório de Física Philips), onde deu continuidade às suas pesquisas.

Com os dispositivos disponíveis no laboratório de Philips, Penning conseguiu conduzir pesquisas com um grande rigor experimental. No entanto, por diversas vezes houveram dificuldades experimentais que demandavam métodos até então inexistentes [2]. E foi nesses momentos que Penning demonstrou sua engenhosidade criando novos métodos, assim como novos dispositivos, que permitiram a ele conseguir novos dados inéditos para a física experimental da época. Esse foi o caso das medições de pressão no interior de um tubo de vácuo,

^{*} Endereço de correspondência: esialg@gmail.com

Copyright by Sociedade Brasileira de Física. Printed in Brazil.

dentro do qual era percorrido por uma correte elétrica que sofria os efeitos de um campo magnético externo [1]. tal feito só foi possível devido a criação de um novo dispositivo que recebeu o seu nome em homenagem, o *medidor de Pennig* [3].

Nas duas décadas seguintes, 30 e 40, Penning foi autor de livros e inúmeros artigos científicos [4–9] de relevância para sua área de pesquisa. Alguns desses trabalhos foram acompanhados pelo físico alemão Hans Georg Dehmelt (1922–2017), que tinha um forte interesse no estudo sobre partículas carregadas interagindo com campos eletromagnéticos. Parte dessa motivação de Dehmelt também se deve ao contato com livro *Theory and Design* of Electron Beams de John Robinson Pierce [10], onde já havia sido proposto a ideia de aprisionar uma partícula carregada apenas pela presença de um campo externo adequado. Dehmelt, no entanto, deixou essa ideia de lado quando iniciou seu doutorado no ano 1948 pelo Kopfermann's Institute (instituto de Kopfermann).

Após ser condecorado com o título de Doutor, Dehmelt mudou-se para Washington (EUA), onde foi nomeado ao cargo de professor assistente e passou a maior parte de sua carreira acadêmica. Na década de 50, Dehmelt voltou sua atenção ao seu antigo interesse acadêmico, o aprisionamento de partículas com uso de um campo elétrico externo. Dehmelt foi bem sucedido na criação de um dispositivo capaz de manter um elétron confinado a uma região finita do espaço por alguns segundos. Esse dispositivo foi nomeado por ele como *Penning trap* (armadilha de Penning), muito devido a sua admiração pelos trabalhos do físico Penning. No ano de 1989, Dehmelt fez parte daqueles contemplados com o prêmio Nobel de Física, pelas suas contribuições ao desenvolvimento de armadilhas de íons.

Ainda na década de 50, em paralelo aos estudos de Dehmelt, o físico alemão Wolfgang Paul (1913–1993) investiu grandes esforços no desenvolvimento de um dispositivo capaz de confinar um elétron. Paul teve a ideia de construir um dispositivo para aprisionar um íon com um campo magnético de menor intensidade do que aquele induzido na armadilha de Penning, compensando essa diferença nos efeitos sofridos pela partícula, causada pela menor intensidade do campo, com a geometria do dispositivo [11]. Essa armadilha foi um sucesso, recebendo o nome de *Paul trap* (armadilha de Paul). Por esses estudos, Paul foi um dos contemplado com o prêmio Nobel de física no mesmo ano que Dehmelt.

As armadilhas de Penning e Paul foram um símbolo de referência para física experimental que explora a interação de campos eletromagnéticos com partículas carregadas. Nos anos seguintes, esses dois dispositivos foram extensamente utilizados em experiências, devido a alta precisão nas medições de gradezas relacionadas a íons que eles proporcionavam [3].

Devido ao grande sucesso e predominância dessas armadilhas de íons nas experiências física, Paul e Penning têm hoje, cada um, uma classe de armadilhas com seus nomes, devido ao surgimento de novos dispositivos resultantes de leves variações das armadilhas originalmente projetadas por Dehmelt e Paul [12–14]. Atualmente, esses dispositivos, acredita–se, podem ter uma grande importância para o desenvolvimento de tecnologias de armazenamento de informação quântica, com base em resultados, por exemplo, como o descrito em [15].

A interação entre campos magnéticos e partículas carregadas são a base de projetos de pesquisas com orçamentos gigantescos em todo o mundo, como Sirius, Large Hadron Collider (LHC), Max IV, Paul Scherrer Institut (PSI) e European Spallation Source (ESS), e possui diversas aplicações em pesquisas sofisticadas, como espectroscopia [16], física do plasma [17], física do estado sólido [18], além de que existem vários fenômenos interessantes que ocorrem na atmosfera da Terra, decorrentes dessa interação, que valem apena ser explorados por aqueles que se interessam por confinamento de partículas de altas energias [19–21].

Em 1925, com o surgimento da equação de Schrodinger [22], vários fenômenos decorrente da interação entre partículas eletricamente carregadas com campos magnéticos foram descobertos. Os níveis de Landau e o efeito Aharonov–Bohm são exemplos de fenômenos puramente quânticos, isto é, não possuem qualquer explicação clássica (física antes do século XX). Os níveis de Landau são os valores que constituem o espectro de energia quantizada de um sistema formado por uma partícula carregada e um campo magnético constante [23, 24], ao passo que o efeito Aharonov-Bohm corresponde a uma diferença de fase no padrão de sobreposição de ondas, apresentada por uma partícula carregada (em sua natureza ondulatória), que é causada pela presença de um campo magnético próximo, ainda que esse campo seja nulo na região acessível à partícula [25]. Esse primeiro fenômeno tem se mostrado influente sobre trabalhos de grande importância acadêmica, como o efeito Hall quântico, que impactou várias áreas da física, como fotônica, emaranhamento, eletrônica experimental e física da matéria condensada [26, 27], além de ter sido reverenciado com o prêmio Nobel de 1985. Já o segundo, por outro lado, ressignificou a compreensão da essência da teoria eletromagnética no século XX. Esse impacto acadêmico é a principal motivação que levou ao objeto de estudo deste artigo, a interação de uma partícula quântica eletricamente carregada com um campo magnético clássico.

Este trabalho tem como objetivo principal fazer uma abordagem introdutória ao tema: interação de uma partícula quântica eletricamente carregada com um campo magnético clássico. Mostraremos que essa abordagem pode ser vista através dos fenômenos dos níveis de Landau e o efeito Aharonov–Bohm.

Os livros e textos tradicionais geralmente utilizados em um curso de Mecânica Quântica [28–31] não apresentam uma abordagem introdutória sobre este tema. Nesse sentido, este trabalho também serve como material didático complementar para professores ou para alunos (graduação ou pós–graduação) interessados em uma tratamento introdutório ao tema. Portanto, este texto, a medida que complementa o conteúdo apresentado pelas referências bibliográficas tradicionais, é também uma alternativa para o ensino de física.

A apresentação do conteúdo será feita da seguinte forma: na seção 2 apresentamos uma revisão da modelagem de sistemas físicos com a equação de Schrödinger e Heisenberg, com a aplicação no sistema de uma partícula carregada interagindo com um campo magnético constantes; na seção 3, as ferramentas apresentadas na seção descrita anteriormente serão utilizadas para explorar o espectro de energia de um elétron se movendo na região de uma campo magnético uniforme e, também, para demonstração do efeito Aharonov–Bohm; por fim, a seção 5 é o espaço para as conclusões do trabalho.

2. Fundamentos Teóricos

No ano de 1939, a notação Braket foi sugerida por Dirac como uma maneira elegante de evitar "saltos" entre formalismos que não possuem uma correspondência muito natural na Mecânica Quântica [32]. Nessa notação, o símbolo | \rangle atribui a um determinado elemento o status de vetor (popularmente denominado como ket), ao passo que o símbolo $\langle |$ indica uma forma linear, ou funcional linear, (que é conhecido como bra). Isto posto, $\{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3\}$ vetores são escritos como $|\alpha_1\rangle$, $|\alpha_2\rangle \in |\alpha_3\rangle$, ao passo que os funcionais aparecem como $\langle x_1|, \langle x_2| e$ $\langle x_3|$. Dessa forma, a projeção do funcional $\langle x|$ sobre o vetor $|\alpha\rangle$ é dada por $\langle x|\alpha\rangle = \psi(x, \alpha)$.

Todas as informações que podem ser extraídas de um sistema físico descrito pela Mecânica Quântica estão contidas em uma função $\psi(x, \alpha)$ correspondente. O espaço que contém este grupo de funções é chamado espaço de Hilbert, ou também denominado como $L^2(\mathbb{R}^3)$. Ao longo deste trabalho usaremos a notação de Dirac [32]. Alguns aspectos de fundamentos da álgebra da Mecânica Quântica, no entanto, não serão contemplados. Para um aluno interessado em uma introdução abrangente sobre esses aspectos algébricos, é recomendado o estudo das bibliografias [28, 30, 33–36].

2.1. Operador evolução temporal

Antes de iniciarmos as discussões sobre o tratamento de sistemas com o formalismo da mecânica ondulatória de Schrödinger, faremos uma breve revisão do operador de evolução temporal. Esse operador nos permite estudar o comportamento de estados em diferentes instantes do tempo. Considere que $|\alpha, t_0\rangle$ representa um vetor de estado, sendo t_0 o instante no qual esse estado se encontra, e seja $\hat{\mathscr{T}}(t; t_0)$ o operador de evolução temporal ,que leva um ket de um dado instante de tempo t_0 ao instante $t > t_0$. Conjecturamos que

$$\hat{\mathscr{T}}(t;t_0)|\alpha,t_0\rangle = |\alpha,t\rangle \tag{1}$$

é a relação de ação desse operador sobre o ket de estado $|\alpha, t_0\rangle$.

A forma com que o operador $\hat{\mathscr{T}}(t;t_0)$ age sobre o ket tem exatamente o mesmo efeito que o operador de translação espacial. Entende-se por translação como a mudança de todos os pontos de uma quantidade vetorial, definida sobre uma região limitada de um espaço, para outra região desse mesmo espaço. Dito de outra maneira, o mesmo efeito sobre o ket ilustrado na Eq. (1) é observado, também, em coordenadas espaciais em alguns outros casos. O processo de classificação das redes de Bravais, na física do estado sólido, é um exemplo: os pontos de simetria de uma estrutura cristalina são associados pelo operador de translação, que atua sobre os vetores de base de uma célula dessa estrutura e resulta nos vetores de base (simétricos) de uma outra célula [18].

O operador evolução temporal, conforme o ilustrado na Eq. (1), não necessariamente é o mesmo para diferentes sistemas físicos. Essa colocação é bastante razoável se for levado em conta que o modo como um estado físico evolui no tempo, obviamente, deve depender do sistema que está sendo estudado. Por exemplo, considere dois sistemas quânticos $A \in B$, com as respectivas energias totais H_A e H_B . Se H_A depender explicit amente do tempo e H_B não, é bastante razoável supor que os estados no sistema A variam com o tempo de modo diferente do que os do sistema B. Devido a uma questão de generalidade, um tratamento utilizando uma evolução temporal infinitesimal $t_0 \rightarrow t_0 + dt$ (válida para qualquer sistema físico) é mais promissor do que uma abordagem usando $t_0 \rightarrow t$, com t qualquer, para casos isolados. Portanto, conjecturamos que

$$\hat{\mathscr{T}}(t_0 + dt; t_0) | \alpha, t_0 \rangle = | \alpha, t_0 + dt \rangle \tag{2}$$

é uma relação universal.

Algumas propriedades de interesse física do operador $\hat{\mathscr{T}}(t_0 + dt; t_0)$ devem ser satisfeitas. São elas:

$$\hat{\mathscr{T}}(t_0 + dt + dt; t_0 + dt)\hat{\mathscr{T}}(t_0 + dt; t_0) = \hat{\mathscr{T}}(t_0 + dt + dt; t_0),$$
(3)

$$\lim_{dt \to 0} \hat{\mathscr{T}}(t_0 + dt; t_0) = 1,$$
(4)

$$\hat{\mathscr{T}}^{\dagger}(t_0 + dt; t_0)\hat{\mathscr{T}}(t_0 + dt; t_0) = 1,$$
(5)

$$\hat{\mathscr{T}}(t_0 - dt; t_0) = \hat{\mathscr{T}}^{-1}(t_0 + dt; t_0) \quad \text{ou}$$
$$\hat{\mathscr{T}}^{-1}(t_0 + dt; t_0) \hat{\mathscr{T}}(t_0 + dt; t_0) = 1.$$
(6)

Em primeiro lugar, a propriedade (3) garante que duas translações sucessivas em um ket $|\alpha, t_0\rangle$, uma $t_0 \rightarrow$ $t_0 + dt$ seguida da aplicação $t_0 + dt \rightarrow t_0 + dt + dt$, são equivalentes a uma translação do tipo $t_0 \rightarrow t_0 + dt + dt$:

$$\hat{\mathscr{T}}(t_0 + dt + dt; t_0 + dt)\hat{\mathscr{T}}(t_0 + dt; t_0)|\alpha, t_0\rangle$$
$$= \hat{\mathscr{T}}(t_0 + dt + dt; t_0)|\alpha, t_0\rangle = |\alpha, t_0 + dt + dt\rangle.$$

Revista Brasileira de Ensino de Física, vol. 45, e20220308, 2023

Ressaltar-se que a notação $\hat{\mathscr{T}}(t_0 + dt + dt; t_0 + dt)$ foi utilizada por extenso para mostrar enfaticamente que os pontos inicial e final da translação estão distanciados por uma quantidade infinitesimal. Poderíamos, de maneira equivalente, utilizar uma notação reduzida $\hat{\mathscr{T}}(t_1+dt; t_1)$, onde o parâmetro $t_1 \equiv t_0 + dt$. Esse detalhe, embora sutil, tem grande relevância, pois $\hat{\mathscr{T}}(t_1 + dt; t_1) = \hat{\mathscr{T}}(t_0 + dt; t_0)$, já que t é um parâmetro e (t_0, t_1) são valores definidos.

Em segundo lugar, o limite definido na propriedade expressa na Eq. (4) tem uma importância no que diz respeito a invariância do ket em qualquer aspecto que não seja a evolução temporal. Obviamente, seria um inconveniente se qualquer propriedade do ket, além de uma mudança temporal, fosse alterado por ação desse operador. Nesse sentido, o limite $dt \rightarrow 0$, que leva $\hat{\mathscr{T}}(t_0 + dt; t_0)$ ao operador unitário, é uma garantia que qualquer outro aspecto de um ket de estado, que não a translação no tempo (como o spin, por exemplo), será mantido invariante por ação desse operador.

Em terceiro lugar, o que se apresenta na Eq. (5)garante a invariância da norma do ket, independente de eventuais n operações de translação que forem aplicadas sobre ele, pois

$$\begin{aligned} \langle \alpha, t_0 | \prod_{i=0}^n \hat{\mathscr{T}}^{\dagger}(t_i + dt; t_i) \hat{\mathscr{T}}(t_i + dt; t_i) | \alpha, t_0 \rangle \\ &= \langle \alpha, t_0 | \alpha, t_0 \rangle. \end{aligned}$$

Por fim, a propriedade (6) certifica que se existe uma translação dada por $\hat{\mathscr{T}}(t_0 + dt; t_0)$, então existe uma inversa, denotada $\hat{\mathscr{T}}(t_0 - dt; t_0)$, ou $\hat{\mathscr{T}}^{-1}(t_0 + dt; t_0)$, tal que a ação de ambas sobre um ket tem a mesma atuação que operador unitário. De outra maneira, duas aplicações do operador de evolução temporal em um ket de estado, a primeira levando de um instante t_0 ao instante t_1 e a segunda de t_1 regressando à t_0 , conserva o estado.

As quatro propriedades, Eqs. (3), (4), (5) e (6), são satisfeitas pelo operador da forma [28]

$$\hat{\mathscr{T}}(t_0 + dt; t_0) = 1 - \frac{i\hat{H}dt}{\hbar},\tag{7}$$

onde i é a unidade imaginária, \hat{H} é o operador hamiltoniano e \hbar a constante de Planck dividida por 2π .

Vejamos como o operador na Eq. (7) satisfaz as quatro propriedades impostas acima. Primeiro, prova de contemplação da Eq. (3):

$$\hat{\mathscr{T}}(t_0 + dt + dt; t_0 + dt)\hat{\mathscr{T}}(t_0 + dt; t_0)$$

$$:= \hat{\mathscr{T}}(t_1 + dt; t_1)\hat{\mathscr{T}}(t_0 + dt; t_0)$$

$$= \left(1 - \frac{i\hat{H}dt}{\hbar}\right)\left(1 - \frac{i\hat{H}dt}{\hbar}\right)$$

$$= 1 - \frac{i\hat{H}dt}{\hbar} - \frac{i\hat{H}dt}{\hbar} - \frac{\hat{H}^2}{\hbar^2}(dt)^2$$

Revista Brasileira de Ensino de Física, vol. 45, e20220308, 2023

$$= 1 - \frac{i\hat{H}}{\hbar}(dt + dt) - \frac{\hat{H}^2}{\hbar^2}(dt)^2$$
$$\simeq 1 - \frac{i\hat{H}}{\hbar}(dt + dt)$$
$$= \hat{\mathscr{T}}(t_1 + dt; t_0) = \hat{\mathscr{T}}(t_0 + dt + dt; t_0),$$

onde assumimos que termos quadráticos $(dt)^2$ são desprezíveis. Segundo, prova de contemplação da Eq. (4):

$$\lim_{dt\to 0}\hat{\mathscr{T}}(t_0+dt;t_0) = \lim_{dt\to 0} \left(1 - \frac{i\hat{H}dt}{\hbar}\right) = 1,$$

pois trata-se de um limite trivial. Terceiro, prova de contemplação da Eq. (5):

$$\begin{aligned} \hat{\mathscr{T}}^{\dagger}(t_0 + dt; t_0) \hat{\mathscr{T}}(t_0 + dt; t_0) \\ &= \left(1 + \frac{i\hat{H}^{\dagger}dt}{\hbar}\right) \left(1 - \frac{i\hat{H}dt}{\hbar}\right) \\ &= 1 - \frac{i\hat{H}dt}{\hbar} + \frac{i\hat{H}^{\dagger}dt}{\hbar} + \frac{\hat{H}^{\dagger}\hat{H}}{\hbar^2} (dt)^2 \\ &= 1 - \frac{i}{\hbar} (\hat{H} - \hat{H}^{\dagger}) dt + \frac{\hat{H}^{\dagger}\hat{H}}{\hbar^2} (dt)^2 \\ &\simeq 1, \end{aligned}$$

onde verifica-se que esta propriedade é satisfeita somente se $\hat{H}^{\dagger} = \hat{H}$, isto é, o operador hamiltoniano deve ser hermitiano, embora o operador evolução temporal não seja. Por fim, prova de contemplação da Eq. (6):

$$\begin{aligned} \hat{\mathscr{T}}(t_0 - dt; t_0) \hat{\mathscr{T}}(t_0 + dt; t_0) \\ &= \hat{\mathscr{T}}^{-1}(t_0 + dt; t_0) \hat{\mathscr{T}}(t_0 + dt; t_0) \\ &= \left(1 + \frac{i\hat{H}dt}{\hbar}\right) \left(1 - \frac{i\hat{H}dt}{\hbar}\right) \\ &= 1 - \frac{i\hat{H}dt}{\hbar} + \frac{i\hat{H}dt}{\hbar} + \frac{\hat{H}^2}{\hbar^2} (dt)^2 \\ &= 1 - \frac{i}{\hbar} (\hat{H} - \hat{H}) dt + \frac{\hat{H}^2}{\hbar^2} (dt)^2 \\ &\simeq 1, \end{aligned}$$

onde novamente desprezamos o termo proporcionais a $(dt)^2$. Portanto, verifica-se que o operador descrito na Eq. (7) satisfaz as quatro propriedades de interesse para Mecânica Quântica, com tanto que \hat{H} seja um operador hermitiano e os termos $(dt)^2$ sejam desprezíveis.

A dedução da forma do operador evolução temporal $\hat{\mathscr{T}}(t;t_0)$, com uma translação não infinitesimal, pode ser feita a partir da propriedade expressa na Eq. (3). Para tal, considere a aplicação de um operador cuja ação leva um ket de $t_0 \rightarrow t + dt$ equivalente a duas translações sucessivas, onde a primeira é não infinitesimal $t_0 \rightarrow t$ e sendo a segunda infinitesimal $t \rightarrow t + dt$:

$$\hat{\mathscr{T}}(t+dt;t_0) = \hat{\mathscr{T}}(t+dt;t)\hat{\mathscr{T}}(t;t_0).$$
(8)

Como aqui t é meramente um parâmetro, temos que

$$\hat{\mathscr{T}}(t+dt;t) = 1 - \frac{i\hat{H}dt}{\hbar}$$

de modo que a Eq. (8) se torna:

$$\hat{\mathscr{T}}(t+dt;t_0) = \left(1 - \frac{i\hat{H}dt}{\hbar}\right)\hat{\mathscr{T}}(t;t_0),$$

ou

$$\hat{\mathscr{T}}(t+dt;t_0) - \hat{\mathscr{T}}(t;t_0) = -\frac{iHdt}{\hbar}\hat{\mathscr{T}}(t;t_0), \quad (9)$$

ou, ainda,

$$\frac{\hat{\mathscr{T}}(t+dt;t_0) - \hat{\mathscr{T}}(t;t_0)}{dt} = -\frac{i\hat{H}}{\hbar}\hat{\mathscr{T}}(t;t_0).$$
(10)

O lado esquerdo da Eq. (10) é a definição de derivada em relação a t. Portanto, a expressão (10) se reduz a uma equação diferencial parcial de primeira ordem:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\mathscr{T}}(t;t_0) = \hat{H}\hat{\mathscr{T}}(t;t_0).$$
(11)

A equação diferencial parcial (11) é chama de equação de Schrödinger para o operador evolução temporal [28]. Vale destacar que, como se trata de uma equação parcial em t, não nos interessa se os observáveis físico (posição, momento linear, etc.) são funções implícitas do tempo. Portanto, a dependência explícita, que será caracterizada pelo operador hamiltoniano, é a particularidade única que pode distinguir as soluções da Eq. (11).

Tendo uma vez especificado o operador hamiltoniano e resolvendo a Eq. (11), teremos a expressão que descreve a forma como os estados se modificam com o passar do tempo. Em sistemas físicos simples (uma partícula numa caixa, uma partícula no entorno de uma posição de equilíbrio estável, etc.), a Eq. (11) possui uma solução analítica que permite uma análise exata da evolução temporal dos estados. Por outro lado, em sistemas bem mais complicados (uma partícula carregada com spin 1/2sob efeito de um campo magnético oscilante, o que ocorre em inúmeras situações de Ressonância Magnética Nuclear [37]), a Eq. (11) não possui solução analítica. Nesses casos, a evolução temporal é determinada por meio de métodos aproximativos, como Crank-Nicolson [38, 39] ou série de Dyson. Faremos uma apresentação muito breve a este último um pouco mais adiante.

De todo modo, as soluções da Eq. (11) podem ser classificadas de três formas (cada uma delas será caracterizada pela dependência temporal do operador hamiltoniano, como dito anteriormente), as quais serão enumeradas a seguir.

- I. O operador \hat{H} não depende explicitamente do tempo;
- II. O operador $\hat{H}(t)$ depende do tempo, com uma propriedade de comutação entre $\hat{H}(t_{\mu}) \in \hat{H}(t_{\alpha})$, onde $\mu \in \alpha$ são índices usados para indicar diferentes instantes de tempo;

III. O operador \hat{H} depende do tempo, porém não existindo a propriedade de comutação descrita no item II.

Nos sistemas físicos onde o operador \hat{H} se enquadra no item I, a solução da Eq. (11) é dada por

$$\hat{\mathscr{T}}(t;t_0) = \exp\left[-\frac{i\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)\right].$$
(12)

Em seguida, quando \hat{H} se enquadra no item II, obe
decendo a propriedade de comutação

$$\hat{H}_{t_1}\hat{H}_{t_2}\cdots\hat{H}_{t_n}=\hat{H}_{t_n}\cdots\hat{H}_{t_2}\hat{H}_{t_1},$$

a solução da Eq. (11) é dada por

$$\hat{\mathscr{T}}(t;t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t \hat{H}(t)dt\right].$$
(13)

Note que essa solução, nitidamente, é a generalização do caso anterior. Além disso, essa expressão abrange casos em que aparece alguma dependência temporal na construção da hamiltoniana. Por exemplo, no caso de um campo magnético $\vec{B}(t)$, com intensidade variada e direção constante, que interage com uma partícula carregada com spin 1/2. A direção constante é uma restrição necessária para garantir a propriedade de comutação do operador $\hat{H}(t)$. Vale lembrar que o operador nesse caso tem a forma $\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \gamma \vec{B} \cdot \vec{S}$, onde γ é a razão carga–massa e \vec{S} é o spin (o \hat{H}_0 aqui seria a hamiltoniana para o caso sem a presença do spin, sua forma será trabalhada na seção 2.3). É de conhecimento geral que as componentes do spin não comutam umas com as outras, um vez que elas obedecem a relação $[S_i, S_i] = i\hbar\epsilon_{ijk}S_k$. Caso o campo magnético esteja em uma direção no instante t_1 , a partícula terá um spin característico com a direção desse campo, ao passo que se em t_2 a direção desse campo for diferente de t_1 , o spin característico da partícula também será diferente. Portanto, como as componentes do spin não comutam, o campo magnético precisa ter a mesma direção para que os H's, definidos em diferentes instantes de tempo, comutem entre si.

Por fim, sistemas nos quais o operador \hat{H} se enquadra no item III. Nesse caso, a Eq. (11) não possui uma solução analítica, porém um modelo em termos da série de Dyson [40] pode ser usado para um estudo aproximativo:

$$\widehat{\mathscr{T}}(t;t_0) = \mathbb{1}$$

$$+ \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^1 \cdots \int_0^{t_{n-1}} \int_0^{t_n} \\ \times \widehat{H}(t_1) \cdots \widehat{H}(t_{n-1}) \widehat{H}(t_n) dt_n dt_{n-1} \cdots dt_1.$$
(14)

Essa equação representa uma generalização dos casos descritos nos itens I e II. No capítulo 14 de [40],

encontra-se a demonstração de como essa série de produtos ordenados converge na função exponencial da Eq. (13), caso comutativo, e na expressão (12), caso onde \hat{H} é considerado um coeficiente constante.

A Eq. (14) constitui um excelente método aproximativo, muito porque a série de Dyson é convergente, o que proporciona um cálculo numérico com menor custo computacional. Uma aplicação da série de Dyson para um sistema clássico formado por uma partícula carregada que interage com um campo magnético, com dependência temporal oscilante, pode ser encontrada no trabalho [41].

O conteúdo deste trabalho versa sobre um sistema com a presença de um campo magnético constante. Nesse caso, que se enquadrado no item I, recorreremos a Eq. (12) sempre que for necessária transitar de um estado dependente para um independente do tempo ou vice-versa.

2.2. Equações de Schrödinger e Heisenberg

Na subseção 2.1, foi mostrado que a forma do operador evolução temporal obedece a equação fundamental (11), cuja solução depende apenas do operador hamiltoniano. Nesta seção trataremos da modelagem de um estado $|\psi(t_0)\rangle$ associado a um sistema que é definido pelo operador hamiltoniano correspondente. Para tal, aplicamos nesse estado os operadores da Eq. (11):

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\mathscr{T}}(t;t_0)|\psi(t_0)\rangle = \hat{H}\hat{\mathscr{T}}(t;t_0)|\psi(t_0)\rangle, \qquad (15)$$

ou, equivalentemente,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle.$$
 (16)

Esta é a chamada *equação de Schrödinger*, que descreve o comportamento dos estados quânticos.

A construção do operador hamiltoniano pode ser determinado por analogia com a hamiltoniana na Mecânica Clássica. Esse processo está fundamentado em um dos postulados da Mecânica Quântica, o qual enuncia que toda quantidade física "A" mensurável é descrita por um operador adjunto \hat{A} que atua no espaço de estados [30]. Portanto, o operador hamiltoniano é obtido da hamiltoniana clássica, transformando as quantidades físicas em operadores. Esse processo é conhecido como primeira quantização.

Por exemplo, a hamiltoniana clássica para uma partícula que se move sob os efeitos de uma força associada a um potencial $V(\vec{r})$, onde $\vec{r} = (x, y, z)$ em coordenadas cartesianas, é dada por

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}),$$
 (17)

sendo m é a massa da partícula e \vec{p} o momento linear. Nesse caso, o operador hamiltoniano \hat{H} é obtido por meio da troca

$$\begin{cases} r_{\mu} \to \hat{R}_{\mu} \\ p_{\mu} \to \hat{P}_{\mu} \end{cases}$$
(18)

onde $\hat{R}_{\mu} \in \hat{P}_{\mu}$ são operadores de posição e de momentum, respectivamente.

Portanto, o operador hamiltoniano é dado por

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \sum_{\mu=1}^{3} \hat{P}_{\mu} \hat{P}_{\mu} + V(\vec{R}).$$
(19)

Em Mecânica Quântica, assim como na Mecânica Clássica, a escolha da base pode dificultar ou simplificar muito o tratamento algébrico. Umas das bases convenientes para o tratamento da equação de Schrödinger é uma combinação linear dos autoestados contínuos de posição $|\vec{r}\rangle$, os quais constituem um espaço de Hilbert com dimensão infinita. A utilização da base $|\vec{r}\rangle$ é um meio promissor por tratar–se de um autoestado do operador de posição \vec{R} , ou em outras palavras

$$\hat{R}_{\mu}|\vec{r}\rangle = r_{\mu}|\vec{r}\rangle \Leftrightarrow \begin{cases} \hat{X}|x\rangle = x|x\rangle,\\ \hat{Y}|y\rangle = y|y\rangle,\\ \hat{Z}|z\rangle = z|z\rangle, \end{cases}$$
(20)

onde r_{μ} (que representa $x, y \in z$) não são operadores, são números, autovalores de $|\vec{r}\rangle$.

Diz-se que $|\vec{r}\rangle$ representa os estados com autovalores de posição. Por esse motivo, esses estados constituem o que foi denominado de *espaço de posição* [28], que possuem a condição de ortogonalidade

$$\langle \vec{r}' | \vec{r} \rangle = \delta^3 (\vec{r}' - \vec{r}), \qquad (21)$$

onde $\delta^3(\vec{r}' - \vec{r})$ é uma delta de Dirac e $\langle \vec{r}' |$ é o dual com correspondência unívoca ao ket $|\vec{r}\rangle$.

O estado $|\psi(t)\rangle$ pode ser expandido em termos do espaço de posição $\{|\vec{r}\rangle\}$ da seguinte forma:

$$|\psi(t)\rangle = \int d^3r |\vec{r}''\rangle \langle \vec{r}''|\psi(t)\rangle = \int \psi(\vec{r}'',t) |\vec{r}''\rangle d^3r'',$$
(22)

sendo $\int d^3 r'' |\vec{r}''\rangle \langle \vec{r}''| = 1$ o operador unitário (ou a matriz identidade, no formalismo matricial) e $\psi(\vec{r}'',t) := \langle \vec{r}'' | \psi(t) \rangle$, uma função de t e da variável expandida r''_{μ} . Portanto, a função de onda $\psi(\vec{r}',t)$ é obtida através do produto interno:

$$\langle \vec{r}' | \psi(t) \rangle = \int d^3 r'' \langle \vec{r}' | \vec{r}'' \rangle \langle \vec{r}'' | \psi(t) \rangle$$
$$= \int \psi(\vec{r}'', t) \delta^3(\vec{r}' - \vec{r}'') d^3 r$$
$$= \int \psi(\vec{r}'', t) \delta(\vec{r}'' - \vec{r}') d^3 r = \psi(\vec{r}', t), \quad (23)$$

onde r'_{μ} é um número complexo.

Através de um procedimento análogo, os autovalores dos operadores $V(\vec{R}) \in \hat{P}_{\mu}$, do autoestado $|\psi(t)\rangle$ expandido na base $\{|\vec{r}\rangle\}$, são dados por:

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}' | V(\vec{R}) | \psi(t) \rangle &= \int d^3 r'' \langle \vec{r}' | V(\vec{R}'') | \vec{r}'' \rangle \langle \vec{r}' | \psi(t) \rangle \\ &= V(\vec{r}') \psi(\vec{r}', t), \end{aligned}$$
(24)

$$\begin{split} \langle \vec{r}' | \hat{P}_{\mu} | \psi(t) \rangle &= \int d^3 r \langle \vec{r}' | \hat{P}_{\mu} | \vec{r}'' \rangle \langle \vec{r}' | \psi(t) \rangle \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r'_{\mu}} \psi(\vec{r}', t), \end{split}$$
(25)

onde utilizamos a Eq. (20) na Eq. (24). A demonstração em detalhes da Eq. (25) pode ser encontrada em [30].

Multiplicando Eq. (16) por um bra $\langle \vec{r}' |$ e combinando– a com as Eqs. (19), (24) e (25), obtemos a equação de onda de Schrödinger (cuja solução são autofunções no espaço de posição \vec{r}'):

$$\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r}',t) + i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}',t) = V(\vec{r}')\psi(\vec{r}',t), \quad (26)$$

onde Δ é o operador laplaciano que atua sobre \vec{r}' .

Note que a hamiltoniana (19) não depende do tempo. Sendo esse sistema enquadrado no item I da subseção 2.1, isto é, a forma como o estado $|\psi(t)\rangle$ muda com o tempo é descrito pelo operador $\hat{\mathscr{T}}(t;t_0)$ expresso na Eq. (12). Desse modo, por meio da transição de estados dependentes para estados independentes do tempo,

$$\psi(\vec{r}',t) = \langle \vec{r}' | \psi(t) \rangle = \langle \vec{r}' | \hat{\mathscr{T}}(t;t_0) | \psi(t_0) \rangle$$
$$= \hat{\mathscr{T}}(t;t_0) \langle \vec{r} | \psi(t_0) \rangle$$
$$:= \exp\left[-\frac{iE}{\hbar}(t-t_0)\right] u_E(\vec{r}'),$$
(27)

obtemos a equação de Schrödinger independente do tempo:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\Delta u_E + E u_E = V(\vec{r})u_E, \qquad (28)$$

ondeEsão os autovalores do operador hamiltoniano, associados ao auto
estado $|\psi(t)\rangle$ pela equação de autovalores:

$$\hat{H}|\psi(t)\rangle = E|\psi(t)\rangle.$$
 (29)

A descrição dos estados de uma partícula pela Eq. (28), com um potencial $V(\vec{r})$ constante, é idêntica a descrição de uma onda pela equação Helmholtz [42],

$$\Delta u + k^2 u = 0. \tag{30}$$

Um exemplo básico: se $\mathcal{E}_i = u_i(x, y, z) \exp[-i\omega t]$ são as componentes de um campo elétrico dependente do tempo, onde u_i é dado pela equação (30), então u_i representa as componentes do campo elétrico no instante t = 0. Com esse exemplo, por comparação com nosso caso quântico, fica claro que a Eq. (28) é uma equação de campo para u_E .

Um problema que classicamente era constituído por propriedades mecânicas de uma partícula com massa desprezível, em virtude do fenômeno, torna-se uma teoria de campos quando o operador hamiltoniano associado é obtido da hamiltoniana clássica do movimento e combinado com a equação de Schrödinger. Este é o resultado do processo de primeira quantização e o que diferencia drasticamente a Mecânica Clássica da Mecânica Quântica.

Assim como no Eletromagnetismo o quadrado do campo elétrico é proporcional a probabilidade de um fóton ser encontrado em uma região do espaço, a densidade de probabilidade $P(r'_{\mu}, t)$, na mecânica ondulatória, de uma partícula ser encontrada em $\vec{r'}$ é dada por:

$$P(r'_{\mu}, t) = |\langle \vec{r}' | \psi(t) \rangle|^2 = |\psi(\vec{r}', t)|^2 = \psi(\vec{r}', t)^* \psi(\vec{r}', t),$$
(31)

onde o * foi usado para indicar o conjugado de uma função complexa. Além disso, o valor esperado para um dado observável \hat{A} é calculado através do estado $|\psi(t)\rangle$, na base de autovetores de posição, da seguinte forma:

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \int d^3 r' \psi(\vec{r}', t)^* \hat{A} \psi(\vec{r}', t). \quad (32)$$

A formulação de Schrödinger para Mecânica Quântica ondulatória pode ser caracterizada pelos observáveis independentes do tempo, ao contrário dos estados que evoluem com o tempo. Outra abordagem, proposta por Heisenberg, sugere um raciocínio oposto: os observáveis são os que variam com o tempo, ao passo que os estados permanecem estacionários. Esse simples pressuposto conduz à uma formulação da Mecânica Quântica diferente daquela proposta por Schrödinger, e ficou conhecida como representação de Heisenberg.

Na Mecânica Clássica, um sistema dinâmico é caracterizado pela posição e momento. Essas são grandezas dependentes do tempo (desconsiderando situações triviais), e nos permitem realizar operações para obter outras variáveis dinâmicas (aceleração, etc.). Nesse sentido, como os observáveis na Mecânica Quântica são equivalentes clássicos dessas grandezas (variáveis dinâmicas), espera-se que uma formulação quântica que considera os observáveis dependentes do tempo tenha mais proximidade com a formulação clássica do que a representação de Schrödinger.

Vamos utilizar a conveniente notação sugerida em [28] para diferenciar um observável na representação de Schrödinger e na representação de Heisenberg. Considere que um dado observável físico \hat{A} seja escrito como \hat{A}^S na formulação de Schrödinger e \hat{A}^H na representação de Heisenberg. Defini–se, então, um observável na formulação de Heisenberg como

$$\hat{A}^H := \hat{\mathscr{T}}^{\dagger}(t; t_0) \hat{A}^S \hat{\mathscr{T}}(t; t_0).$$
(33)

Note que caso \hat{A}^S comute com $\hat{\mathscr{T}}(t;t_0)$, levando em conta a propriedade de normalização expressa na Eq. (5), então temos que $\hat{A}^H = A^S$. Essa relação de equivalência quando satisfeita, o que só depende de $\hat{A}^S \in \hat{\mathscr{T}}(t;t_0)$ comutarem (isso felizmente ocorre em grande parte dos casos de interesse físico), garante que as definições dos observáveis \hat{A}^S na formulação de Schrödinger e \hat{A}^H na formulação de Heisenberg são equivalentes.

Derivando em relação ao tempo a equação (33) e considerando que \hat{A}^S independe do tempo, obtemos

$$\frac{d\hat{A}^{H}}{dt} = \frac{d\hat{\mathscr{T}}^{\dagger}\hat{A}^{S}\hat{\mathscr{T}}}{dt}
= \frac{d\hat{\mathscr{T}}^{\dagger}}{dt}A^{S}\hat{\mathscr{T}} + \hat{\mathscr{T}}^{\dagger}\hat{A}^{S}\frac{d\hat{\mathscr{T}}}{dt}
= \frac{i\hat{H}}{\hbar}\hat{\mathscr{T}}^{\dagger}\hat{A}^{S}\hat{\mathscr{T}} - \hat{\mathscr{T}}^{\dagger}\hat{A}^{S}\hat{\mathscr{T}}\frac{i\hat{H}}{\hbar}
= \frac{1}{i\hbar}(-\hat{H}\hat{\mathscr{T}}^{\dagger}\hat{A}^{S}\hat{\mathscr{T}} + \hat{\mathscr{T}}^{\dagger}\hat{A}^{S}\hat{\mathscr{T}}\hat{H})
= \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}^{H},\hat{H}].$$
(34)

Esta é a chamada *equação de Heisenberg*, definida em termos do comutador

$$[\hat{A}^{H}, \hat{H}] = \hat{A}^{H}\hat{H} - \hat{H}\hat{A}^{H}.$$
(35)

Atenta–se que a equação (34) é crível para os operadores de evolução temporal expressos nas Eqs. (12) e (13). Porém, o caso de $\hat{\mathscr{T}}$ dado pela Eq. (14) não satisfaz exatamente a Eq. (34). Esta situação também é tradada com métodos aproximativos.

Existem duas propriedades de comutação que são de interesse particular para este trabalho, sobre a utilização da Eq. (34). Antes de enuncia-las, considere os estados de posição $|\vec{r}\rangle$ formem os vetores de base para os observáveis \hat{A} , $\hat{B} \in \hat{C}$. Conjecturamos que a base $\{|\vec{r}\rangle\}$ diagonaliza os operadores \hat{A} , $\hat{B} \in \hat{C}$ da seguinte forma:

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} \hat{A}_1 & 0 & 0\\ 0 & \hat{A}_2 & 0\\ 0 & 0 & \hat{A}_3 \end{pmatrix}, \quad \hat{B} = \begin{pmatrix} \hat{B}_1 & 0 & 0\\ 0 & \hat{B}_2 & 0\\ 0 & 0 & \hat{B}_3 \end{pmatrix} \quad e$$
$$\hat{C} = \begin{pmatrix} \hat{C}_1 & 0 & 0\\ 0 & \hat{C}_2 & 0\\ 0 & 0 & \hat{C}_3 \end{pmatrix}.$$
(36)

Representando os elementos da matriz de cada um desses operadores com notação indicial (índice μ ou α), temos as seguintes regras de comutação:

$$\begin{bmatrix} \hat{A}_{\mu}, \sum_{\alpha=0}^{3} \hat{B}_{\alpha} \hat{C}_{\alpha} \end{bmatrix} = \sum_{\alpha=0}^{3} [\hat{A}_{\mu}, \hat{B}_{\alpha}] \hat{C}_{\alpha} + \sum_{\alpha=0}^{3} \hat{B}_{\alpha} [\hat{A}_{\mu}, \hat{C}_{\alpha}], \quad (37)$$

Revista Brasileira de Ensino de Física, vol. 45, e20220308, 2023

$$\left[\hat{A}_{\mu}, \sum_{\alpha=0}^{3} \hat{B}_{\alpha}^{2} + \hat{C}_{\alpha}\right] = \left[\hat{A}_{\mu}, \sum_{\alpha=0}^{3} \hat{B}_{\alpha}^{2}\right] + [\hat{A}_{\mu}, \hat{C}_{\alpha}].$$
(38)

Note que o primeiro comutador do lado direito a Eq. (38) inclui uma caso particular da Eq. (37), que ocorre quando $\hat{C}_{\alpha} = \hat{B}_{\alpha}$. Mais adiante, as relações (37) e (38) serão usadas como um meio de simplificar o trabalho algébrico da obtenção da versão quântica da força de Lorentz.

Como comentado anteriormente, seria de se esperar que a representação de Heisenberg fosse uma formulação mais próxima da Mecânica Clássica do que o formalismo ondulatório de Schrödinger. De fato, em Mecânica Clássica temos os chamados parênteses de Poisson [43]

$$\frac{dF}{dt} = \{F, H\},\tag{39}$$

onde F é função das variáveis dinâmicas e H é o hamiltoniano. Note que, a equação clássica (39) tem a mesma forma da representação quântica (34), mas são formalmente diferentes. A representação de Heisenberg é definida em termos de um comutador, ao passo que os parênteses de Poisson são dados por,

$$\{F,H\} = \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial F}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial F}{\partial p_k} \frac{\partial H}{\partial q_k}\right), \qquad (40)$$

onde p_k e q_k são o momento e a posição generalizados, respectivamente.

Exista uma enorme diferença formal entre as Eqs. (39) e (34). Nesse sentido, é impressionante que os parênteses de Poisson possuam uma correspondência de resultados com o comutador da representação de Heisenberg em muitos casos. Obviamente, nem todo sistema quântico tem um sistema análogo clássico. Para alguns fenômenos quânticos não existe qualquer explicação clássica. Nesses casos, a possibilidade de correspondência entre as Eqs. (39) e (34) é inexistente. Esse é o caso, por exemplo, do spin de uma partícula carregada, que teve grande destaque acadêmico com a publicação dos resultados da experiência que ficou conhecida como experimento de Stan-Gerlach (talvez tenha para a Mecânica Quântica o mesmo peso que a experiência de Michelson-Morley teve para a relatividade). Este experimento foi comentado publicamente por grandes nomes da física na época, sendo Albert Einstein, Niels Bohr, Wolfgang Pauli, alguns deles. Veja um excelente trabalho sobre essa experiência em [44].

O valor esperado de um dado observável " \hat{A}^{H} ", em um sistema de estado $|\psi(t_0)\rangle$ é dado por:

$$\begin{split} \langle \hat{A}^{H} \rangle &= \langle \psi(t_{0}) | \hat{A}^{H} | \psi(t_{0}) \rangle \\ &= \langle \psi(t_{0}) | \hat{\mathscr{T}}^{\dagger}(t;t_{0}) \hat{A}^{S} \hat{\mathscr{T}}(t;t_{0}) | \psi(t_{0}) \rangle \\ &= \langle \psi(t) | \hat{A}^{S} | \psi(t) \rangle = \langle \hat{A}^{S} \rangle. \end{split}$$
(41)

DOI: https://doi.org/10.1590/1806-9126-RBEF-2022-0308

Portanto, os valores esperados dos observáveis nas representação de Schrödinger e Heisenberg são os mesmos, como deveria ser. O contrario caracterizaria um paradoxo da teoria quântica.

2.3. Interação partícula carregada com um campo eletromagnético clássico

Esta subseção tem como objetivos fazer a construção das ferramentas necessárias para o estudo da interação de uma partícula carregada com um campo eletromagnético. Para isso, eventualmente o conteúdo tratado nas subseções anteriores serão resgatados, porém aplicados na proposta específica desta subseção.

Como já discutido anteriormente, o processo de primeira quantização consiste, primordialmente, na obtenção do operador \hat{H} por analogia com a hamiltoniana clássica do movimento. Para uma partícula carregada sob ação de uma força de Lorentz, a hamiltoniana pode ser obtida da lagrangiana (a demonstração pode ser encontrada na seção 2.3 de [41])

$$\mathcal{L}(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t) = \frac{m}{2} (\dot{\vec{r}} \cdot \dot{\vec{r}}) - Q\phi + Q\dot{\vec{r}} \cdot \vec{A}.$$

Por uma questão didática, utilizaremos a notação

$$\Pi_{\mu} \equiv m \dot{r}_{\mu}$$

para representação das componentes do momento linear, de modo que exista uma diferença clara para a notação das componentes do momento canônico, que advém da diferenciação da lagrangiana em relação as coordenadas do sistema:

$$p_{\mu} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}_{\mu}} = m \dot{r}_{\mu} + Q A_{\mu},$$

A partir dessas definições, conjecturamos que

$$\vec{\Pi} = \vec{p} - Q\vec{A}.$$
(42)

Reescrevendo a lagrangiana em termos da quantidade expressa na Eq. (42), temos

$$\mathcal{L}(\vec{r},\vec{\Pi},t) = \frac{\vec{\Pi}^2}{2m} - Q\phi + \frac{Q}{m} \sum_{\mu=1}^{3} \Pi_{\mu} A_{\mu}.$$

Portanto, a hamiltoniana do movimento pode ser obtida através da lagrangiana pela transformação de Legendre (como aparece na seção 3 de [19]),

$$\begin{split} H(\vec{r},\vec{\Pi},t) &= \frac{1}{m} \sum_{\mu=1}^{3} \Pi_{\mu} p_{\mu} - \mathcal{L}(\vec{r},\vec{\Pi},t) \\ &= \frac{1}{m} \sum_{\mu=1}^{3} \Pi_{\mu} p_{\mu} - \left(\frac{\vec{\Pi}^{2}}{2m} - Q\phi + \frac{Q}{m} \sum_{\mu=1}^{3} \Pi_{\mu} A_{\mu}\right) \\ &= \frac{\vec{\Pi}^{2}}{m} - \frac{\vec{\Pi}^{2}}{2m} + Q\phi \\ &= \frac{\vec{\Pi}^{2}}{2m} + Q\phi, \end{split}$$

DOI: https://doi.org/10.1590/1806-9126-RBEF-2022-0308

que também pode ser escrita como

$$H(\vec{r}, \vec{p}, t) = \frac{1}{2m} (\vec{p} - Q\vec{A}) \cdot (\vec{p} - Q\vec{A}) + Q\phi.$$
(43)

O operador hamiltoniano é obtido da Eq. (43), assim como anteriormente pela substituição expressa na Eq. (18), por meio da mudação das variáveis dinâmica para os operadores correspondentes na Mecânica Quântica. Seguindo esse procedimento, obtemos

$$\hat{H}(\vec{R},\vec{P}) = \frac{1}{2m} [\vec{P} - Q\vec{A}(\vec{R})] \cdot [\vec{P} - Q\vec{A}(\vec{R})] + Q\hat{\phi}(\vec{R}),$$
(44)

onde \hat{P}_{μ} e \hat{R}_{μ} são os operadores de momento e posição, nessa ordem. Por meio desses observáveis, o operador de momento linear, que tem a Eq. (42) como análogo clássico, é dado por

$$\hat{\Pi}_{\mu} = \hat{P}_{\mu} - Q\hat{A}_{\mu}.$$
(45)

Aplicando a equação de Heisenberg (34), nesse caso para o observável $\hat{A}^{H} = d\hat{R}_{\mu}/dt$ e \hat{H} dado pela Eq. (44), temos o seguinte resultado:

$$m\frac{d^2\hat{R}_{\mu}}{dt^2} = \frac{m}{i\hbar} \left[\frac{d\hat{R}_{\mu}}{dt}, \frac{\hat{\Pi}_{\alpha}^2}{2m} + Q\hat{\phi} \right] = \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{\Pi}_{\mu}, \frac{\hat{\Pi}_{\alpha}^2}{2m} + Q\hat{\phi} \right].$$
(46)

Esta equação representa o análogo quântico da força de Lorentz, por analogia com a segunda lei de Newton. É interessante que, para fins comparativos, a equação de Heisenberg para o observável $\hat{A}^H = d\hat{R}_\mu/dt$ seja escrita em termos do campo elétrico, magnético e do observável $d\hat{R}_\mu/dt$, que seriam os análogos às variáveis clássicas que constituem a força de Lorentz. Com essa perspectiva, vejamos algumas manipulações no comutador da (46):

$$\begin{bmatrix} \hat{\Pi}_{\mu}, \frac{\hat{\Pi}_{\alpha}^{2}}{2m} + Q\hat{\phi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\Pi}_{\mu}, \frac{\hat{\Pi}_{\alpha}^{2}}{2m} \end{bmatrix} + [\hat{\Pi}_{\mu}, Q\hat{\phi}]$$
$$= [\hat{\Pi}_{\mu}, \hat{\Pi}_{\alpha}] \frac{\hat{\Pi}_{\alpha}}{2m} + \frac{\hat{\Pi}_{\alpha}}{2m} [\hat{\Pi}_{\mu}, \hat{\Pi}_{\alpha}]$$
$$+ [\hat{\Pi}_{\mu}, Q\hat{\phi}], \qquad (47)$$

onde usamos as Eqs. (37) e (38)

O comutador que se repete duas vezes na equação (47) pode ser escrito, no espaço de posição $\{|\vec{r}\rangle\}$, como

$$\begin{split} \left[\hat{\Pi}_{\mu},\hat{\Pi}_{\alpha}\right] &= Q\frac{\hbar}{i} \left[\frac{\partial}{\partial r_{\mu}} - QA_{\mu},\frac{\partial}{\partial r_{\alpha}} - QA_{\alpha}\right] \\ &= Q\frac{\hbar}{i} \left\{ \left[A_{\mu},\frac{\partial}{\partial r_{\alpha}}\right] - \left[\frac{\partial}{\partial r_{\alpha}},A_{\mu}\right] \right\} \\ &= Q\frac{\hbar}{i}\frac{\partial A_{\mu}}{\partial r_{\alpha}} - Q\frac{\hbar}{i}\frac{\partial A_{\alpha}}{\partial r_{\mu}} = Qi\hbar \left(\frac{\partial A_{\alpha}}{\partial r_{\mu}} - \frac{\partial A_{\mu}}{\partial r_{\alpha}}\right) \\ &= Qi\hbar\epsilon_{\mu\alpha\gamma}(\nabla\times\vec{A})_{\gamma} = Qi\hbar\epsilon_{\mu\alpha\gamma}B_{\gamma}, \end{split}$$
(48)

Revista Brasileira de Ensino de Física, vol. 45, e20220308, 2023

e20220308-10

onde $B_{\gamma}(\vec{r})$ são as componentes do campo magnético (que aqui não é um operador devido a substituição das variáveis operacionais \hat{R}_{μ} , do potencial vetor, para os autovalores do espaço de posição r_{μ}) e $\epsilon_{\mu\alpha\gamma}$ é o símbolo de Levi-Civita. Portanto, combinando o resultado do comutador expresso na Eq. (48) com a Eq. (47), temos

$$\begin{bmatrix} \hat{\Pi}_{\mu}, \frac{\hat{\Pi}_{\alpha}^{2}}{2m} + Q\phi \end{bmatrix} = \frac{Qi\hbar}{2m} (\hat{\Pi}_{\alpha}\epsilon_{\mu\alpha\gamma}B_{\gamma} - \epsilon_{\mu\gamma\alpha}B_{\gamma}\hat{\Pi}_{\alpha}) + [\hat{\Pi}_{\mu}, Q\phi] = \frac{Qi\hbar}{2m} (\hat{\Pi}_{\alpha}\epsilon_{\mu\alpha\gamma}B_{\gamma} - \epsilon_{\mu\gamma\alpha}B_{\gamma}\hat{\Pi}_{\alpha}) + [\hat{P}_{\mu}, Q\phi].$$
(49)

Note que na Eq. (49) houve uma mudança de sinal devido uma permutação ímpar nos índices do símbolo de Levi–Civita. Além disso, destaca–se que o último termo desta equação pode ser obtido por analogia com uma relação proposta por Gottfried [24],

$$[\hat{P}_{\mu}, F(\vec{r})] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial F}{\partial r_{\mu}}, \qquad (50)$$

relação essa que é satisfeita desde que $F(\vec{r})$ possa ser escrito como uma série de potência das coordenadas de seu argumento.

Por analogia com a Eq. (50), temos que

$$[\hat{P}_{\mu}, Q\phi(\vec{r})] = Q \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \phi}{\partial r_{\mu}}.$$
(51)

Substituindo a relação (51) na Eq. (49), obtemos

$$\begin{bmatrix} \hat{\Pi}_{\mu}, \frac{\hat{\Pi}_{\alpha}^{2}}{2m} + Q\phi \end{bmatrix}$$

$$= \frac{Qi\hbar}{2m} (\hat{\Pi}_{\alpha}\epsilon_{\mu\alpha\gamma}B_{\gamma} - \epsilon_{\mu\gamma\alpha}B_{\gamma}\hat{\Pi}_{\alpha}) + \frac{Q\hbar}{i}\frac{\partial\phi}{\partial r_{\mu}}$$

$$= Qi\hbar \left[-\frac{\partial\phi}{\partial r_{\mu}} + \frac{1}{2} \left(\frac{dr_{\alpha}}{dt}\epsilon_{\mu\alpha\gamma}B_{\gamma} - \epsilon_{\mu\gamma\alpha}B_{\gamma}\frac{dr_{\alpha}}{dt} \right) \right]$$

$$= Qi\hbar \left[E_{\mu} + \frac{1}{2} \left(\frac{d\vec{r}}{dt} \times \vec{B} - \vec{B} \times \frac{d\vec{r}}{dt} \right)_{\mu} \right], \quad (52)$$

onde $E_{\mu} = -\partial \phi / \partial r_{\mu}$ são as componentes de um campo elétrico independentes do tempo (que também não são operadores, como o campo magnético).

Por fim, combinando a Eq. (52) com a equação (46), temos

$$m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = Q\left[\vec{E} + \frac{1}{2}\left(\frac{d\vec{r}}{dt} \times \vec{B} - \vec{B} \times \frac{d\vec{r}}{dt}\right)\right].$$
 (53)

Esta é a equação contém a informação sobre como o observável de posição varia com o tempo, em um sistema de uma partícula carregada que se movimenta sobre uma região sob ação dos campos elétrico e magnético independentes do tempo. Note que a equação (53), que expressa a segunda derivada do observável de posição, difere de seu análogo clássico por um novo termo que é proporcional ao campo magnético. Devido a essa diferença, conclui–se que a aceleração de uma partícula carregada na Mecânica Clássica, na presença de um campo magnético constante, varia com o tempo de modo diferente do seu análogo na Mecânica Quântica.

Calculando o valor esperado para Eq. (53) obtemos

$$m\frac{d^{2}\langle r_{\mu}\rangle}{dt^{2}} = \frac{d\langle\hat{\Pi}_{\mu}\rangle}{dt} = Q\langle E_{\mu}\rangle + \frac{Q}{2}\left\langle\frac{dr_{\alpha}}{dt}\epsilon_{\mu\alpha\gamma}B_{\gamma}\right\rangle$$
$$-\frac{Q}{2}\left\langle B_{\gamma}\epsilon_{\mu\gamma\alpha}\frac{dr_{\alpha}}{dt}\right\rangle$$
$$= Q\langle E_{\mu}\rangle + \frac{Q}{2}\left\langle\frac{dr_{\alpha}}{dt}\epsilon_{\mu\alpha\gamma}B_{\gamma}\right\rangle$$
$$+\frac{Q}{2}\left\langle-B_{\gamma}\epsilon_{\mu\gamma\alpha}\frac{dr_{\alpha}}{dt} + \frac{dr_{\alpha}}{dt}\epsilon_{\mu\alpha\gamma}B_{\gamma}\right.$$
$$-\frac{dr_{\alpha}}{dt}\epsilon_{\mu\alpha\gamma}B_{\gamma}\right\rangle$$
$$= Q\langle E_{\mu}\rangle + \frac{Q}{2}\left\langle\frac{dr_{\alpha}}{dt}\epsilon_{\mu\alpha\gamma}B_{\gamma} + \frac{dr_{\alpha}}{dt}\epsilon_{\mu\alpha\gamma}B_{\gamma}\right\rangle$$
$$+\frac{Q}{2}\left\langle B_{\gamma}\epsilon_{\mu\alpha\gamma}\frac{dr_{\alpha}}{dt} - \frac{dr_{\alpha}}{dt}\epsilon_{\mu\alpha\gamma}B_{\gamma}\right\rangle$$
$$= Q\langle E_{\mu}\rangle + Q\left\langle\frac{dr_{\alpha}}{dt}\epsilon_{\mu\alpha\gamma}B_{\gamma}\right\rangle$$
$$+\frac{1}{2i\hbar m}\left\langle\left[\hat{\Pi}_{\mu},\hat{\Pi}_{\alpha}\right]\hat{\Pi}_{\alpha} - \hat{\Pi}_{\alpha}\left[\hat{\Pi}_{\mu},\hat{\Pi}_{\alpha}\right]\right\rangle$$
$$+\frac{1}{2i\hbar m}\left\langle\left[\left[\hat{\Pi}_{\mu},\hat{\Pi}_{\alpha}\right],\hat{\Pi}_{\alpha}\right]\right\rangle, \tag{54}$$

onde usamos a Eq. (48). De maneira geral, esse resultado mostra que os valores esperados desse observável não variam com o tempo da mesma forma como seu análogo descrito pelas leis clássicas. Isso vai na contra mão do que diz o teorema de Ehrenfest. Em outras palavras, esse é um dos sistemas físicos onde teorema de Ehrenfest é violado, nesse caso pelo acréscimo de um fator

$$\Upsilon_{\mu} := \frac{1}{2i\hbar m} \left\langle \left[\left[\hat{\Pi}_{\mu}, \hat{\Pi}_{\alpha} \right], \hat{\Pi}_{\alpha} \right] \right\rangle.$$
 (55)

Quando o campo magnético é uniforme ou nulo, temos que $\Upsilon_{\mu} = 0$. Nesse caso, o teorema de Ehrenfest é satisfeito, ao passo que se, em geral, $\Upsilon_{\mu} \neq 0$, então Ehrenfest

não se aplica mais. Portanto, o campo magnético é a grandeza física responsável pela diferenciação dos valores esperados previstos pelas leis clássicas daqueles previstos pelas leis quânticas

A equação (53) descreve como um observável varia com o tempo, porém considerando estados estacionários. Para uma abordagem diferente, com foco sobre os estados do sistema, ao invés dos observáveis, utilizase a representação Schödinger, dada pela equação (16), combinada com o operador \hat{H} da Eq. (44):

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \frac{1}{2m} \left[\vec{P} - Q\vec{A}(\vec{R})\right] \cdot \left[\vec{P} - Q\vec{A}(\vec{R})\right]|\psi(t)\rangle + Q\phi(\vec{R})|\psi(t)\rangle.$$
(56)

Multiplicando a equação (56) por um bra $\langle \vec{r}' |$, e sendo $|\psi(t)\rangle$ expandido em termos de autovetores de posição $|\vec{r}\rangle$, obtemos

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle \vec{r}'|\psi(t)\rangle = \frac{1}{2m} \left[\frac{\hbar}{i}\nabla - Q\vec{A}(\vec{r}')\right]$$
$$\cdot \left[\frac{\hbar}{i}\nabla - Q\vec{A}(\vec{r}')\right]\langle \vec{r}'|\psi(t)\rangle$$
$$+ Q\phi(\vec{r}')\langle \vec{r}'|\psi(t)\rangle, \qquad (57)$$

ou, ainda,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}',t) = \frac{1}{2m} \left[\frac{\hbar}{i}\nabla - Q\vec{A}(\vec{r}')\right]$$
$$\cdot \left[\frac{\hbar}{i}\nabla - Q\vec{A}(\vec{r}')\right]\psi(\vec{r}',t)$$
$$+ Q\phi(\vec{r}')\psi(\vec{r}',t), \tag{58}$$

onde ∇ é o gradiente, que atua sobre as componentes de $\vec{r}^{\,\prime}.$

Com um pouco de álgebra, o primeiro termo do lado direito da equação (58) pode ser escrito como

$$\begin{bmatrix} \frac{\hbar}{i} \nabla - Q\vec{A} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \frac{\hbar}{i} \nabla - Q\vec{A} \end{bmatrix} \psi$$
$$= -\hbar^2 \Delta \psi - \frac{Q\hbar}{i} \nabla \cdot \vec{A} \psi - \frac{Q\hbar}{i} \vec{A} \cdot \nabla \psi + Q^2 \vec{A}^2 \psi,$$
(59)

onde Δ é o laplaciano, que atua sobre \vec{r}' .

Combinando a Eq. (58) com a Eq. (59), temos

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \frac{1}{2m} \bigg[-\hbar^2 \Delta \psi - \frac{Q\hbar}{i}\psi \nabla \cdot \vec{A} - 2\frac{Q\hbar}{i}\vec{A} \cdot \nabla \psi + Q^2\vec{A}\psi \bigg] + Q\phi\psi \qquad (60)$$

Esta é a equação de Schrödinger que descreve os estados quânticos de uma partícula carregada, dado um potencial vetor magnético \vec{A} e um potencial escalar ϕ . A equação de onda independente do tempo,

considerando que as componentes de $\vec{A} e \phi$ só dependem da posição, é obtida fazendo a transição dos estados dependentes do tempo para estados independentes do tempo, ou seja,

$$\begin{split} \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{r}' | \psi(t) \rangle \\ &= E \langle \vec{r}' | \hat{\mathscr{T}}(t; t_0) | \psi(t_0) \rangle \\ &= E \langle \vec{r}' | \psi(t_0) \rangle \hat{\mathscr{T}}(t; t_0) = E u_E(\vec{r}') \hat{\mathscr{T}}(t; t_0), \end{split}$$

1

onde E são autovalores de energia do hamiltoniano \hat{H} .

Portanto, sendo $\hat{\mathscr{T}}(t;t_0)$ dado pela Eq. (12), a equação (60) se torna

$$Eu_E = \frac{1}{2m} \left[-\hbar^2 \Delta u_E - \frac{Q\hbar}{i} u_E \nabla \cdot \vec{A} - 2 \frac{Q\hbar}{i} \vec{A} \cdot \nabla' u_E + Q^2 \vec{A}^2 u_E \right] + Q\phi u_E. \quad (61)$$

Dessa forma, os estados de uma partícula podem ser determinados pela Eq. (61), e a maneira como esses estados mudam com o tempo é obtido simplesmente pela multiplicação com o operador de evolução temporal:

$$\psi(\vec{r}',t) = \hat{\mathscr{T}}(t;t_0)u_E(\vec{r}') = \exp\left[-\frac{iE}{\hbar}\left(t-t_0\right)\right]u_E(\vec{r}').$$
(62)

A equação (60), ou (61), são os pilares fundamentais para o estudo da interação de uma partícula eletricamente carregada com campos elétricos e magnéticos uniformes. A partir desses fundamentos, duas construções teóricas, que são interessantes para um contexto de teoria eletromagnética, podem ser feitas: a versão quântica da equação de continuidade e a invariância de calibre da Eq. (60). Esses dois resultados serão levemente examinados na sequência.

2.3.1. A versão quântica da equação de continuidade

A equação (60), ou a Eq. (61) combinada com a Eq. (62), constitui o que tem de mais fundamental para estudo dos fundamentos da interação de uma partícula eletricamente carregada com campos elétricos e magnéticos uniformes. Da equação (60), um interessante resultado pode ser obtido após um exercício álgebra. Para começar, multiplicando a Eq. (60) pelo conjugado da função de onda ψ^* , temos a expressão

$$\begin{split} i\hbar\psi^*\frac{\partial}{\partial t}\psi &= \frac{\psi^*}{2m}\bigg[-\hbar^2\Delta\psi - \frac{Q\hbar}{i}\psi\nabla\cdot\vec{A} \\ &- 2\frac{Q\hbar}{i}\vec{A}\cdot\nabla\psi + Q^2\vec{A}^2\psi\bigg] + Q\phi\psi^*\psi \end{split}$$

$$= \frac{1}{2m} \left[-\hbar^2 \psi^* \Delta \psi - \frac{Q\hbar}{i} \psi^* \psi \nabla \cdot \vec{A} - 2 \frac{Q\hbar}{i} \psi^* \vec{A} \cdot \nabla \psi + Q^2 \vec{A}^2 \psi^* \psi \right] + Q \phi \psi^* \psi$$
$$= \frac{1}{2m} \left[-\hbar^2 \psi^* \Delta \psi - \frac{Q\hbar}{i} |\psi|^2 \nabla \cdot \vec{A} - 2 \frac{Q\hbar}{i} \psi^* \vec{A} \cdot \nabla \psi + Q^2 \vec{A}^2 |\psi|^2 \right] + Q \phi |\psi|^2.$$
(63)

Tomando o complexo da equação (63)e multiplicando ambos os membros por -1, obtemos

$$i\hbar\psi\frac{\partial}{\partial t}\psi^* = \frac{1}{2m} \bigg[\hbar^2\psi\Delta\psi^* - \frac{Q\hbar}{i}|\psi|^2\nabla\cdot\vec{A} \\ -2\frac{Q\hbar}{i}\psi\vec{A}\cdot\nabla\psi^* - Q^2\vec{A}^2|\psi|^2\bigg] - Q\phi|\psi|^2.$$
(64)

Somando a equação (63) com a (64), temos

$$\begin{split} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^{2} &= \frac{1}{2m} \bigg[\hbar^{2}\psi\Delta\psi^{*} - \hbar^{2}\psi^{*}\Delta\psi - 2\frac{Q\hbar}{i}|\psi|^{2}\nabla\cdot\vec{A} \\ &- 2\frac{Q\hbar}{i}\psi^{*}\vec{A}\cdot\nabla\psi - 2\frac{Q\hbar}{i}\psi\vec{A}\cdot\nabla\psi^{*} \\ &+ Q^{2}\vec{A}^{2}|\psi|^{2} - Q^{2}\vec{A}^{2}|\psi|^{2}\bigg] \\ &= \frac{1}{2m} \bigg[\hbar^{2}\psi\Delta\psi^{*} + \hbar^{2}\nabla\psi^{*}\cdot\nabla\psi \\ &- \hbar^{2}\nabla\psi\cdot\nabla\psi^{*} - \hbar^{2}\psi^{*}\Delta\psi - 2\frac{Q\hbar}{i}|\psi|^{2}\nabla\cdot\vec{A} \\ &- 2\frac{Q\hbar}{i}\psi^{*}\vec{A}\cdot\nabla\psi - 2\frac{Q\hbar}{i}\psi\vec{A}\cdot\nabla\psi^{*}\bigg] \\ &= -\frac{i\hbar}{2m}\nabla\cdot\bigg[-\frac{\hbar}{i}\psi\nabla\psi^{*} + \frac{\hbar}{i}\psi^{*}\nabla\psi - \frac{Q}{i}|\psi|^{2}\vec{A} \\ &- \frac{Q}{i}|\psi|^{2}\vec{A}\bigg] \\ &= -\frac{i\hbar}{2m}\nabla\cdot\bigg[-\frac{\hbar}{i}\nabla\psi^{*} - Q\vec{A}\psi^{*}\bigg]\psi \\ &- \frac{i\hbar}{2m}\nabla\cdot\psi^{*}\bigg[\frac{\hbar}{i}\nabla\psi - Q\vec{A}\psi\bigg]. \end{split}$$
(65)

onde, na terceira linha, acrescentamos o termo $\hbar^2 \nabla \psi^* \cdot \nabla \psi - \hbar^2 \nabla \psi \cdot \nabla \psi^* = 0$ para aplicarmos as propriedade vetoriais

$$\nabla \cdot (\psi \nabla \psi^*) = \psi \Delta \psi^* + \nabla \psi^* \cdot \nabla \psi$$

е

$$abla \cdot (\psi^*
abla \psi) = \psi^* \Delta \psi +
abla \psi \cdot
abla \psi^*$$

na sequência.

Revista Brasileira de Ensino de Física, vol. 45, e20220308, 2023

Podemos, ainda, reescrever a equação (65) na forma

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 + \nabla \cdot \left\{ \left[\frac{\vec{p} - Q\vec{A}}{m}\psi\right]^* \frac{\psi}{2} + \frac{\psi^*}{2} \left[\frac{\vec{p} - Q\vec{A}}{m}\psi\right] \right\} = 0.$$
(66)

Utilizando a nomenclatura ρ e \vec{J} para definir as quantidades

$$\rho \equiv |\psi|^2 \tag{67}$$

е

$$\vec{J} \equiv \frac{1}{2} \left\{ \left[\frac{\vec{p} - Q\vec{A}}{m} \psi \right]^* \psi + \psi^* \left[\frac{\vec{p} - Q\vec{A}}{m} \psi \right] \right\}, \quad (68)$$

então, finalmente, temos

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = 0. \tag{69}$$

Esta é a versão da equação da continuidade na Mecânica Quântica. Segundo um relato do físico Richard Feynman, numa de suas palestras relatadas em [45], esse resultado foi obtido por Schrödinger não muito depois de ter chegado a equação (16). O seu pensamento no início foi que a descrição da mecânica através de sua equação (16) fosse compatível com a descrição newtoniana. E se esse fosse o caso, a densidade de cargas e de correstes poderiam ser recuperadas através das Eqs. (67) e (68), além de que a própria teoria da eletrodinâmica poderia ser escrita em termos da função (como modelos de radiação, etc.), o que seria o início da construção de uma interpretação macroscópica da função de onda. No entanto, não demorou muito para Schrödinger perceber que isso não estava funcionando muito bem. Após resolver a equação (16) para o átomo de hidrogênio, Schrödinger constatou que não existia compatibilidade dos resultados com as previsões clássicas. Nesse caso, a sua visão macroscópica da função de onda só poderia estar incorreta. A interpretação correta da função de onda, que caracteriza $|\psi|^2$ como a densidade de probabilidade, foi uma contribuição feita pelo físico Max Born. No ano de 1954, Born foi contemplado com o prêmio Nobel de Física [46], pela sua interpretação estatística, ao lado de Walther Bothe.

Hoje, em meio ao enorme avanço na pesquisa sobre os fundamentos de Mecânica Quântica, o consenso geral sobre a mecânica ondulatória de Schrödinger pode ser resumida em uma frase: para um dado sistema físico, munido de um operador hamiltoniano correspondente, a função de onda associada não possui qualquer significado físico, mas somente a densidade de probabilidade $|\psi|^2$. No caso do átomo de hidrogênio, por exemplo, $|\psi|^2$ pode fornecer a probabilidade do elétron estar em uma região, ou com uma velocidade dentro de um intervalo específico.

Vale destacar, no entanto, que a primeira interpretação de Schrödinger não estava tão equivocada assim. Nos materiais supercondutores, os elétrons de spin -1/2 e 1/2 se agrupam em pares de spin resultante nulo. Dessa forma, os elétrons emparelhados assumem um mesmo estado, de modo que o conjunto é descrito por uma única função de onda. Nesse caso, $|\psi|^2$ representa a densidade de cargas no sistema e a função de onda tem interpretação macroscópica. Essa explicação foi proposta pela primeira vez na teoria de Bardeen-Cooper-Schrieffer (ou simplesmente teoria BCS) [47, 48], que trouxe grandes avanços para o entendimento da supercondutividade.

2.3.2. Calibre de um potencial vetor magnético

Recordamos que, na descrição clássica da mecânica, uma partícula eletricamente carregada sujeita a uma força possui uma dinâmica invariante por transformações de calibre. O termo calibre é atribuído a uma função $\Lambda(\vec{r},t)$ que modifica os potencias $\vec{A}(\vec{r},t) = \phi(\vec{r},t)$ sem que as propriedades do campo magnético e do campo elétrico sejam alteradas (veja uma discussão mais aprofundada em [49]). Definimos os novos potenciais $\vec{A}'(\vec{r},t) = \phi'(\vec{r},t)$ com o calibre $\Lambda(\vec{r},t)$ da seguinte forma:

$$\vec{A}'(\vec{r},t) = \vec{A}(\vec{r},t) + \nabla \Lambda(\vec{r},t), \tag{70}$$

$$\phi'(\vec{r},t) = \phi(\vec{r},t) - \frac{\partial}{\partial t}\phi(\vec{r},t).$$
(71)

No caso particular em que $\Lambda(\vec{r},t)$ é uma função constante no tempo, $\phi'(\vec{r},t) = \phi(\vec{r},t)$. Este é o caso de interesse para este trabalho, que é caracterizado apenas pelo calibre de um potencial vetor magnético.

Na descrição quântica da mecânica, os valores esperados de posição e momento canônico são invariantes por transformação de calibre. Para que isso fique demonstrado, as três propriedades a seguir devem ser satisfeitas:

$$\langle \vec{r}' | \vec{r} \rangle = \langle \vec{r}' | \vec{r} \rangle, \tag{72}$$

$$\langle \vec{r}' | \hat{R}_{\mu} | \vec{r} \rangle = \langle \vec{r}' | \hat{R}_{\mu} | \vec{r} \rangle, \qquad (73)$$

$$\langle \vec{r}' | (\hat{P}_{\mu} - Q\hat{A}_{\mu}) | \vec{r} \rangle = \langle \vec{r}' | (\hat{P}_{\mu} - Q\hat{A}'_{\mu}) | \vec{r} \rangle, \qquad (74)$$

onde $|\vec{r}\,\rangle$ e $|\vec{r}\,\rangle$ são os vetores de estado antes e depois do calibre do potencial vetor magnético, respectivamente.

É fácil ver que

$$|\vec{\mathbf{r}}\rangle = \exp\left[\frac{iQ}{\hbar}\Lambda(\vec{r})\right]|\vec{r}\rangle$$
 (75)

satisfaz todas as propriedades acima. O único dilema é que o valor esperado do momentum muda por transformação de calibre:

$$\begin{aligned} \langle \vec{\mathbf{r}}\,' | \vec{P} | \vec{\mathbf{r}} \rangle &= \langle \vec{r}\,' | \exp\left[-\frac{iQ}{\hbar}\Lambda(\vec{r})\right] \vec{P} \exp\left[\frac{iQ}{\hbar}\Lambda(\vec{r})\right] | \vec{r} \rangle \\ &= \exp\left[-\frac{iQ}{\hbar}\Lambda(\vec{r}\,')\right] \frac{\hbar}{i} \nabla \exp\left[\frac{iQ}{\hbar}\Lambda(\vec{r}\,')\right] \langle \vec{r}\,' | \vec{r} \rangle \end{aligned}$$

$$= \left[\frac{\hbar}{i}\nabla + Q\nabla\Lambda(\vec{r}')\right]\langle\vec{r}'|\vec{r}\rangle$$
$$= \left[\vec{P} + Q\nabla\Lambda(\vec{r}')\right]\langle\vec{r}'|\vec{r}\rangle.$$
(76)

Considere que a equação de Schrödinger (57), na base $|\vec{\mathbf{r}}\rangle$, seja escrita em termos de um potencial vetor magnético com calibre definido pela Eq. (70), ou seja,

$$\langle \vec{\mathbf{r}}' | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \psi(t) \rangle = \frac{1}{2m} \langle \vec{\mathbf{r}}' | \left[\vec{P} - Q\vec{A}(\vec{R}) - \nabla\Lambda(\vec{R}) \right] \\ \cdot \left[\vec{P} - Q\vec{A}(\vec{R}) - \nabla\Lambda(\vec{R}) \right] | \psi(t) \rangle \\ + Q \langle \vec{\mathbf{r}}' | \phi(\vec{R}) | \psi(t) \rangle.$$
(77)

Aplicando a transformação expressa na Eq. (75) sobre a Eq. (77), obtemos

$$\exp\left[-\frac{iQ}{\hbar}\Lambda(\vec{r}')\right]i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\vec{r}'|\psi(t)\rangle$$
$$=\frac{1}{2m}\exp\left[-\frac{iQ}{\hbar}\Lambda(\vec{r}')\right]$$
$$\times\left[\frac{\hbar}{i}\nabla - Q\vec{A}(\vec{r}') - \nabla\Lambda(\vec{r}',t)\right]$$
$$\cdot\left[\frac{\hbar}{i}\nabla - Q\vec{A}(\vec{r}') - \nabla\Lambda(\vec{r}')\right]\langle\vec{r}'|\psi(t)\rangle$$
$$+Q\exp\left[-\frac{iQ}{\hbar}\Lambda(\vec{r}')\right]\phi(\vec{r}')\langle\vec{r}'|\psi(t)\rangle,$$

ou, em termos da função de onda $\psi(\vec{r}', t)$,

$$\exp\left[-\frac{iQ}{\hbar}\Lambda(\vec{r}\,')\right]i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}\,',t)$$

$$=\frac{1}{2m}\exp\left[-\frac{iQ}{\hbar}\Lambda(\vec{r}\,')\right]$$

$$\times\left[\frac{\hbar}{i}\nabla - Q\vec{A}(\vec{r}\,') - \nabla\Lambda(\vec{r}\,')\right]$$

$$\cdot\left[\frac{\hbar}{i}\nabla - Q\vec{A}(\vec{r}\,') - \nabla\Lambda(\vec{r}\,')\right]\psi(\vec{r}\,',t)$$

$$+Q\exp\left[-\frac{iQ}{\hbar}\Lambda(\vec{r}\,')\right]\phi(\vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,',t).$$
(78)

Multiplicando ambos os membros da Eq. (78) por $\exp[iQ\Lambda(\vec{r}\,')/\hbar],$ temos

$$\begin{split} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}\,',t) &= \frac{1}{2m}\exp\left[-\frac{iQ}{\hbar}\Lambda(\vec{r}\,')\right] \\ &\times\left[\frac{\hbar}{i}\nabla - Q\vec{A}(\vec{r}\,') - \nabla\Lambda(\vec{r}\,')\right] \\ &\cdot\left[\frac{\hbar}{i}\nabla - Q\vec{A}(\vec{r}\,') - \nabla\Lambda(\vec{r}\,')\right] \end{split}$$

Revista Brasileira de Ensino de Física, vol. 45, e20220308, 2023

$$\times \exp\left[\frac{iQ}{\hbar}\Lambda(\vec{r}\,')\right]\psi(\vec{r}\,',t)$$

$$+ Q\phi(\vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,',t),$$
(79)

ou, ainda,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}', t) = \frac{1}{2m} \exp\left[-\frac{iQ}{\hbar} \Lambda(\vec{r}')\right] \\ \times \left[\frac{\hbar}{i} \nabla - Q\vec{A}(\vec{r}') - \nabla \Lambda(\vec{r}')\right] \left[\frac{iQ}{\hbar} \Lambda(\vec{r}')\right] \\ \cdot \left[-\frac{iQ}{\hbar} \Lambda(\vec{r}')\right] \\ \times \left[\frac{\hbar}{i} \nabla - Q\vec{A}(\vec{r}') - \nabla \Lambda(\vec{r}')\right] \\ \times \exp\left[\frac{iQ}{\hbar} \Lambda(\vec{r}')\right] \psi(\vec{r}', t) \\ + Q\phi(\vec{r}')\psi(\vec{r}', t),$$
(80)

onde o termo $\exp[iQ\Lambda(\vec{r}\,')/\hbar]\exp[-iQ\Lambda(\vec{r}\,')/\hbar]=1$ foi estrategicamente adicionado.

Da propriedade expressa na Eq. (74), temos que

$$\begin{bmatrix} -\frac{iQ}{\hbar}\Lambda(\vec{r}\,') \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\hbar}{i}\nabla - Q\vec{A}(\vec{r}\,') - \nabla\Lambda(\vec{r}\,') \end{bmatrix} \exp\left[\frac{iQ}{\hbar}\Lambda(\vec{r}\,')\right] \\ = \begin{bmatrix} \frac{\hbar}{i}\nabla - Q\vec{A}(\vec{r}\,') \end{bmatrix}.$$
(81)

Finalmente, aplicando a relação (81) na Eq. (80), obtemos

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}',t) = \frac{1}{2m} \left[\frac{\hbar}{i}\nabla - Q\vec{A}(\vec{r}')\right]$$
$$\cdot \left[\frac{\hbar}{i}\nabla - Q\vec{A}(\vec{r}')\right]\psi(\vec{r}',t)$$
$$+ Q\phi(\vec{r}')\psi(\vec{r}',t). \tag{82}$$

Isso prova que a equação de Schrödinger é invariante sob transformação de calibre. Esse procedimento algébrico não caracteriza uma restrição ao sistema propriamente, embora reivindique uma propriedade na função de onda, que pode ser expressa por meio de uma substituição do tipo

$$\Psi(\vec{r}',t) = \exp\left[\frac{iQ}{\hbar}\Lambda(\vec{r}')\right]\psi(\vec{r}',t),\tag{83}$$

onde $\Psi(\vec{r}', t) \equiv \langle \vec{r}' | \psi(t) \rangle$.

A expressão (83) não significa que duas funções de ondas, sendo ambas com diferentes potenciais vetores relacionados por um calibre, são iguais a menos de uma fase global. Sempre que um potencial vetor é calibrado, o operador hamiltoniano muda de forma, quando comparado com o sistema antes do calibre. A expressão (83) é um preço a ser pago para que essa

Revista Brasileira de Ensino de Física, vol. 45, e20220308, 2023

mudança no operador hamiltoniano conserve a física do problema, que nesse caso está centrada nos observáveis físicos. Em outras palavras, a equação de Schrödinger pode gerar diferentes soluções em diferentes calibres, porém as quantidades físicas mensuráveis de cada uma dessas soluções são iguais. Portanto, a expressão (83) deve ser entendida como relação de correspondência física entre as equações (82) e (77).

3. Um Elétron Sob Ação de um Campo Magnético Clássico

Na seção anterior foi apresentado o modelo teórico por meio do qual são tratados os problemas de uma partícula carregada sob ação dos campos magnético e elétrico independentes do tempo. Nesta seção, vamos aplicar este modelo no estudo de um caso específico no qual só temos a presença de um campo magnético constantes $\vec{B} = (0, 0, B)^T$. Daqui em diante, por razões de simplicidade, será utilizado a notação $\psi = \psi(\vec{r}, t)$. Alguns métodos aplicados nesta seção são descritos com maior aprofundamento nos trabalhos [50, 51].

A equação (60) descreve uma partícula carregada interagindo com campos elétrico e magnético constantes. Como estamos interessados apenas nos efeitos causados pelo campo magnético, definimos $\phi = 0$. Isso elimina o campo elétrico do modelo e resulta na seguinte equação:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \frac{1}{2m} \bigg[-\hbar^2 \Delta \psi - \frac{Q\hbar}{i}\psi \nabla \cdot \vec{A} - 2\frac{Q\hbar}{i}\vec{A} \cdot \nabla \psi + Q^2\vec{A}^2\psi \bigg].$$
(84)

Aplicando um calibre de Coulomb, que garante $\nabla \cdot \vec{A} = 0$, na Eq. (84), temos

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \frac{1}{2m} \bigg[-\hbar^2 \Delta \psi - 2\frac{Q\hbar}{i}\vec{A} \cdot \nabla \psi + Q^2\vec{A}^2\psi \bigg].$$
(85)

Um campo magnético uniforme pode ser escrito em termo de um potencial vetor magnético do tipo [41]

$$\vec{A} = -\frac{1}{2}(\vec{r} \times \vec{B}). \tag{86}$$

Combinando o potencial vetor (86) com a equação (85), temos

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + \frac{Q\hbar}{2mi}(\vec{r}\times\vec{B})\cdot\nabla\psi + \frac{Q^2}{8m}(\vec{r}\times\vec{B})^2\psi.$$
(87)

Aplicando a propriedade vetorial $(\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{c} = \vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})$, o segundo termo do lado direito da equação (87) pode ser escrito como

$$(\vec{r} \times \vec{B}) \cdot \nabla \psi = -\vec{B} \cdot (\vec{r} \times \nabla \psi) = -\frac{i}{\hbar} \vec{B} \cdot \vec{L} \psi, \quad (88)$$

DOI: https://doi.org/10.1590/1806-9126-RBEF-2022-0308

i

onde $\vec{L} = \vec{r} \times \frac{\hbar}{i} \nabla$ é o operador momentum angular, que satisfaz a relação de comutação $[\hat{L}_{\mu}, \hat{L}_{\alpha}] = i\hbar \sum_{\gamma} \epsilon_{\mu\alpha\gamma} \hat{L}_{\gamma}.$

Substituindo a Eq. (88) na Eq. (87), temos

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi - \frac{Q}{2m}(\vec{B}\cdot\vec{L})\psi + \frac{Q^2}{8m}(\vec{r}\times\vec{B})^2\psi.$$
(89)

Utilizando a propriedade vetorial $(\vec{a} \times \vec{b})^2 = \vec{a} \, {}^2 \vec{b} \, {}^2 - (\vec{a} \cdot \vec{b})^2$, o último termos da equação (89) pode ser escrito na forma

$$(\vec{r} \times \vec{B})^2 = \vec{r}^2 \vec{B}^2 - (\vec{r} \cdot \vec{B})^2.$$
(90)

Finalmente, com a Eq. (90) em mãos, obtemos

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi - \frac{Q}{2m}(\vec{B}\cdot\vec{L})\psi + \frac{Q^2}{8m}[\vec{r}^2\vec{B}^2 - (\vec{r}\cdot\vec{B})^2]\psi.$$
(91)

Esta é a equação de Schrödinger para um potencial vetor que contêm as informações de um campo magnético constante. Nessa representação, a percepção de qual o tipo de calibre que está sendo utilizado na Eq. (91) não é muito direta. No entanto, definindo $\vec{B} = (0, 0, B)^T$, obtemos

$$\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \frac{1}{2m} \bigg[\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2 - QB\hat{L}_z + \frac{Q^2 B^2}{4} (x^2 + y^2) \bigg] \psi, \qquad (92)$$

que é equivalente à equação (84) para o potencial vetor

$$\vec{A} = -\frac{1}{2}(By, -Bx, 0)^T.$$
(93)

Este caso em particular é conhecido como calibre simétrico do potencial vetor na quantização de Landau [23]. Outros dois calibre famosos são caracterizados pelos potenciais

$$\vec{A} = (0, Bx, 0)^T$$
 e $\vec{A} = -(By, 0, 0)^T$, (94)

que estão relacionados com a Eq. (93), através da Eq. (70), pelos calibres $\Lambda(\vec{r}) = Bxy/2 \text{ e } \Lambda(\vec{r}) = -Bxy/2$, respectivamente. Esses respectivas potenciais, presentes na Eq. (94), combinados com a Eq. (84) resultam nas seguintes equações:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \frac{1}{2m}[\hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2 + (QBy + \hat{P}_x)^2]\psi,\qquad(95)$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \frac{1}{2m}[\hat{P}_x^2 + \hat{P}_z^2 + (\hat{P}_y - QBx)^2]\psi.$$
(96)

Mais a diante, as soluções das equações (95), (96) e (92) serão demonstradas, para efeito de comparação. Antes, porém, será feita uma analise do espectro de energia desse sistema.

3.1. Níveis de Landau

Nesta subseção trataremos a quantização da energia de um elétron sob ação de um campo magnético uniforme. Por razões didáticas, apresentamos a solução de um problema particular abordagem geral à quantização da energia. Esse problema é resolvido como um exemplo 9.6 do livro [52], sendo que aqui usamos essa revisão como uma etapa que complementa o aprendizado sobre os níveis de Landau.

Considere que um elétron esteja em movimento circular sobre um anel de raio R, situado no interior de um solenoide com N boninas circulares centradas no eixo z, de modo que a trajetória da partícula esteja contida em um plano perpendicular ao campo magnético contante $\vec{B} = (0, 0, B)$, gerado pelo solenoide. Sobre a área S, delimitada pelo trajeto do elétron, existe um fluxo magnético Φ_S , como mostra a Figura 1.

O fluxo magnético pode ser calculado com a lei de Gauss

$$\Phi_S = \iint_S (\vec{B} \cdot \hat{n}) dS, \tag{97}$$

onde \hat{n} é um vetor normal à superfície.

Reescrevendo a equação (97) em termos o potencial vetor magnético, temos a expressão

$$\iint_{S} (\vec{B} \cdot \hat{n}) dS = \iint_{S} (\nabla \times \vec{A}) \cdot \hat{n} dS.$$
(98)

Aplicando o teorema de Stokes [53] no lado direito da equação (98), a integral do rotacional do potencial vetor sobre a superfície S pode ser substituída por uma integral sobre um caminho C do produto escalar do potencial vetor com um elemento de linha $d\vec{l}$ do trajeto,

$$\iint_{S} (\nabla \times \vec{A}) \cdot \hat{n} dS = \oint_{C} \vec{A} \cdot d\vec{l}.$$
 (99)

Portanto, o fluxo magnético através da superfíci
e ${\cal S}$ é dado por

$$\Phi_S = \oint_C \vec{A} \cdot d\vec{l}.$$
 (100)



Figura 1: Elétron se movimentando sobre um anel, com influência de um campo magnético constante.

O potencia vetor em coordenadas cilíndricas, o sistema que melhor se adéqua a simetria do campo, tem apenas uma coordenada $\vec{A}(r,\varphi,z) = (0, A_{\varphi}, 0)$. Seja $d\vec{l} = (Rd\varphi)\hat{\varphi}$ o elemento de linha, temos

$$\Phi_S = R \int_0^{2\pi} A_{\varphi} d\varphi.$$
 (101)

O resultado da integral Eq. (101) pode ser obtido com a utilização de um calibre adequado, do tipo $(\nabla\Gamma)_{\varphi} = (-A_{\varphi} + RB)\hat{\varphi}$, de modo que $\vec{A}' = \vec{A} + \nabla\Gamma = RB\hat{\varphi} = A'_{\varphi}\hat{\varphi}$. Portanto,

$$A_{\varphi} = \frac{\Phi_S}{2\pi R}.$$
 (102)

A equação de Schrödinger independente do tempo, que é obtida passando a Eq. (85) para coordenada cilíndricas, nesse caso com o ajuste da carga do elétron Q = e/c, é dada por

$$Eu_E = \frac{1}{2mR^2} \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{i\hbar e}{c\pi} \Phi_S \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{e^2 \Phi_S^2}{c^2 4\pi^2} \right) u_E$$
(103)

Note que o operador hamiltoniano na equação (103) obedece a relação de comutação $[\hat{H}, \hat{P}_{\varphi}] = 0$. Se essa relação é satisfeita, então a equação diferencial (103) tem uma solução do tipo

$$u_E(\phi) \sim e^{i\sigma\varphi}.$$
 (104)

Como a variável φ é cíclica $(u_E(2n\varphi) = \cdots = u_E(4\pi) = u_E(2\pi))$, então $e^0 = e^{i2\pi} = e^{i2n\pi}$, onde n é um número inteiro. Nesse caso, $\sigma 2\pi = n2\pi$, que equivale à $\sigma = n$. Portanto,

$$u_E(\phi) \sim e^{in\varphi}.\tag{105}$$

Substituindo $u_E \to e^{in\varphi}$ na Eq. (103), temos

$$E_{n} = \frac{1}{2mR^{2}} \left(\hbar^{2}n^{2} - \hbar n \frac{e\Phi_{S}}{c\pi} + \frac{e^{2}}{c^{2}} \frac{\Phi_{S}^{2}}{4\pi^{2}} \right)$$
$$= \frac{1}{2mR^{2}} \left(\hbar n - \frac{e}{c} \frac{\Phi_{S}}{2\pi} \right)^{2}$$
$$= \frac{\hbar^{2}}{2mR^{2}} \left(n - \frac{\Phi_{S}}{\Phi_{0}} \right)^{2}, \qquad (106)$$

onde $\Phi_0 = c\pi\hbar/e$.

Esta é a expressão para a energia do sistema, onda cada valor de n caracteriza um nível de energia. O conjunto com todos os valores E_n de energia é denominado espectro de Landau, ou níveis de Landau.

Note que a equação da energia (106) forma uma parábola, a medida que o valor da razão Φ/Φ_0 aumenta ou diminui. No intervalo $-1/2 < \Phi/\Phi_0 < 1/2$, o menor valor de energia com n = 0 ocorre quando



Figura 2: Representação do espectro de energia E_n em função da variação da razão Φ/Φ_0 . Adaptado de PELEG, Y., et. al. *Schaum's Outline of Quantum Mechanics*. New York: Schaum Outline Series, 1998.

 $\Phi/\Phi_0 = 0$; em $1/2 < \Phi/\Phi_0 < 3/2$, para n = 1, $\Phi/\Phi_0 = 1$ corresponde ao nível mais baixo de energia; considerando n = 2, o menor valor de E_2 dentro do intervalo $3/2 < \Phi/\Phi_0 < 5/2$ é obtido quando $\Phi/\Phi_0 = 2$. Para qualquer um desses intervalos, o pico de energia está localizado nos extremos e vale $E_{\text{Máx}} = \frac{\hbar^2}{(8mR^2)}$, ao passo que entre os extremos a energia é descrita por uma parábola que passa no valor zero de E_n . Portanto, em relação a variação da razão Φ/Φ_0 , o espectro de energia apresentam um comportamento repetitivo a cada unidade de Φ/Φ_0 , como ilustrado na Figura 2.

Sobre as informações espaciais, levando em conta que a onda está se propagando forçadamente sobre um anel circular, a probabilidade da partícula se encontrada numa posição é simplesmente $p = A_R/2\pi R$, onde A_R é um arco de circunferência. Se A_R for o cumprimento da circunferência, p = 1, que garante a existência da partícula. Com isso, a função de onda (105) deve ser normalizada com um fator $|u_E| =$ $1/\sqrt{2\pi R}$, de modo que $u_E = |u_E|e^{in\varphi}$. Como resultado, o campo magnético causa um efeito na energia da partícula, mas não afeta o carácter de posição no estado, como deveria ser, considerando o vinculo do problema. Dito de outra maneira, o elétron sempre será detectado em algum ponto do anel, mas sua energia poderá ser maior ou menor dependendo do fluxo magnético.

Com o resultado expresso na Eq. (106), pode ser percebido que os parâmetros R, $m \in \Phi/\Phi_0$ juntos não definem um único valor de energia. Uma vez que esses parâmetros sejam definidos, vai existir um valor de E_n para cada n, que está relacionado um estado $|n\rangle$ pela equação de autovalor $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$. O estado do sistema, até que um autovalor de \hat{H} seja medido, é a superposição dos autovetores $|n\rangle$. Veremos a seguir que um estado do elétron, sem que alguma restrição seja feita, é dado por $|n, l\rangle$, o que caracteriza uma sistema degenerado. Para tal fim, primeiro escrevemos a Eq. (92) da seguinte forma:

$$\begin{split} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi &= \frac{1}{2m} \bigg[\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2 - QB\hat{L}_z \\ &\quad + \frac{Q^2 B^2}{4} (x^2 + y^2) \bigg] \psi \\ &= \frac{1}{2m} \left[\vec{P} - \frac{e}{c} \vec{A} \right]^2 \psi \\ &= \frac{\vec{\Pi}^2}{2m} \psi = \frac{1}{2m} [\hat{\Pi}_x^2 + \hat{\Pi}_y^2 + \hat{P}_z^2] \psi, \end{split}$$
(107)

de onde temos que o operador hamiltoniano pode ser escrito como

$$\hat{H} = \frac{\hat{\Pi}_x^2}{2m} + \frac{\hat{\Pi}_y^2}{2m} + \frac{\hat{P}_z}{2m}.$$
 (108)

O próximo passo consiste em construir os novos operadores

$$\hat{G} := \frac{\hat{\Pi}_x^2}{2m} + \frac{\hat{\Pi}_y^2}{2m} \quad \text{e} \quad \hat{N} := \frac{\hat{P}_z}{2m},$$
 (109)

que apresentam a relação de comutação

$$[\hat{G}, \hat{N}] = 0. \tag{110}$$

A relação de comutação (110) garante que existe uma base ortonormal de autoestados comuns para $\hat{G} \in \hat{N}$, e também, consequentemente, para \hat{H} , visto que este pode ser escrito como a soma dos outros dois. Digamos que essa base seja $|n, l\rangle$ (posteriormente, será provado que n e l são números inteiros), logo

$$\hat{H}|n,l\rangle = \hat{N}|n,l\rangle + \hat{G}|n,l\rangle.$$
(111)

Se $|n,l\rangle$ é auto
estado de $\hat{N},$ sendono autovalor desse operador,
então

$$\hat{N}|n,l\rangle = \frac{\hat{P}_z^2}{2m}|n,l\rangle = \frac{\hbar^2 n^2}{2m}|n,l\rangle.$$
(112)

Por outro lado, \hat{G} pode ser escrito convenientemente na forma

$$\hat{G} = \frac{\hat{\Pi}_x^2}{2m} + \frac{\hat{\Pi}_y^2}{2m} = \frac{\hat{\Pi}_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\left(\frac{eB}{mc}\right)^2 \left(\frac{\hat{\Pi}_x c}{eB}\right)^2 = \frac{\hat{\Pi}_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\left(\frac{eB}{mc}\right)^2 \left(y - \frac{c\hat{P}_x}{eB}\right)^2, \quad (113)$$

O observável \hat{P}_x não comuta com \hat{H} . Nesse caso, $|n,l\rangle$ não é autoestado de \hat{P}_x . Sendo assim, em uma

representação geral, escrevemos

$$\hat{P}_{x}|n,l\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} |n,l\rangle \langle n',l'|\hat{P}_{x}|n,l\rangle$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{n'=1}^{\infty} \sum_{l'=1}^{\infty} p_{n'l'}|n,l\rangle \langle n',l'|n,l\rangle$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{n'=1}^{\infty} \sum_{l'=1}^{\infty} p_{n'l'}|n,l\rangle \delta_{n'n} \delta_{l'l}$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} p_{nl}|n,l\rangle, \qquad (114)$$

onde usamos a condição de ortogonalidade $\langle n', l'|n, l \rangle = \delta_{n'n} \delta_{l'l}$, assumida para os vetores de estados degenerados, e o operador de projeção $\hat{1} = |n, l\rangle \langle n', l'|$, que satisfaz $\hat{1}|n, l\rangle = \hat{1}^2 |n, l\rangle = |n, l\rangle$ para n' = n e l' = l.

Na equação (114), p_{nl} são números correspondentes aos estados degenerados $|n, l\rangle$, sendo ambos o que resulta da ação do operador \hat{P}_x sobre os estados $|n, l\rangle$. Além disso, note que, pela segunda linha na Eq. (114), temos

$$\hat{P}_x = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{n'=1}^{\infty} \sum_{l'=1}^{\infty} p_{n'l'} |n,l\rangle \langle n',l'|.$$
(115)

Portanto, levando em consideração a Eq. (115), o operador \hat{G} satisfaz a seguinte equação:

$$\hat{G}|n,l\rangle = \left[\frac{\hat{\Pi}_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\left(\frac{eB}{mc}\right)^2 \left(y - p_{nl}\right)^2\right]|n,l\rangle, \quad (116)$$

com p_{nl} constante.

Nesse caso, o operador \hat{G} definido na Eq. (116), que têm $|n,l\rangle$ como autoestados, é idêntico ao operador hamiltoniano do oscilador harmônico simples, com um potencial simétrico entorno do ponto p_{nl} e frequência de oscilação $\omega = eB/mc$. Portanto, por analogia com o oscilador harmônico quântico [28–30], os autovalores de \hat{G} são dados por

$$\hat{G}|n,l\rangle = \frac{eB\hbar}{mc} \left(l + \frac{1}{2}\right)|n,l\rangle, \qquad (117)$$

para quais quer valores p_{nl} .

Finalmente, com as Eqs. (117), (112) e (111), os autovalores E_{nl} de \hat{H} , que estão associados aos autoestados $|n, l\rangle$ pela Eq. (111), são dados pela seguinte fórmula:

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2 n^2}{2m} + \frac{eB\hbar}{mc} \left(l + \frac{1}{2} \right).$$
 (118)

Esta é a fórmula de Landau, que expressa corretamente os níveis de energia desse sistema quântico. Destaca-se que a expressão (118) se mantém a mesma nos casos particulares em que $\vec{A} = (-By, 0, 0)^T$ ou $\vec{A} = (0, Bx, 0)^T$, como será mostrado mais a diante. No entanto, o procedimento que leva à Eq. (118) não é o mesmo para diferentes calibre. Para leitores interessados, no trabalho [54] são apresentados em detalhes alguns métodos de tratamento que levam à obtenção da fórmula (118), com diferentes calibres do potencial vetor magnético.

A quantização da energia de partículas carregadas na presença de magnético constante é o fenômeno chamado de níveis de Landau. Esse fenômeno teve uma grande importância na formulação de uma explicação para o observável experimental *resistência da corrente elétrica* em baixas temperaturas, o efeito Hall quântico, que foi contemplada com o Nobel de física na década de 80 e teve um forte impacto em várias áreas da física [26, 27] (eletrônica experimental, fotônica, física da matéria condensada e emaranhamento). Além disso, esse efeito tem influenciando importantes trabalhos, como [55], ganhador do prêmio Nobel de 2016.

Os níveis de Landau, além de tudo, possuem inúmeras aplicações sofisticadas, como o problema de uma partícula livre tratado com a equação de Klein– Gordon em espaço-tempo curvo [56], efeito de pseudo forças (referenciais girantes) nas energias [57], efeitos da magnetização de correntes tratados com a equação de Schrödinger em espaços curvos [58] e, recentemente, ideias de quantização para átomos neutros, que são equivalentes a quantização de Landau [59].

3.2. Soluções da equação de Schrödinger

Anteriormente, foi mostrado uma das formas de tratamento que resulta na obtenção da energia de uma partícula na presença de um campo magnético. Nesta etapa do trabalho, serão apresentadas as soluções das equações (96), (95) e (92), junto aos métodos para obtenção das mesmas. Juntando isso a etapa anterior, os níveis de Landau, teremos os autovalores de energia e a função de onda através da qual os estados quânticos são caracterizados. Ou seja, a descrição completa do sistema de uma partícula carregada que interage com um campo magnético $\vec{B} = (0,0,B)^T$. O conteúdo desta subseção segue alguns dos passos apresentados nas bibliografias [52, 60].

Por uma questão de simplicidade, escrevemos as equações (96), (95) e (92) em termos da função de onda $u_E(\vec{r})$ independente do tempo da seguinte forma:

$$Eu_E = \frac{1}{2m} \left[\hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2 + \left(\frac{eBy}{c} + \hat{P}_x \right)^2 \right] u_E,$$
$$\vec{A} = (-By, 0, 0)^T, \qquad (119)$$

$$Eu_E = \frac{1}{2m} \left[\hat{P}_x^2 + \hat{P}_z^2 + \left(\hat{P}_y - \frac{eBx}{c} \right)^2 \right] u_E,$$
$$\vec{A} = (0, Bx, 0)^T, \qquad (120)$$

Revista Brasileira de Ensino de Física, vol. 45, e20220308, 2023

$$Eu_E = \frac{1}{2m} \left[\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 - \frac{eB}{c} \hat{L}_z + \frac{e^2 B^2}{4c^2} \left(x^2 + y^2 \right) \right] u_E,$$
$$\vec{A} = \left(-\frac{By}{2}, \frac{Bx}{2}, 0 \right)^T.$$
(121)

As equações (119), (120) e (121) são classificadas como EDPs lineares de segunda ordem, com variáveis (x, y, z). Embora cada uma dessas equações esteja interligada com as outras por um calibre adequado, o método de solução por variar ligeiramente. O potencial vetor magnético com calibre simétrico (121) constitui a equação com maior complexidade quando comparada com as Eqs. (119) e (120). As soluções dessas equações serão apresentadas por ordem de complexidade, e por esse critério a Eqs. (121) será a ultima.

3.2.1. Solução da equação de Schrödinger com o calibre de Landau $\vec{A} = -(By, 0, 0)^T$

Em primeiro lugar, escrevemos a Eq. (119) na sugestiva forma:

$$Eu_{E} = \left[\frac{\hat{P}_{z}^{2}}{2m} + \frac{\hat{P}_{y}^{2}}{2m} + \frac{1}{2}m\left(\frac{eB}{mc}\right)^{2}\left(y + \frac{c\hat{P}_{x}}{eB}\right)^{2}\right]u_{E},$$
(122)

onde o hamiltoniano foi reescrito como

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_z^2}{2m} + \frac{\hat{P}_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\left(\frac{eB}{mc}\right)^2 \left(y + \frac{c\hat{P}_x}{eB}\right)^2.$$
 (123)

Com essa representação, pode ser facilmente percebido que \hat{H} satisfaz as seguintes relações de comutação:

$$[\hat{H}, \hat{P}_x] = \frac{1}{2m} [\hat{P}_x^2, \hat{P}_x] + \frac{eB}{mc} [\hat{P}_x, \hat{P}_x] = 0, \qquad (124)$$

$$[\hat{H}, \hat{P}_z] = \frac{1}{2m} [\hat{P}_z^2, \hat{P}_z] = 0.$$
(125)

As relações de comutação (124) e (125) garantes a existência de uma base de autoestados comuns para os operadores \hat{P}_x , \hat{P}_z e \hat{H} . Nesse caso, supondo que σ e η são autovalores de \hat{H} nessa base tal que $\hat{P}_z u_E = \eta u_E$ e $\hat{P}_x u_E = \sigma u_E$, podemos escolher

$$u_E = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\eta z + \sigma x)\right]\mathfrak{A}(y), \qquad (126)$$

onde as constantes de proporcionalidades das exponenciais foram introduzidas na função $\mathfrak{A}(y)$.

Como as exponenciais complexas são cíclicas, temos que $u_E(2l\pi, y, 2n\pi) = u_E(0, y, 0)$, onde $l \in n$ são números inteiros. Portanto, $\eta = n \in \sigma = l$, de modo que a Eq. (126) se torna

$$u_E = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(nz+lx)\right]\mathfrak{A}(y).$$
(127)

Combinando as Eqs. (127) e (122), temos

$$E_{l}\mathfrak{A}(y) = -\frac{\hbar^{2}}{2m}\frac{d^{2}}{dy^{2}}\mathfrak{A}(y) + \frac{1}{2}m\left(\frac{eB}{mc}\right)^{2}\left(y + \frac{cl}{eB}\right)^{2}\mathfrak{A}(y),$$
(128)

ou

$$\frac{d^2}{dy^2}\mathfrak{A}(y) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E_l - \frac{1}{2}m\left(\frac{eB}{mc}\right)^2 \left(y + \frac{cl}{eB}\right)^2 \right] \mathfrak{A}(y) = 0,$$
(129)

onde foi introduzido a energia característica da equação (128),

$$E_l = E - \frac{\hbar^2 n^2}{2m}.$$
 (130)

Note que a equação (129) é idêntica a equação do oscilador harmônico quântico, cuja expressão da energia já é conhecida da Eq. (117). Logo,

$$E_l = \frac{eB\hbar}{mc} \left(l + \frac{1}{2} \right). \tag{131}$$

Dessa forma, combinando as equações (130) e (131), obtemos a energia E do sistema,

$$E = \frac{\hbar^2 n^2}{2m} + \frac{eB\hbar}{mc} \left(l + \frac{1}{2} \right), \qquad (132)$$

que é idêntica a fórmula dos níveis de Landau expressa na Eq. (118).

Combinando a Eq. (129) com a Eq. (131), temos

$$\frac{d^2}{dy^2}\mathfrak{A}(y) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[\frac{eB\hbar}{mc} \left(l + \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2}m \left(\frac{eB}{mc} \right)^2 \left(y + \frac{cl}{eB} \right)^2 \right] \mathfrak{A}(y) = 0.$$
(133)

Fazendo uma mudança de variável $y'=y+cl/eB \rightarrow dy'/dt=dy/dt$ na Eq. (133), obtemos

$$\frac{d^2}{dy'^2}\mathfrak{A}(y') + \frac{2m}{\hbar^2} \left[\frac{eB\hbar}{mc} \left(l + \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2}m \left(\frac{eB}{mc} \right)^2 y'^2 \right] \mathfrak{A}(y') = 0.$$
(134)

A equação (134) pode ainda ser escrita numa forma mais sugestiva mediante a substituição de variável $\xi=\alpha y',$ onde $\alpha\equiv (eB/c\hbar)^{1/2}$, que se relaciona com a variável antiga da seguinte forma:

$$\begin{cases} \frac{d}{dy'}\mathfrak{A}(y') = \frac{d}{d\xi}\mathfrak{A}(\xi)\frac{d\xi}{dy'} = \alpha\frac{d}{d\xi}\mathfrak{A}(\xi)\\ \frac{d^2}{dy'^2}\mathfrak{A}(y') = \frac{d}{d\xi}\left(\alpha\frac{d}{d\xi}\mathfrak{A}(\xi)\right)\frac{d\xi}{dy'} = \alpha^2\frac{d^2}{d\xi^2}\mathfrak{A}(\xi) \end{cases}$$
(135)

Ś

Aplicando a substituição (135) na Eq. (134), temos

$$\frac{d^2}{d\xi^2}\mathfrak{A}(\xi) + [2l+1-\xi^2]\mathfrak{A}(\xi) = 0.$$
(136)

Esta a chamada equação diferencial de Hermite, que tem uma solução em termos do polinômio de Hermite

 \mathcal{H}_l (ver a demonstração em detalhes em [61, 62]), manifestamente

$$\mathfrak{A}(\xi) = A_l \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \mathcal{H}_l(\xi), \qquad (137)$$

onde A_l é uma constante e os termos da função \mathcal{H}_l podem ser expressados através da fórmula

$$\mathcal{H}_{l}(\xi) = (-1)^{l} e^{\xi^{2}} \frac{d^{l}}{d\xi^{l}} e^{-\xi^{2}}.$$
 (138)

Em termos dos parâmetros e variáveis originais, a solução Eq. (137) assume a forma

$$\mathfrak{A}(y) = A_l \exp\left[-\frac{eB}{2\hbar c}\left(y + \frac{cl}{eB}\right)^2\right] \mathcal{H}_l\left(y + \frac{cl}{eB}\right).$$
(139)

A normalização da função $\mathfrak{A}(y)$ é obtida a partir da integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathfrak{A}^*(y)\mathfrak{A}(y)dy$$
$$= A_l^2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{eB}{\hbar c}\left(y + \frac{cl}{eB}\right)^2\right] \mathcal{H}_l^2\left(y + \frac{cl}{eB}\right)dy$$
$$= A_l^2 \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}} \sqrt{\pi} 2^l l! = 1, \qquad (140)$$

de onde obtemos

$$A_l = \left(\frac{eB}{\pi\hbar c}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^l l!}}.$$
 (141)

Portanto, a solução expressa na Eq. (139), com a constante determinada Eq. (141), é escrita como

$$\mathfrak{A}(y) = \left(\frac{eB}{\pi\hbar c}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^{l}l!}}$$

$$\times \exp\left[-\frac{eB}{2\hbar c}\left(y + \frac{cl}{eB}\right)^{2}\right] \mathcal{H}_{l}\left(y + \frac{cl}{eB}\right).$$
(142)

Finalmente, retornando à equação (127), temos

$$u_E = \left(\frac{eB}{\pi\hbar c}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^l l!}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \left(nz + lx\right)\right]$$
$$\times \exp\left[-\frac{eB}{2\hbar c} \left(y + \frac{lc}{eB}\right)^2\right] \mathcal{H}_l\left(y + \frac{lc}{eB}\right).$$
(143)

Note que a função $\psi(\vec{r},t)$ é obtida aplicando-se o operador evolução temporal na Eq. (143), ou seja, ambas diferem uma da outra por uma exponencial complexa e por consequência tem a mesma densidade de probabilidade. Em outras palavras, dizemos que a partícula possui estados estacionários, dado que a densidade de probabilidade não varia com o tempo, a saber $|u_E(\vec{r})|^2 = |\psi(\vec{r},t)|^2$.

3.2.2. Solução da equação de Schrödinger com o calibre de Landau $\vec{A} = (0, Bx, 0)^T$

Em primeiro lugar, escrevemos a Eq. (120)na sugestiva forma:

$$Eu_{E} = \left[\frac{\hat{P}_{x}^{2}}{2m} + \frac{\hat{P}_{z}^{2}}{2m} + \frac{1}{2}m\left(\frac{eB}{mc}\right)^{2}\left(x - \frac{c\hat{P}_{y}}{eB}\right)^{2}\right]u_{E},$$
(144)

onde o hamiltoniano foi reescrito como

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_x^2}{2m} + \frac{\hat{P}_z^2}{2m} + \frac{1}{2}m\left(\frac{eB}{mc}\right)^2 \left(x - \frac{c\hat{P}_y}{eB}\right)^2.$$
 (145)

Com essa representação, não é difícil constatar que \hat{H} satisfaz as relações de comutação

$$[\hat{H}, \hat{P}_y] = [\hat{H}, \hat{P}_z] = 0, \qquad (146)$$

que garantem a existência de uma base de autoestados comuns para os operadores \hat{H} , \hat{P}_y e \hat{P}_z . Se nessa base n e l são autovalores da \hat{H} tal que as relações $\hat{P}_z u_E = n u_E$ e $\hat{P}_y u_E = l u_E$ sejam satisfeitas, podemos escolher

$$u_E = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(nz+ly)\right]\mathfrak{A}(x), \qquad (147)$$

onde $n \in l$ são números inteiros, devido ao caráter cíclico da função exponencial complexa.

Substituindo a Eq. (147) na Eq. (144), temos Combinando as Eqs. (127) e (122), temos

$$E_{l}\mathfrak{A}(x) = -\frac{\hbar^{2}}{2m}\frac{d^{2}}{dx^{2}}\mathfrak{A}(x) + \frac{1}{2}m\left(\frac{eB}{mc}\right)^{2}\left(x - \frac{cl}{eB}\right)^{2}\mathfrak{A}(x), \quad (148)$$

ou

$$\frac{d^2}{dx^2}\mathfrak{A}(x) + \frac{2m}{\hbar^2} \times \left[E_l - \frac{1}{2}m\left(\frac{eB}{mc}\right)^2\left(x - \frac{cl}{eB}\right)^2\right]\mathfrak{A}(x) = 0,$$
(149)

onde foi introduzido a energia característica da equação (128),

$$E_l = E - \frac{\hbar^2 n^2}{2m}.\tag{150}$$

A Eq. (150) é formalmente idêntica a equação de oscilador harmônico simples, com frequência de oscilação $\omega = eB/mc$. Portanto, por analogia com o oscilador harmônico quântico, temos que os valores de energia E_l são dados pela fórmula

$$E_l = \frac{eB\hbar}{mc} \left(l + \frac{1}{2} \right). \tag{151}$$

Revista Brasileira de Ensino de Física, vol. 45, e20220308, 2023

Combinando as Eq. (150) e (151), temos

$$E = \frac{\hbar^2 n^2}{2m} + \frac{eB\hbar}{mc} \left(l + \frac{1}{2}\right), \tag{152}$$

que é uma expressão idêntica a fórmula da quantização de Landau Eq. (118) e também a Eq. (132), como deveria ser.

Combinando a Eq. (150) com a Eq. (151), temos

$$\frac{d^2}{dx^2}\mathfrak{A}(x) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[\frac{eB\hbar}{mc} \left(l + \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2}m \left(\frac{eB}{mc} \right)^2 \left(x - \frac{cl}{eB} \right)^2 \right] \mathfrak{A}(x) = 0, \quad (153)$$

que, por analogia com a Eq. (133), tem como solução

$$u_{E_{nl}}(x,y,z) = \left(\frac{eB}{\pi\hbar c}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^{l}l!}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(nz+ly\right)\right]$$
$$\times \exp\left[-\frac{eB}{2\hbar c}\left(x-\frac{cl}{eB}\right)^{2}\right] \mathcal{H}_{j}$$
$$\times \left(x-\frac{cl}{eB}\right). \tag{154}$$

A solução na Eq. (154) exprime as autofunções $u_{E_{nl}}$ de uma elétron com estado $|u_{E_{nl}}\rangle$ e autovalores de energia E_{nl} , dados pela Eq. (152). Note que, aplicando uma transformação do tipo x = -y na função de onda Eq. (154), temos

$$u_{E_{nl}} = \left(\frac{eB}{\pi\hbar c}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^{l}l!}}$$

$$\times \exp\left[\frac{i}{\hbar} \left(nz - lx\right)\right]$$

$$\times \exp\left[-\frac{eB}{2\hbar c} \left(y + \frac{cl}{eB}\right)^{2}\right] \mathcal{H}_{l} \left(-y - \frac{cl}{eB}\right).$$
(155)

Utilizando a paridade do polinômio de Hermite,

$$\mathcal{H}_l\left(-y - \frac{cl}{eB}\right) = \mathcal{H}_l\left(y + \frac{cl}{eB}\right), \qquad (156)$$

escrevemos a Eq. (155) na seguinte forma:

$$u_{E_{nl}} = \left(\frac{eB}{\pi\hbar c}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^{l}l!}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(nz - lx\right)\right]$$
$$\times \exp\left[-\frac{eB}{2\hbar c}\left(y + \frac{cl}{eB}\right)^{2}\right] \mathcal{H}_{l}\left(y + \frac{cl}{eB}\right),$$
(157)

que claramente caracteriza uma relação de simetria entre a descrição dos estados do caso anterior e do presente – ver a Eq. (143). Além disso, a transformação x = -y também implica $|x\rangle = -|y\rangle$. Desse modo, o potencial vetor $\vec{A} = (0, Bx, 0)^T$ passa a ser $\vec{A} = (-By, 0, 0)^T$. Portanto, x = -y é uma transformação que expressa uma relação de simetria entre as autofunções e os potenciais deste problema e do caso anterior.

3.2.3. Solução da equação de Schrödinger com o calibre simétrico de Landau

 $ec{A}=-rac{1}{2}(oldsymbol{B}oldsymbol{y},-oldsymbol{B}oldsymbol{x},oldsymbol{0})^{T}$

Em primeiro lugar, escrevemos a Eq. (121) da seguinte forma:

$$Eu_E = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - \frac{\omega}{2} \hat{L}_z + \frac{m}{2} \left(\frac{\omega}{2} \right)^2 (x^2 + y^2) \right] u_E, \quad (158)$$

onde o hamiltoniano foi reescrito como

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - \frac{\omega}{2} \hat{L}_z + \frac{1}{2} m \left(\frac{\omega}{2} \right)^2 (x^2 + y^2), \quad (159)$$

em termo da quantidade $\omega = eB/mc$.

.

Como próximo passo da solução, a hamiltoniana expressa na Eq. (159) será escrita em termos de coordenas polares (ρ, ϕ, z) . Para tal, temos as seguintes relações de transformação:

$$\begin{cases} x^{2} + y^{2} = \rho^{2} \cos^{2} \phi + \rho^{2} \sin^{2} \phi = \rho^{2} \\ \hat{L}_{z} = \left(\vec{\rho} \times \frac{\hbar}{i} \nabla \right)_{z} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ \left(\frac{\partial^{2}}{\partial x^{2}} + \frac{\partial^{2}}{\partial y^{2}} + \frac{\partial^{2}}{\partial z^{2}} \right) \\ = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^{2}} \frac{\partial^{2}}{\partial \phi^{2}} + \frac{\partial^{2}}{\partial z^{2}} \\ = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{1}{\rho^{2}} \frac{\hat{L}_{z}^{2}}{\hbar^{2}} + \frac{\partial^{2}}{\partial z^{2}} \end{cases}$$
(160)

Aplicando na Eq. (158) as relações de transformação expressas na Eq. (160), temos

$$Eu_E = \left[-\frac{\hbar^2}{2m\rho} \frac{\partial}{\partial\rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial\rho} \right) + \frac{\hat{L}_z^2}{2m\rho^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\omega}{2} \hat{L}_z + \frac{m}{2} \left(\frac{\omega}{2} \right)^2 \rho^2 \right] u_E,$$
(161)

que é a equação de Schrödinger para o novo hamiltoniano

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{\hat{L}_z^2}{2m\rho^2} + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\omega}{2} \hat{L}_z + \frac{m}{2} \left(\frac{\omega}{2} \right)^2 \rho^2.$$
(162)

DOI: https://doi.org/10.1590/1806-9126-RBEF-2022-0308

Note que o hamiltoniano descrito na Eq. (161) obe
dece as relações de comutação

$$\left[\hat{H}, \hat{L}_z\right] = \left[\hat{H}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}\right] = 0 \tag{163}$$

$$[\hat{H}, \hat{P}_z] = \left[\hat{H}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}\right] = 0.$$
(164)

As relações (163) e (164) indicam a existência de uma base de autoestados comuns para os operadores \hat{H} , \hat{L}_z e \hat{P}_z . Nesse caso, se α e β são autovalores (números inteiros) de \hat{H} tal que temos as condições $\hat{L}_z u_E(\rho, \phi, z) = \hbar \alpha u_E(\rho, \phi, z)$ e $\hat{P}_z u_E(\rho, \phi, z) = \beta u_E(\rho, \phi, z)$, podemos escolher

$$u_E = A \exp\left[i\left(\alpha\phi + \frac{\beta}{\hbar}z\right)\right]\mathfrak{A}(\rho), \qquad (165)$$

onde A é uma constante.

A equação (165) representa uma função exponencial complexa das coordenada ϕ e z. Como a exponencial complexa é cíclica, devemos ter $\alpha = k$ e $\beta = s$, onde k e s são um números inteiro. Logo,

$$u_E = A \exp\left[i\left(k\phi + \frac{s}{\hbar}z\right)\right]\mathfrak{A}(\rho).$$
(166)

Substituindo a Eq. (166) na equação (161), temos

$$E\mathfrak{A}(\rho) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2}{d\rho^2} \mathfrak{A}(\rho) + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \mathfrak{A}(\rho) - \frac{k^2}{\rho^2} \mathfrak{A}(\rho) - s^2 \mathfrak{A}(\rho) \right] \\ - \frac{\hbar\omega}{2} k \mathfrak{A}(\rho) + \frac{m}{8} \omega^2 \rho^2 \mathfrak{A}(\rho), \qquad (167)$$

ou,

$$\left[E + \frac{\hbar\omega}{2}k - \frac{\hbar^2 s^2}{2m} - \frac{m}{8}\omega^2\rho^2\right]\mathfrak{A}(\rho) + \frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{d^2}{d\rho^2}\mathfrak{A}(\rho) + \frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\mathfrak{A}(\rho) - \frac{k^2}{\rho^2}\mathfrak{A}(\rho)\right] = 0,$$
(168)

ou, ainda,

$$\left[\frac{2mE'}{\hbar^2} - \frac{\rho^2}{4l_B^4}\right] \mathfrak{A}(\rho) + \left[\frac{d^2}{d\rho^2}\mathfrak{A}(\rho) + \frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\mathfrak{A}(\rho) - \frac{k^2}{\rho^2}\mathfrak{A}(\rho)\right] = 0, \quad (169)$$

onde definiu–se uma nova contante $l_B^2 := \hbar/m\omega$ (essa constante física representa o menor raio de órbita do elétron no intervalo permitido pelo princípio da incerteza) e a energia característica

$$E' = E + \frac{\hbar\omega}{2}k - \frac{\hbar^2 s^2}{2m}.$$
 (170)

Revista Brasileira de Ensino de Física, vol. 45, e20220308, 2023

e20220308-22

O próximo passo da solução consiste em fazer uma nova substituição de variável, $\xi \equiv \rho^2/2l_B^2$. Nesse caso, temos as seguintes relações de transformação:

$$\begin{cases} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \mathfrak{A}(\rho) = \frac{1}{\rho} \frac{d\xi}{d\rho} \frac{d}{d\xi} \mathfrak{A}(\xi) = \frac{1}{l_B^2} \frac{d}{d\xi} \mathfrak{A}(\xi) \\\\ \frac{d^2}{d\rho^2} \mathfrak{A}(\rho) = \frac{d}{d\rho} \left(\frac{\rho}{l_B^2} \frac{d}{d\xi} \mathfrak{A}(\xi) \right) \\\\ = \frac{1}{l_B^2} \frac{d}{d\xi} \mathfrak{A}(\xi) + \frac{2\xi}{l_B^2} \frac{d^2}{d\xi^2} \mathfrak{A}(\xi) \end{cases}$$
(171)

Aplicando na equação (169) as transformações expressas na Eq. (171), e após algumas manipulações algébricas, temos

$$\begin{bmatrix} \frac{2mE'}{\hbar^2} - \frac{\xi}{2l_B^2} \end{bmatrix} \mathfrak{A}(\xi) + \begin{bmatrix} \frac{2\xi}{l_B^2} \frac{d^2}{d\xi^2} \mathfrak{A}(\xi) + \frac{2}{l_B^2} \frac{d}{d\xi} \mathfrak{A}(\xi) - \frac{k^2}{2l_B^2} \frac{1}{\xi} \mathfrak{A}(\xi) \end{bmatrix} = 0,$$
(172)

ou, multiplicando a equação por $l_B^2/2$,

$$\begin{bmatrix} \frac{ml_B^2}{\hbar^2} E' - \frac{\xi}{4} \end{bmatrix} \mathfrak{A}(\xi) + \left[\xi \frac{d^2}{d\xi^2} \mathfrak{A}(\xi) + \frac{d}{d\xi} \mathfrak{A}(\xi) - \frac{k^2}{4} \frac{1}{\xi} \mathfrak{A}(\xi) \right] = 0. \quad (173)$$

Para uma simplificação estratégica da Eq. (173), defini-se

$$\lambda \equiv \frac{ml_B^2}{\hbar^2} E' \tag{174}$$

e supõe-se que $\mathfrak{A}(\xi)$ possa ser escrito como

$$\mathfrak{A}(\xi) = \exp\left(-\frac{\xi}{2}\right) \xi^{|k|/2} \mathcal{M}(\xi).$$
(175)

Nesse caso, com um pouco de álgebra, a equação (173) assume a forma

$$\xi \frac{d^2}{d\xi^2} \mathcal{M}(\xi) + (1+|k|-\xi) \frac{d}{d\xi} \mathcal{M}(\xi) + \left(\lambda - \frac{|k|+1}{2}\right) \mathcal{M}(\xi) = 0, \qquad (176)$$

ou

$$\xi \frac{d^2}{d\xi^2} \mathcal{M}(\xi) + (b - \xi) \frac{d}{d\xi} \mathcal{M}(\xi) - a \mathcal{M}(\xi) = 0, \quad (177)$$

onde

$$a = -\lambda + \frac{|k|+1}{2}, \qquad b = 1 + |k|.$$
 (178)

A equação (177) é classificada como uma equação hipergeométrica de 1^{a} espécie, e tem como solução a

Revista Brasileira de Ensino de Física, vol. 45, e20220308, 2023

função hipergeométrica confluente (também chamada função de Kummer),

$$_{1}F_{1}(a;b;\xi) = \mathcal{M}_{ab}(a,b,\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_{n}}{(b)_{n}} \frac{\xi^{n}}{n!},$$
 (179)

onde $(a)_n$, ou $(b)_n$, é uma notação conhecida como símbolo de Pochhammer, que representa fatorial ascendente sobre $a \in b$. A título de ilustração, os dez dez primeiros termos da série hipergeométrica confluente expressa na Eq. (179) são apresentados na Tabela 1.

Uma consideração de interesse físico precisa ser feita sobre a série de potências expressa pela Eq. (179). O coeficiente a pode ser um número qualquer. Por outro lado, o coeficiente b é restritamente um número positivo. Sendo b > 0, a função hipergeométrica pode ser convergente com a < 0 e divergente se a > 0. O caso com divergência não é interessante do ponto de vista da física. Nesse caso, devemos considerar apenas as soluções com a < 0. Portanto, seja j um número positivo, temos

$$a = -\lambda + \frac{|k|+1}{2} = -j.$$
 (180)

Além disso, vamos acrescentar uma segunda restrição: j deve ser um número inteiro. Logo, a constante λ que satisfaz essa condição, pela combinação das Eqs. (174) e (170) com a Eq. (180), é aquela cuja a energia deve ser dada por

$$E = \hbar\omega \left[j + \frac{|k| - k}{2} + \frac{1}{2} \right] - \frac{\hbar^2 s^2}{2m}.$$
 (181)

Dessa forma, constata–se que a simples definição de um novo autovalor

$$n_{\rho} \equiv j + \frac{|k| - k}{2} \tag{182}$$

é suficiente para recuperarmos a fórmula de Landau, com os mesmos autovalores da energia dos casos tratados anteriormente,

$$E = \frac{\hbar^2 s^2}{2m} + \hbar\omega \left(n_\rho + \frac{1}{2}\right). \tag{183}$$

Combinando a Eq. (179) com a Eq. (175), em termos da variável original ρ , temos

$$\mathfrak{A}(\rho) = A_{kj} \exp\left(-\frac{\rho^2}{4l_B^2}\right) \left(\frac{\rho^2}{2l_B^2}\right)^{|k|/2} \mathcal{M}_{ab}(a, b, \rho).$$
(184)

A constante A_{kj} que normaliza corretamente a função de onda, em concordância com a propriedade de ortogonalidade da função hipergeométrica, é dada por

$$A_{kj} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left\{ \frac{j}{l_B^2 2^{|k|} [j+|k|]!} \right\}^{1/2}.$$
 (185)

DOI: https://doi.org/10.1590/1806-9126-RBEF-2022-0308

Tabela 1: dez primeiros termos da série hipergeométrica confluente.

| \overline{n} | Função hipergeométrica confluente |
|----------------|--|
| 0 | 1 |
| 1 | $\frac{a\xi}{b}$ |
| 2 | $\frac{a(a+1)\xi^2}{2b(b+1)}$ |
| 3 | $\frac{a(a+1)(a+2)\xi^3}{6b(b+1)(b+2)}$ |
| 4 | $\frac{a(a+1)(a+2)(a+3)\xi^4}{24b(b+1)(b+2)(b+3)}$ |
| 5 | $\frac{a(a+1)(a+2)(a+3)(a+4)\xi^5}{120b(b+1)(b+2)(b+3)(b+4)}$ |
| 6 | $\frac{a(a+1)(a+2)(a+3)(a+4)(a+5)\xi^6}{720b(b+1)(b+2)(b+3)(b+4)(b+5)}$ |
| 7 | $\frac{a(a+1)(a+2)(a+3)(a+4)(a+5)(a+6)\xi^7}{5040b(b+1)(b+2)(b+3)(b+4)(b+5)(b+6)}$ |
| 8 | $\frac{a(a+1)(a+2)(a+3)(a+4)(a+5)(a+6)(a+7)\xi^8}{40320b(b+1)(b+2)(b+3)(b+4)(b+5)(b+6)(b+7)}$ |
| 9 | $\frac{a(a+1)(a+2)(a+3)(a+4)(a+5)(a+6)(a+7)(a+8)\xi^9}{362880b(b+1)(b+2)(b+3)(b+4)(b+5)(b+6)(b+7)(b+8)}$ |
| 10 | $\frac{a(a+1)(a+2)(a+3)(a+4)(a+5)(a+6)(a+7)(a+8)(a+9)\xi^{10}}{3628800b(b+1)(b+2)(b+3)(b+4)(b+5)(b+6)(b+7)(b+8)(b+9)}$ |

Portanto, a solução expressa na Eq. (184), com a constante determinada Eq. (185), é escrita como

$$u_E(\rho, \phi, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left\{ \frac{j}{l_B^2 2^{|k|} [j + |k|]!} \right\}^{1/2} \\ \times \exp\left[i \left(k\phi + \frac{s}{\hbar}z\right)\right] \\ \times \exp\left(-\frac{\rho^2}{4l_B^2}\right) \left(\frac{\rho^2}{2l_B^2}\right)^{|k|/2} \mathcal{M}_{ab}\left(a, b, \rho\right).$$
(186)

O que estamos interessados em extrair deste exercício são as quantidades físicas mesuráveis do problema. A pesar da função de onda aqui ser escrita em termos de uma série de potências diferente daquela que aparece nos dois casos anteriores, os autovalores de energia do elétron são os mesmos nos três casos. Isso, portanto, torna a física do elétron idêntica nos três calibres, para o potencial vetor magnético, investigados nesta subseção.

4. O Efeito Aharonov–Bohm

Na seção anterior tratamos dos níveis de Landau e a função de onda que descreve os estados quânticos de um elétron que interage com um campo magnético constante. Até agora foram tratados apenas problemas nos quais o elétron está em movimento numa região com um potencial vetor associado a um campo magnético constante. No entanto, considere o seguinte sistema físico: um elétron se movimenta livremente numa região ao redor de um cilindro feito de um material impermeável, dentro do qual existe um campo magnético confinado. Fora desse cilindro, na região acessível à partícula, o campo magnético é nulo. Qual seria a descrição dos estados do elétron nesse caso? Do ponto de vista da Mecânica Clássica, como $\vec{B} = \nabla \times \vec{A} = 0$, não existiria força magnética, qualquer que seja o potencial vetor \vec{A} . Por consequência, os estados seriam os mesmo que de uma partícula livre. No entanto, na descrição ondulatória da Mecânica Quântica, a partícula sofre um efeito causado pelo magnético confinado. Esse fenômeno é conhecido como efeito Aharonov–Bohm e é o objeto de estudo dessa subseção.

Antes do efeito Aharonov–Bohm ser demonstrado, vamos estabelecer algumas condições necessárias para manifestação desse fenômeno. Considere um campo magnético $\vec{B} = (0, 0, B)$ gerado no interior de um dispositivo solenoide de raio R, composto por n espiras centradas no eixo z e percorridas por uma corrente i. Nesse caso, a lei de Gauss magnética (na forma integral), em coordenadas cilíndricas, fornece o parâmetro de intensidade do campo

$$\begin{cases} B = n\mu_0 i, & \text{para } \rho < R\\ B = 0, & \text{para } \rho > R, \end{cases}$$
(187)

onde μ_0 é a permeabilidade do vácuo.

O potencial vetor magnético calculado a partir da equação (99), levando em conta um campo $\vec{B} = B\hat{z}$, onde B é dado por (187), é um vetor do tipo $\vec{A} = A_{\phi}\hat{\phi}$,

tal que

$$\begin{cases} A_{\phi} = \frac{n\mu_0 i}{2}\rho, & \text{para } \rho < R \text{ (dentro do solenoide)} \\ A_{\phi} = \frac{n\mu_0 i}{2\rho}R^2, & \text{para } \rho > R \text{ (fora do solenoide)} \end{cases}$$
(188

Calculando o rotacional de \vec{A} dentro do solenoide, temos

$$\nabla \times \vec{A} = -\frac{\partial \vec{A}_{\phi}}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho \vec{A}_{\phi}) \hat{k} = \frac{1}{\rho} n \mu_0 i \rho \hat{k} = B \hat{k}.$$

Calculando o rotacional de \vec{A} for
a do solenoide, temos

$$\nabla \times \vec{A} = -\frac{\partial \vec{A}_{\phi}}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho \vec{A}_{\phi}) \hat{k}$$
$$= \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{n\mu_0 i}{2} R^2 \right) \hat{k} = 0.$$

Portanto, as componentes do potencial vetor expressas na equação (188) contém toda a informação do campo magnético (187). Além do mais, este é exatamente quadro almejado para o estudo do efeito Aharonov-Bohm, uma região com campo magnético nulo para a qual o potencial vetor correspondente é diferente de zero.

Considere um dispositivo de fenda dupla com o aparato solenoide posicionado entre as fendas, como ilustra a Figura 3. Caso esse dispositivo esteja suficientemente isolado, o fenômeno da interferência poderá ser observado com a emissão de elétrons sobre a fenda dupla. Nessa situação idealizada, só nos interessam os elétrons que passem por uma das fendas e atinjam a tela de chegada, onde o padrão de interferência é formado. Qualquer outra possibilidade não será levada em consideração. Sendo assim, convencionamos um caminho qualquer percorrido pelo elétron que passou por umas das fendas como S_1 , e para um caminho qualquer pela outra fenda como S_2 . A probabilidade de um elétron estar localizado em algum ponto da tela é dada por [63]

$$|\psi_{S1} + \psi_{S2}|^2 = |\psi_{S1}|^2 + |\psi_{S2}|^2 + \psi_{S1}\psi_{S2}^* + \psi_{S2}\psi_{S1}^*.$$
(189)



Figura 3: Ilustração de um dispositivo de fenda dupla ($S_1 \in S_2$) e um aparato solenoide.

Portanto, para o estudo do fenômeno da interferência de elétrons, com a abordagem expressa pela Eq. (189), faz-se necessário calcular a função de onda $\psi(\rho, \phi, t)$.

O cálculo $\psi(\rho, \phi, t)$ será feito em duas etapas: primeiro, será determinada a solução da função de onda $u_E(\rho, \phi)$, que obedece a versão independente do tempo da equação de Schrödinger (85),

$$\frac{1}{2m} \left(-\hbar^2 \nabla^2 + \frac{2i\hbar e}{c} \vec{A} \cdot \nabla + \frac{e^2}{c^2} \vec{A}^2 \right) u_E = E u_E;$$
(190)

e segundo, obter $\psi(\rho, \phi, t)$ aplicando o operador de evolução temporal na função u_E , solução da Eq. (190).

Nesta primeira etapa, seguiremos os passos da demonstração apresentada no trabalho [64]. Para obter a solução da Eq. (190), primeiro, será fazer uma simplificação estratégica por meio da substituição

$$u_E = e^{iW(\vec{r})}\mathfrak{B},\tag{191}$$

 sendo

$$W(\vec{r}) = \frac{e}{c\hbar} \int_{S} \vec{A} \cdot d\vec{r}.$$
 (192)

Substituindo a função (191) na Eq. (190), temos a nova equação

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \mathfrak{B} = E\mathfrak{B},$$
(193)

onde o operador hamiltoniano característico é dado por

$$H^{\{\mathfrak{B}\}} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$
$$= \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{1}{\rho^2} \frac{\hat{L}_z^2}{\hbar^2} - \frac{\hat{P}_z^2}{\hbar^2}.$$
(194)

Pode ser facilmente identificado que o operador $H^{\{\mathfrak{B}\}}$ satisfaz as seguintes relações de comutação:

$$[H^{\{\mathfrak{B}\}}, \hat{L}_z] = [H^{\{\mathfrak{B}\}}, \hat{P}_z] = 0.$$
(195)

A relação de comutação (195) garante a existência de uma base de autoesdados comuns para os operadores $H^{\{\mathfrak{B}\}}, \hat{L}_z$ e \hat{P}_z . Nesse caso, sejam $n \in l$ os autovalores de $H^{\{\mathfrak{B}\}}$ nessa base de autoestados tal que $\hat{L}_z\mathfrak{B} = n\mathfrak{B}$ e $\hat{P}_z\mathfrak{B} = l\mathfrak{B}$, podemos escolher

$$\mathfrak{B}(\rho,\phi,z) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(n\phi+lz)\right]\mathfrak{A}(\rho), \qquad (196)$$

onde $n \in l$ são números inteiro, em decorrência da função exponencial complexa ser cíclica.

Substituindo a Eq. (196) na Eq. (193), temos

$$\frac{d^2}{d\rho^2}\mathfrak{A}(\rho) + \frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\mathfrak{A}(\rho) + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{n^2}{\rho^2} - l^2\right)\mathfrak{A}(\rho) = 0.$$
(197)

Nome ando a constante $\alpha^2 \equiv 2mE/\hbar^2 - l^2$ e definindo a nova variável $\xi := \alpha \rho$, podemos fazer uma conveniente transformação na Eq. (197). Nesse caso, temos as seguintes relações entre as novas coordenadas e as antigas:

$$\begin{cases} \frac{d}{d\rho}\mathfrak{A}(\rho) = \frac{d}{d\xi}\mathfrak{A}(\xi)\frac{d\xi}{d\rho} = \alpha\frac{d}{d\xi}\mathfrak{A}(\xi)\\ \frac{d^2}{d\rho^2}\mathfrak{A}(\rho) = \frac{d}{d\xi}\left(\alpha\frac{d}{d\xi}\mathfrak{A}(\xi)\right)\frac{d\xi}{d\rho} = \alpha^2\frac{d^2}{d\xi^2}\mathfrak{A}(\xi) \end{cases}$$
(198)

Aplicando na equação (197) as relações de transformação expressas na equação (198), temos

$$\alpha^2 \frac{d^2}{d\xi^2} \mathfrak{A}(\xi) + \frac{\alpha^2}{\xi} \frac{d}{d\xi} \mathfrak{A}(\xi) + \left(\alpha^2 - \alpha^2 \frac{n^2}{\xi^2}\right) \mathfrak{A}(\xi) = 0,$$
(199)

ou, multiplicando por ξ^2/α^2 ,

$$\xi^{2} \frac{d^{2}}{d\xi^{2}} \mathfrak{A}(\xi) + \xi \frac{d}{d\xi} \mathfrak{A}(\xi) + (\xi^{2} - n^{2}) \mathfrak{A}(\xi) = 0.$$
 (200)

A equação (200) é classificada como equação de Bessel para funções de $1^{\rm a}$ espécie com *n*-ésima ordem. A solução para essa equação é uma combinação linear das funções de Bessel [61],

$$\mathfrak{A}(\xi) = A_1 \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{j! \Gamma(j+n+1)} \left(\frac{\xi}{2}\right)^{2j+n} + A_2 \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{j! \Gamma(j-n+1)} \left(\frac{\xi}{2}\right)^{2j-n}, \quad (201)$$

onde $\Gamma(j+n+1)$ é a função Gamma.

Como de costume, devemos fazer algumas restrições de interesse para física na solução (201). O primeiro termo da solução (201) é convergente ao longo de todo intervalo $0 \ge \rho \ge +\infty$. Por outro lado, o segundo termo da equação (201) diverge em $\rho = 0$ nesse mesmo intervalo, o que apresenta uma inconsistência física ao longo do percurso feito pela onda até a formação do padrão de interferência. Nesse sentido, defini–se $A_2 = 0$ para que a função de onda se mantenha bem comportada (assim, a densidade de probabilidade não deve explodir em $\rho = 0$). O segundo passo deveria ser a normalização da Eq. (201). No entanto, estamos interessados apenas nos elétrons que chegam à tela sobre a qual o padrão de interferência é formado e, por consequência, são localizados. Nesta circunstância, onde a localização da partícula é garantida e analise será feita sobre os efeitos de fase da onda, a normalização é desnecessária. Portanto, podemos, sem que nenhuma das conclusões físicas sejam comprometidas, simplesmente definir $A_1 = 1$, de modo que

$$\mathfrak{A}_{jn}(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{j! \Gamma(j+n+1)} \left[\frac{\rho}{\hbar} (2mE - l^2\hbar^2)^{1/2} \right]^{2j+n}.$$
(202)

Com a Eq. (202) em mãos, retornamos à Eq. (196):

$$\mathfrak{B}(\rho,\phi,z) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{j!\Gamma(j+n+1)} \\ \times \left[\frac{\rho}{\hbar}(2mE - l^2\hbar^2)^{1/2}\right]^{2j+n} \\ \times \exp\left[\frac{i}{\hbar}(n\phi + lz)\right],$$
(203)

Combinando as equações (203) e (191), temos

$$u_E(\rho, \phi, z) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{j! \Gamma(j+n+1)} \\ \times \left[\frac{\rho}{\hbar} (2mE - l^2\hbar^2)^{1/2}\right]^{2j+n} \\ \times \exp\left[\frac{i}{\hbar} \left(n\phi + lz + \frac{e}{c} \int_S \vec{A} \cdot d\vec{r}\right)\right]$$
(204)

Finalmente, aplicando o operador evolução temporal na Eq. (204), temos

$$\begin{split} \psi(\rho,\phi,z,t) &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{j! \Gamma(j+n+1)} \\ &\times \left[\frac{\rho}{\hbar} (2mE - l^2 \hbar^2)^{1/2} \right]^{2j+n} \\ &\times \exp\left[\frac{i}{\hbar} \left(n\phi + lz + \frac{e}{c} \int_S \vec{A} \cdot d\vec{r} - Et \right) \right], \end{split}$$
(205)

onde, por simplicidade, definimos $t_0 = 0$.

Como estamos tratando do problema de fendas duplas, devemos ter uma onda ψ_{S1} e outra ψ_{S2} , uma contendo as informações probabilísticas de se encontrar o elétron numa posição após ter passados pelo caminho S_1 e a outra contendo as informações probabilísticas de se encontrar o elétron numa posição após ter passados pelo caminho S_2 . Ou seja,

$$\psi_{S_1} = \mathfrak{A}_{j_1 n_1}(\rho) \exp\left[\frac{i}{\hbar} \left(n_1 \phi + l_1 z + \frac{e}{c} \int_{S_1} \vec{A} \cdot d\vec{r} - E_{n_1 l_1} t\right)\right],$$
(206)

$$\psi_{S_2} = \mathfrak{A}_{j_2 n_2}(\rho) \exp\left[\frac{i}{\hbar} \left(n_2 \phi + l_2 z + \frac{e}{c} \int_{S_2} \vec{A} \cdot d\vec{r} - E_{n_2 l_2} t\right)\right].$$
(207)

Convencionamos que $S_1 \in S_2$ são caminhos de ida, que passam pelas respectivas fendas 1 ou 2, ao passo que $S'_1 \in S'_2$ são o caminhos de volta pelo mesmo percurso. Nesse caso, $S \in S'$ podem substituir um a outro com

o acréscimo de um sinal negativo na integral de linha, o que é equivalente a inverter os limites de integração, uma vez que um caminho é o inverso do outro. Portanto, pela equação (189), temos que a sobreposição das ondas (206) e (207) são dadas por

$$|\psi_{S1} + \psi_{S2}|^{2} = |\psi_{S1}|^{2} + |\psi_{S2}|^{2} + 2\mathfrak{A}_{j_{1}n_{1}}\mathfrak{A}_{j_{2}n_{2}}$$

$$\times \cos\left[\frac{1}{\hbar}\left(n_{1}\phi + l_{1}z - n_{2}\phi - l_{2}z\right) - E_{n_{1}l_{1}}t - E_{n_{2}l_{2}}t - \frac{e}{c}\int_{S'_{1}}\vec{A}\cdot d\vec{r} + \frac{e}{c}\int_{S_{2}}\vec{A}\cdot d\vec{r}\right]$$

$$(208)$$

Note que os dois últimos termos, no argumento do cosseno da equação (208), usando a nomenclatura $S := S_2 - S'_1$, representam um caminho fechado S que sai do dispositivo, passa por uma fenda e retornando pela outra fenda ao ponto inicial. Portanto,

$$-\frac{e}{c}\int_{S_1'}\vec{A}\cdot d\vec{l} + \frac{e}{c}\int_{S_2}\vec{A}\cdot d\vec{l} = \frac{e}{c}\oint_{\mathcal{S}}\vec{A}\cdot d\vec{l} = \frac{e}{c}\Phi_{\mathcal{S}}.$$
(209)

Retornando à equação (208), temos

$$|\psi_{S1} + \psi_{S2}|^2 = |\psi_{S1}|^2 + |\psi_{S2}|^2 + 2\mathfrak{A}_{j_1n_1}\mathfrak{A}_{j_2n_2}$$
$$\times \cos\left[\frac{1}{\hbar} \left(n_1\phi + l_1z - n_2\phi - l_2z\right) - E_{n_1l_1}t - E_{n_2l_2}t + \frac{e}{c}\Phi_{\mathcal{S}}\right)\right].$$
(210)

O resultado expresso na equação (210) mostra que o padrão de sobreposição de ondas sofre um efeito de fase que é proporcional a um fluxo magnético presente nas proximidades, a pesar do feixe de elétrons percorrer uma região na qual não existe campo magnético. Esse fenômeno ressignificou a compreensão dos físicos sobre a teoria eletromagnético clássica, que agora não é mais compreendida como uma teoria de campos, mas efetivamente uma teoria de potenciais.

Esse fenômeno foi estudado de pelos cientistas Y. Aharonov e D. Bohm, que publicaram os resultados desses estudos no artigo [25], nos anos de 1959. Um ano mais tarde, R. G. Chambers apresentou resultados experimentais que comprovaram esse efeito quântico [65]. Chambers reproduziu o dispositivo da fenda dupla, parecido com aquele ilustrado na Figura 3, e analisou o padrão de interferência quando com o aparato solenoide desligado e depois com o solenoide ligado. Comparando esses resultados, verificou-se que o padrão de interferência dos elétron sofreu uma diferença de fase por um valor angular 2,5. A tela de chegada dos elétron, após a passem pela fenda dupla, está ilustrado na Figura 4 para esses os dois casos.



Figura 4: Padrão de interferência (a) na ausência de um fluxo magnético e (b) na presença de um fluxo magnético; os dois casos diferem um do outro por uma diferença de fase de 2,5. Retirado de CHAMBERS, R. G. Phys. Rev. Lett., v. 5, n. 1, p. 3–5, 1960.

Esse fenômeno também pode ser deduzido através do formalismo das integrais de Feynman, que constituem um método elegante. As integrais de Feynman são uma espécie de "integral de caminho" que leva em conta todas as possíveis trajetórias que o sistema admite entre dois pontos específicos. Chamaremos esses dois pontos de (x_1, t_1) e (x_N, t_N) . Toda a trajetória possível entre esses dois pontos é constituída por infinitos pontos, que chamaremos de (x_n, t_n) , onde obviamente N > n. A passagem de um ponto definido no espaço tempo (x_{n-1}, t_{n-1}) ao (x_n, t_n) é chamada de amplitude de transição, e recebe a nomenclatura S(n, n-1). Por fim, denotamos a passagem entre dois pontos: $(x_1, t_1) \rightarrow$ $(x_N, t_N) := \langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle$. Em termos dessas quantidades, as integrais de Feynman são introduzidas da seguinte forma [28]:

$$\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle = \int_{x_1}^{t_N} \mathcal{Q}[x(t)] \\ \times \exp\left[i \int_{t_1}^{t_N} dt \frac{L_{\text{clássica}}(x, \dot{x})}{\hbar}\right],$$
(211)

onde $\int_{x_1}^{t_N} \mathcal{Q}[x(t)]$ é um operador integral da forma

$$\int_{x_1}^{t_N} \mathcal{Q}[x(t)] \equiv \lim_{N \to \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}\right)^{(N-1)/2} \\ \times \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \cdots \int dx_2.$$
(212)

Em primeiro lugar, a amplitude de transição S(n, n-1), que é definida no limite em que $\Delta t \rightarrow 0$, pode ser calculada por uma integral usual, visto que, o caminho

pode ser aproximado por uma reta. Portanto,

$$S(n, n - 1) = \int_{t_{n-1}}^{t_n} dt [L_{\text{clássica}}]$$

= $\int_{t_{n-1}}^{t_n} dt \left[\frac{m}{2} \vec{\Pi}^2 + \frac{e}{c} \vec{\Pi} \cdot \vec{A} \right]$
= $\frac{m}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} dt \left(\frac{d\vec{x}}{dt} \right)^2 + \frac{e}{c} \int_{t_{n-1}}^{t_n} dt \frac{d\vec{x}}{dt} \cdot \vec{A}$
= $S^{(0)}(n, n - 1) + \frac{e}{c} \int_{x_{n-1}}^{x_n} d\vec{l} \cdot \vec{A}$, (213)

onde definimos a amplitude de transição para uma partícula livre como

$$S^{(0)}(n,n-1) \equiv \frac{m}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} dt \left(\frac{d\vec{x}}{dt}\right)^2,$$
 (214)

onde $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3)$, um vetor com
 componentes ortogonais. Além disso, note que no segundo termo da última linha da equação (213) foi utilizado a relação de física básica $d\vec{l} = dt\vec{v}$.

A equação (213) é a amplitude de transição para os tempos fixos $t_{n-1} e t_n$. Para que todos os pontos entre $(x_1, t_1) e (x_N, t_N)$ sejam computados, devemos somar a amplitudes de transição de n - 1 = 1 até n = N na Eq. (213). Fazendo isso e substituindo na Eq. (211), temos

$$\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle = \int_{t_1}^{t_N} \mathcal{Q}[x(t)]$$
$$\times \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{n=2}^N S^{(0)}(n, n-1)\right]$$
$$\times \exp\left[\frac{ie}{\hbar c} \int_{\vec{x}_1}^{\vec{x}_N} d\vec{l} \cdot \vec{A}\right].$$
(215)

Este resultado é válido para qualquer \vec{A} . No entanto, tratando-se de um problema de fenda dupla, devemos ter uma integral do tipo (215) para cada uma das fendas. Nesse caso,

$$\begin{aligned} \langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle &= \left\{ \int_{t_1}^{t_N} \mathcal{Q}[x(t)] \\ &\times \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{n=2}^N S^{(0)}(n, n-1)\right] \\ &\times \exp\left[\frac{ie}{\hbar c} \int_{\vec{x}_1}^{\vec{x}_N} d\vec{l} \cdot \vec{A}\right] \right\}_{\text{fenda 1}} \\ &+ \left\{ \int_{t_1}^{t_N} \mathcal{Q}[x(t)] \end{aligned}$$

$$\times \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{n=2}^{N} S^{(0)}(n, n-1)\right]$$
$$\times \exp\left[\frac{ie}{\hbar c} \int_{\vec{x}_{1}}^{\vec{x}_{N}} d\vec{l} \cdot \vec{A}\right] \bigg\}_{\text{fenda } 2}$$

 \mathbf{ou}

$$\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle = \int_{t_1}^{t_N} \mathcal{Q}[x(t)]$$

$$\times \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{n=2}^N S^{(0)}(n, n-1)\right]$$

$$\times \left\{ \exp\left[\frac{ie}{\hbar c} \int_{S_2} d\vec{l} \cdot \vec{A}\right] + \exp\left[\frac{ie}{\hbar c} \int_{S_1} d\vec{l} \cdot \vec{A}\right] \right\}. \quad (216)$$

Tomando o módulo quadrático da expressão (216), o produto das exponencias complexas, que aparecem do lado direito da equação, com o seu complexo conjugado resultará em termos que podem ser relacionados, novamente convencionando um caminho fechado, ao fluxo magnético:

$$-\frac{e}{c}\int_{S_1}\vec{A}\cdot d\vec{l} + \frac{e}{c}\int_{S_2}\vec{A}\cdot d\vec{l} = \frac{e}{c}\oint_S\vec{A}\cdot d\vec{l} = \frac{e}{c}\Phi_S.$$

Portanto, conclui—se que ao longo do caminho percorrido pelo elétron existe um efeito proporcional ao fluxo magnético, que difere esse resultado do problema de uma partícula livre.

Note que através das integrais de Feynman foi possível deduzir o efeito Aharonov–Bohm sem a precisão da função de onda. Através desse método, uma hamiltoniana de partida é suficiente para determinarmos os efeitos de um potencial sobre uma partícula. De fato essas integrais são uma poderosa ferramenta de analise, em contraponto à mecânica ondulatória de Schrödinger. Além do mais, é possível deduzir uma espécie de "equação de Schrödinger" para $\langle x, t | x_1, t_1 \rangle$ (ver a equação 2.6.56 de [28]). Essa conexão, fundamentalmente, representa uma equivalência entre a formulação das integrais de Feynman e os propagadores da Mecânica Quântica ondulatória.

O efeito Aharonov–Bohm certamente está entre os fenômenos mais intrigantes da teoria quântica. Suas aplicações teóricas são inúmeras, como na descrição da energia dos estados ligados e espalhamento de um elétron no limite não relativístico [66], propostas de experiências com semicondutores e elétrons com estados emaranhados [67] (que podem ter resultados promissores para a informação quântica) e na descrição de efeitos de spin [68], porém com o momento magnético do nêutron no papel da carga do elétron. Em aplicações experimentais, o efeito Aharonov–Bohm constitui um importante método de controle, através dos calibres nos potenciais, na demonstração de fenômenos fotônicos [69], que podem também levar a avanços na teoria de informação quântica [70], além de que esse efeito é utilizado em observações microscópicas [71].

5. Conclusão

Neste trabalho, foi realizado um estudo da interação entre uma partícula carregada e um campo magnético constante, a partir do formalismo da Mecânica Quântica ondulatória não-relativística. Em primeiro lugar, este trabalho inicia resgatando alguns conceitos básicos de Mecânica Quântica, como equação de Schrödinger e equação de Heisenberg, evolução temporal dos estados, estados e operadores no espaço de posição, etc. Esta revisão serve como uma etapa do trabalho que complementa o seguinte: a construção das ferramentas essenciais para o estudo da interação de uma partícula carregada sub ação de um campo magnético constante. Por fim, tratamos do objetivo principal do trabalho, que é mostrar que o estudo dessa interação, no formalismo da Mecânica Quântica ondulatória de Schrödinger, pode ser feito através do estudo dos níveis de Landau e o efeito Aharonov–Bohm.

Na primeira etapa do trabalho, são apresentados alguns conceitos fundamentais de Mecânica Quântica, como o operador evolução temporal e as equações de Schrödinger e Heisenberg. Subsequentemente, esta revisão é utilizada para fundamentar a construção do formalismo necessário para o processo de segunda quantização do sistema formado por uma partícula carregada sob ação de um campo magnético. Foi analisado que uma consequência imediata da segunda quantização é uma ruptura com a Mecânica Clássica, que se expressa na forma de violação do teorema de Ehrenfest. Isso significa, em outras palavras, que os valores esperados dos observáveis quânticos não obedecem às leis clássicas nesse sistema. Posteriormente, no fechamento desta etapa de revisão, foram apresentados dois interessantes resultados: a versão quântica da equação da continuidade e a invariância da equação de Schrödinger pelo calibre de um potencial vetor magnético.

Na segunda etapa do trabalho, os fundamentos que foram apresentados como revisão são resgatados no estudo da física da equação de Schrödinger para um elétron imerso e um campo magnético $\vec{B} = (0, 0, B)^T$. A abordagem desse estudo é feita da seguinte forma: primeiro, a equação de Schrödinger é estruturada em termos de um potencial vetor magnético $\vec{A} = (-By/2, Bx/2, 0)^T$, a partir da qual deduzimos outras duas equações por um ajuste de calibre, uma que corresponde a equação de Schrödinger com um potencial vetor $\vec{A} = (-By, 0, 0)^T$ e a outra que corresponde ao $\vec{A} = (0, Bx, 0)^T$. Em segundo, a fórmula que descreve os autovalores de energia foi demonstrada para cada um desses casos particulares, que estão relacionados por um calibre adequado. E terceiro, as autofunções, soluções de cada uma dessas equações de Schrödinger, foram determinadas. O principal resultado desta etapa do trabalho foi que a física do elétron é idêntica nos três calibres, os autovalores de energia são os mesmos, embora a função de onda seja diferente.

Na última etapa do trabalho, foi feito uma a demonstração do fenômeno topológico efeito Aharonov-Bohm. Para tal, foi considerado um exercício de fenda dupla com um solenoide coberto por um material impermeável. Um solenoide é um dispositivo que gera um campo magnético confinado no volume compreendido pelo seu interior. Nesse caso, a região com o campo magnético é inacessível à partícula, já que o solenoide está isolado. Nesse contexto, foi mostrado que um feixe de elétrons disparados em uma fenda dupla, próxima do solenoide, sofre um efeito de fase proporcional ao fluxo magnético, mesmo que o feixe tenha se deslocado por uma região de campo nulo ao longo de todo percurso. Esse fenômeno é o efeito Aharonov–Bohm, que foi demonstrado a partir de dois métodos: interferência de ondas e através das integrais de Feynman.

Esperamos que este estudo seja um bom material introdutório didático e divertido no aprendizado da interação de uma partícula quântica eletricamente carregada, com um campo magnético clássico constante. Esse estudo é a base para diversas áreas da Física experimental e teórica da atualidade.

Referências

- [1] F. Penning, Physica 58, 873 (1936).
- [2] A. Sella, *Penning's vacuum gauge*, disponível em: https://www.chemistryworld.com/opinion/pennings-vacuum-gauge/5582.article>, acessado em 23/02/2023.
- [3] C. Decaroli, Uma breve história das armadilhas de íons (para processamento de informações quânticas), disponível em: https://ichi.pro/pt/uma-breve-historiadasarmadilhas-de-ions-para-processamento-de-inf ormacoes-quanticas-222795317134725>, acessado em 23/02/2023.
- [4] W.De Groot, R. Ladenburg, W. Noddack, F.M. Penning, P. Pringsheim e H. Geiger, *Quantenhafte Ausstrahlung* (Springer, Berlin, 1933).
- [5] F.M. Penning, *Het Atoom* (Kok J.H., North Holland, 1935).
- [6] M.J. Druyvesteyn e F.M. Penning, Rev. Mod. Phys. 12, 87 (1940).
- [7] F.M. Penning e J.H.A. Moubis, Physica 15, 721 (1949).
- [8] F.M. Penning, Physica 1, 1028 (1934).
- [9] F.M. Penning e A.A. Kruithof, Physica 2, 793 (1935).
- [10] J. Pierce, Theory and Design of Electron Beams (Van Nostrand Company, New York, 1949).
- [11] W. Paul e H. Steinwedel, Zeitschrift für Naturforschung A 8, 448 (1953).

- [12] F. Köhler-Langes, The Electron Mass and Calcium Isotope Shifts: High-Precision Measurements of Bound-Electron g-Factors of Highly Charged Ions (Springer, Berlin, 2017).
- [13] F.G. Major, V.N. Gheorghe e G. Werth, Charged Particle Traps: Physics and Techniques of Charged Particle Field Confinement (Springer, Berlin, 2005).
- [14] G. Werth, V.N. Gheorghe e F.G. Major, *Charged Particle Traps II* (Springer, Berlin, 2005).
- [15] V. Krutyanskiy, M. Meraner, J. Schupp, V. Krcmarsky, H. Hainzer e B.P. Lanyon, npj Quantum Information 5, 72 (2019).
- [16] M. Vogel, Z. Andelkovic, G. Birkl, S. Ebrahimi, V. Hannen, D. von Lindenfels, A. Martin, T. Murböck, W. Nörtershäuser e W. Quint, Phys. Scr **T166**, 014066 (2015).
- [17] P. Helander, Reports on Progress in Physics 77, 087001 (2014).
- [18] N.W. Ashcroft e N. Mermin, Solid State Physics (Brooks Cole, California, 1976).
- [19] D.W.M. Pastana e M.E. Rodrigues, Rev. Bras. Ens. Fís. 43, e20210266 (2021).
- [20] J.E.G. Farieta e A. Hurtado, Rev. Mex. Fis. E 65, 64 (2019).
- [21] R.S. Dutra, D.S.R. Ferreira, A.S.M. Gonçalves e G.M. Carvalho, Rev. Bras. Ens. Fís. 42, e20190164 (2020).
- [22] E. Schrödinger, Phys. Rev. 28, 1049 (1926).
- [23] L. Landau, Z. Physik **64**, 629 (1930).
- [24] K. Gottfried, Quantum Mechanics: Fundamentals (Springer, New York, 1966).
- [25] Y. Aharonov e D. Bohm, The Physical Review 15, 485 (1959).
- [26] K. Klitzing, T. Chakraborty, P. Kim, V. Madhavan, X. Dai, J. McIver, Y. Tokura, L. Savary, D. Smirnova, A.M. Rey et al, Nature Reviews Physics 2, 397 (2020).
- [27] D. Tong, The Quantum Hall Effect, disponível em: <ht tp://www.damtp.cam.ac.uk/user/tong/qhe.html>, acessado em 23/02/2023.
- [28] J.J. Sakurai, Modern quantum mechanics (Addison Wesley, Boston, 1994).
- [29] D.J. Griffiths, Mecânica Quântica (Pearson, São Paulo, 2011), 2 ed.
- [30] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu e F. Laloë, Quantum Mechanics (John Wiley & Sons, Nashville, 1977), v. 1.
- [31] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu e F. Laloë, *Quantum Mechanics* (John Wiley & Sons, Nashville, 1996), v. 2.
- [32] P.A.M Dirac, Mat. Pro. Cam. Phi. Soc. 35, 416 (1939).
- [33] N.A. Lemos, Convite à física matemática (São Editora Livraria da Física, Paulo, 2013).
- [34] D. Krause, Álgebra Linear com um pouco de Mecânica Quântica (NEL/UFSC, Florianópolis, 2016).
- [35] A.F.R.T. Piza, Mecânica Quântica (EDUSP, São Paulo, 2003).
- [36] P.A.M Dirac, The principles of Quantum Mechanics (Oxf. Uni. Press, Londres, 1958), 4 ed.
- [37] C.M.T. Dieguez, L.V. Montanheiro, L.B. Cleto e M.J.C. Bonfim, Rev. Bras. Ens. Fís. 40, e1310 (2018).
- [38] W. van Dijk e F.M. Toyama, Phys. Rev. E 40, 036707 (2007).
- [39] W. van Dijk, T. Vanderwoerd e Sjirk-Jan Prins, Phys. Rev. E 95, 023310 (2017).

- [40] J.C.A. Barata, Notas para um Curso de Física-Matemática, versão de janeiro (2023), disponível em: <http://denebola.if.usp.br/~jbarata/Notas_de_aul a/capitulos.html>, acessado em 23/02/2023.
- [41] D.W.M. Pastana e M.E. Rodrigues, Rev. Bra. En. Fís. 23, e20210003 (2021).
- [42] D.W.M. Pastana, V.B. Neves e M.E. Rodrigues, Rev. Bras. Ens. Fís. 43, e20210073 (2021).
- [43] N.A. Lemos, *Mecânica analítica* (Editora Livraria da Física, São Paulo, 2007).
- [44] B. Friedrich e D. Herschbach, Physics Today 56, 53 (2003).
- [45] R.P. Feynman, R.B. Leighton e M. Sands, *Lições de física de Feynman* (Bookman, Porto Alegre, 2008), v. 3.
- [46] The Nobel Prize in Physics 1954, disponível em: https://www.nobelprize.org/prizes/physics/1954/summary
 >, acessado em 23/02/2023.
- [47] L.N. Cooper, Phys. Rev. 104, 1189 (1956).
- [48] J. Bardeen, L.N. Cooper e J.R. Schrieffer, Phys. Rev. 108, 1175 (1957).
- [49] G.F.L. Ferreira, Rev. Bra. Ens. Fís. 26, 27 (2004).
- [50] O. Ciftja, Eur. J. Phys. **41**, 035404 (2020).
- [51] Quantum Mechanics of a Charged Particle in an Electromagnetic Field, disponível em: http://scipp.ucsc.eu/~haber/ph216/QMemfield_12.pdf>, acessado em 23/02/2023.
- [52] Y. Peleg, R. Pnini e E. Zaarur, Schaum's Outline of Theory and Problems of Quantum Mechanics (Schaum Outline Series, New York, 1998).
- [53] G.B. Arfken, Física matemática: métodos matemáticos para engenharia e física (Elsevier, Rio de Janeiro, 2007).
- [54] M. Wakamatsu e A. Hayashi, Eur. Phys. J. A 58, 121 (2022).
- [55] 2016 Nobel Prize in Physics, disponível em: <https:// www.nature.com/collections/fwsytynlwg/>, acessado em 23/02/2023.
- [56] M.S. Cunha, C.R. Muniz, H.R. Christiansen e V.B. Bezerra, Eur. Phy. J. C, 76, 512 (2016).
- [57] J.E.B. Silva, Níveis de Landau-Coriolis. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Paraíba, João Pessoa (2013).
- [58] L.F.C. Pereira, Quantização de Landau, magnetização e correntes persistentes em um anel bidimensional no espaço curvo. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Maranhão, São Luís (2016).
- [59] P.M.T. Barbosa, *Efeito Aharonov–Caster em potenciais centrais*. Tese de Doutorado, Universidade Federal do Paraíba, João Pessoa (2018).
- [60] L.D. Landau e E.M. Lifshitz, *Quantum mechanics* (Butterworth-Heinemann, Oxford, 1981), 3 ed.
- [61] J.M.F. Bassalo e M.S.D. Cattani, *Elementos de física matemática* (Editora Livraria da Física, São Paulo, 2010), v. 1.
- [62] J.M.F. Bassalo e M.S.D. Cattani, *Elementos de física matemática* (Editora Livraria da Física, São Paulo, 2011), v. 2.
- [63] D.H.C. Santos, Teoria de calibre e geometria via conexões de Cartan-Ehresmann. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória (2012).

Revista Brasileira de Ensino de Física, vol. 45, e20220308, 2023

DOI: https://doi.org/10.1590/1806-9126-RBEF-2022-0308

- [64] J.B. Araújo, Fases topológicas e geométricas na mecânica quântica. Trabalho de Conclusão de Curso, Universidade Federal do Maranhão, São Luís (2014).
- [65] R.G. Chambere, Phys. Rev. Lett. 5, 3 (1960).
- [66] V. Salem. Estudo de Espalhamento em Sistemas Aharonov-Bohm em Espaço Cônico. Dissertação de Mestrado, Universidade Estadual de Ponta Grossa, Ponta Grossa (2017).
- [67] R. Ionicioiu, P. Zanardi e F. Rossi, Phys. Rev. A 63, 050101(R) (2001).
- [68] M. Peshkin e H.J. Lipkin, Phys. Rev. Lett. 74, 2847 (1995).
- [69] E. Li, B.J. Eggleton, K. Fang e S. Fan, Nat. Commun. 5, 3225 (2014).
- [70] K. Fang, Z. Yu e S. Fan, Phys. Rev. Lett. 108, 153901 (2012).
- [71] A. Tonomura, Proc. Jpn. Acad., Ser. B 82, 58 (2006).