Aula 6

Paradoxo de Klein: Mar de Dirac, Antimatéria e Equivalência Massa-Energia

Renan Milnitsky Marcelo Gameiro Munhoz Julien Minerbo

Os resultados interpretativos extraídos da Equação de Dirac revelam propostas teóricas um tanto quanto ousadas. Para além do spin, Dirac propõe a existência de estados de energia negativos que se manifestariam na realidade física através de elétrons com carga elétrica positiva: o antielétron (ou pósitron).

Quando estudamos sobre a Equação de Schroedinger, um dos emblemáticos casos analisados para extrair resultados interpretativos é o problema da barreira de potencial ou o potencial degrau. Será que o mesmo problema avaliado no regime relativístico a partir da Equação de Dirac poderá lançar novas interpretações sobre os estados de energia negativa e o antielétron?

1. Retomando o potencial degrau com a Equação de Schroedinger

O potencial degrau é uma das configurações mais simples de se resolver utilizando a equação de Schroedinger. Apesar de ser uma situação idealizada, sendo muito difícil encontrar um potencial com estas características na natureza, ela possibilita um estudo sobre implicações e interpretações de fenômenos de natureza quântica que atuam em regimes não-relativísticos. Como é um exemplo amplamente discutido em cursos introdutórios, não realizaremos sua resolução completa, retomaremos apenas alguns aspectos interpretativos de sua solução para compararmos com os resultados obtidos com a Equação de Dirac na próxima seção.

Vamos retomar inicialmente os resultados para o caso do potencial degrau com E < V₀, como apresentado na Figura 1.



Figura 1 - O potencial degrau para partículas com E < V₀.

Nesta situação, classicamente imaginaríamos que a partícula não teria energia suficiente para penetrar a barreira e seria refletida por ela, de modo que a solução para x < 0 expressa tanto a partícula incidindo, quando sendo refletida. A novidade essencial extraída na mecânica quântica ondulatória é a de que existe uma solução para x > 0, que representa a probabilidade de encontrar a partícula penetrando a barreira de potencial numa região classicamente proibida, num fenômeno denominado como efeito túnel.

$$\Psi(\mathbf{x}) = \begin{cases} \frac{D}{2} \left(1 + \frac{ik'}{k} \right) e^{ikx} + \frac{D}{2} \left(1 - \frac{ik'}{k} \right) e^{-ikx} & x < 0 \\ De^{-ik'x} & x > 0 \end{cases}$$

Figura 2 - As soluções do potencial degrau para x < 0 e x > 0 na situação em que E < V0.

Apesar de haver uma probabilidade de ela ser encontrada no interior da barreira de potencial, ao calcularmos o coeficiente de reflexão R, que é dado pela razão entre o quadrado da amplitude de incidência, extraída a partir do primeiro termo da solução para x <0, e o quadrado da amplitude de reflexão, extraída a partir do segundo termo da solução para x <0, verificamos que R = 1

$$R = \frac{B^*B}{A^*A} = \frac{(1+ik'/k)(1-ik'/k)}{(1-ik'/k)(1+ik'/k)} = 1$$

Portanto, o coeficiente de transmissão é nulo, uma vez que T = 1 - R = 0, o que significa que todas as partículas são refletidas, inclusive aquelas que penetram a barreira de potencial. A explicação dada para este fenômeno pode ser associada ao princípio da incerteza, que descreve uma pequena flutuação na energia da partícula em função da natureza ondulatória do pacote de onda. Quanto mais próximo E for de V₀, maior será a probabilidade de encontrála sendo refletida no interior da barreira de potencial, uma vez que, mesmo com $E < V_0$ esta flutuação na energia prevê que existe uma probabilidade de ela flutuar para um valor $E > V_0$ e ser capaz de vencer o potencial degrau.

Quando analisamos a situação de um potencial degrau onde $E > V_0$, como o mostrado na Figura 2, outro resultado extraordinário é revelado.



Figura 3 - O potencial degrau para E > V0.

Nesta situação, como a energia da partícula incidente é maior do que o da barreira de potencial, classicamente imaginaríamos que todas as partículas simplesmente passariam pelo potencial e reduziriam sua energia cinética por um fator V₀, de modo que a solução para x < 0 expressa a partícula incidindo na barreira e para x > 0 a partícula continuando com uma energia ligeiramente menor. A novidade essencial extraída na mecânica quântica ondulatória é a de que temos um termo adicional na região x < 0, que representa a probabilidade de encontrar partículas se movimentando no sentido negativo do eixo x, o que significa que, mesmo tendo mais energia do que a barreira de potencial, elas estariam sendo refletidas

$$\Psi(\mathbf{x}) = \begin{cases} Ae^{ikx} + A\left(\frac{k-k'}{k+k'}\right)e^{-ikx} & x < 0\\ A\left(\frac{2k}{k+k'}\right)e^{ik'x} & x > 0 \end{cases}$$

Este fato é verificado quando calculamos o coeficiente de reflexão R e ele nos fornece um resultado não nulo R > 0 e um coeficiente de transmissão T \neq 1.

$$R = \frac{B^*B}{A^*A} = \left(\frac{k - k'}{k + k'}\right)^2 \qquad e \qquad T = 1 - R = \frac{4kk'}{(k + k')^2}$$

Recorrendo mais uma vez ao princípio da incerteza, é possível explicar este resultado novamente a partir das flutuações na energia em função do princípio da incerteza e a natureza ondulatória do pacote de onda que descreve o movimento da entidade quântica. Apesar de possuir uma energia maior que a da barreira de potencial, quanto maior próxima a energia for de V₀, maior será a probabilidade de algumas delas serem refletidas pela barreira de potencial, uma vez que a energia poderá flutuar para valores de E < V₀.

Estes resultados revelaram toda uma nova forma de interpretar a interação entre partículas e barreiras de potencial, sintetizados no gráfico apresentado na Figura 3.



Figura 4 - Coeficientes de Reflexão (R) e Transmissão (T) para diferentes regimes de E/V₀.

Será que o estudo do mesmo problema do potencial degrau, mas agora em um regime relativístico com a Equação de Dirac, revelará novos resultados surpreendentes?

2. Potencial Degrau com a Equação de Dirac e Paradoxo de Klein

Mesmo que a teoria dos buracos e a previsão do antielétrons tenham sido amplamente criticadas pela ausência de evidências experimentais, ela foi fundamental para explicar o resultado paradoxal que obtemos ao investigar a barreira de potencial relativística. Este problema surge em 1929, quando Oscar Klein, um dos proponentes da Equação de Klein-Gordon, revela seus estudos sobre o espalhamento de elétrons em barreiras de potencial utilizando a até então recém-formulada Equação de Dirac.

Ainda que a definição do problema do potencial degrau seja análoga ao do regime não relativístico, a definição as energias diferem pois precisam ser expressas em função da energia relativística. A análise consiste em investigar o movimento de um elétron de energia E em direção a uma barreira de potencial V₀, como mostrado na Figura 5, numa situação na qual V₀ > E + mc², ou seja, sua energia relativística é menor que a da barreira de potencial.



Figura 5 - O problema do potencial degrau relativístico onde $V_0 > E + mc^2$.

Para iniciar a resolução do problema, escrevemos a Equação de Dirac para as duas regiões I (z < 0), onde o elétron possui energia E, e II (z > 0), onde o elétron possui energia E – V₀, expressas por

$$(c\alpha_3 p_3 + mc^2)\Psi_I = E\Psi_I \qquad z < 0 \quad (\text{Região I})$$

$$(c\alpha_3 p_3 + mc^2)\Psi_{II} = (E - V_0)\Psi_{II} \qquad z > 0 \quad (\text{Região I})$$

Considerando as soluções para o elétron livre com spin para cima em movimento ao longo do eixo z deduzido nas notas da aula anterior, podemos escrever as soluções para cada região I e II. Em I devemos ter elétrons se movimentando no sentido positivo, que representam os que incidem na barreira, e elétrons se movimentando no sentido negativo, que representam os que são refletidos pela barreira, com um momento p. Já na região II, recorrendo ao resultado de Schroedinger que alguns penetram a barreira, devemos ter elétrons se movimentando no sentido positivo com um momento p'. Com isto, as soluções $\Psi_I(z)$ e $\Psi_{II}(z)$ podem ser expressas por

(Eq. 1)
$$\Psi_{I} = A \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ pc \\ \overline{E + mc^{2}} \\ 0 \end{pmatrix} e^{ipz/\hbar} + C \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -\frac{pc}{E + mc^{2}} \\ 0 \end{pmatrix} e^{-ipz/\hbar}; \quad pc = \sqrt{E^{2} - m^{2}c^{4}}$$

(Eq. 2)
$$\Psi_{II} = B \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -\frac{p'c}{V_0 - (E + mc^2)} \end{pmatrix} e^{ip'z/\hbar}; \qquad p'c = \sqrt{(V_0 - E)^2 - m^2c^4}$$

onde constante A está associada a amplitude do elétron incidente, C do elétron refletido e B do elétron transmitido, de modo que os quadrados destas amplitudes estejam associados à a probabilidade de o elétron ser encontrado em cada uma destas regiões.

Importante compreender que a condição $V_0 > E + mc^2$ é fundamental para que o momento p' seja real, uma vez que a definição do momento na energia relativística depende da raiz quadrada.

Um primeiro passo dado para extrair resultados interpretativos é a determinação das relações existentes entre as amplitudes A, B e C, que podem ser determinada a partir da condição de continuidade da função de onda em z = 0, onde

$$\Psi_I(z=0) = \Psi_{II}(z=0)$$

Aplicando z = 0 nas soluções temos que

$$A\begin{pmatrix}1\\0\\pc\\\overline{E+mc^{2}}\\0\end{pmatrix} + C\begin{pmatrix}1\\0\\pc\\\overline{E+mc^{2}}\\0\end{pmatrix} = B\begin{pmatrix}1\\0\\-\frac{p'c}{V_{0}-(E+mc^{2})}\\0\end{pmatrix}$$

Considerando que apenas a primeira e a terceira linha das matrizes contém elementos não nulos, extraímos duas equações expressas por

$$A + B = C \tag{Eq. 3}$$

$$(A-C)\left(\frac{pc}{E+mc^2}\right) = -B\left(\frac{p'c}{V_0 - (E+mc^2)}\right)$$
(Eq. 4)

A Eq.3 estabelece uma relação satisfatória. No entanto, a Eq.4 pode ser melhor desenvolvida. Isolando o termo A – C, podemos escrever

$$A - C = -B \frac{p'}{p} \left(\frac{E + mc^2}{V_0 - (E + mc^2)} \right)$$
(Eq. 5)

Retomando a forma como p e p' são definidos nas Eq. 1 e 2, associados a cada uma das regiões I e II nas equações, a relação p/p' pode ser escrita como

$$\frac{p'}{p} = \frac{\sqrt{(V_0 - E)^2 - m^2 c^4}}{\sqrt{E^2 - m^2 c^4}} = \frac{\sqrt{(V_0 - E - mc^2)(V_0 - E + mc^2)}}{\sqrt{(E - mc^2)(E + mc^2)}}$$

Substituindo esta relação na Eq. 5, temos que

$$A - C = -B\frac{p'}{p} \left(\frac{E + mc^2}{V_0 - (E + mc^2)}\right)$$

$$A - C = -B\left(\frac{\sqrt{(V_0 - E - mc^2)(V_0 - E + mc^2)}}{\sqrt{(E - mc^2)(E + mc^2)}}\right) \left(\frac{E + mc^2}{V_0 - (E + mc^2)}\right)$$

$$A - C = -B\sqrt{\frac{(V_0 - E - mc^2)(V_0 - E + mc^2)(E + mc^2)^2}{(E - mc^2)(E + mc^2)(V_0 - E - mc^2)^2}}$$

$$A - C = -B\sqrt{\frac{(V_0 - E - mc^2)(E + mc^2)(E + mc^2)}{(V_0 - E - mc^2)(E - mc^2)}}$$

Para simplificar as relações, podemos definir um fator γ de tal forma que,

$$\gamma = \sqrt{\frac{(V_0 - E + mc^2)(E + mc^2)}{(V_0 - E - mc^2)(E - mc^2)}}$$
(Eq. 6)

Tendo em vista que os termos no numerador contam com um fator $+ mc^2$ e no denominador um fator $- mc^2$, é possível perceber que

$$(V_0 - E + mc^2)(E + mc^2) > (V_0 - E - mc^2)(E - mc^2)$$

Portanto, chegamos a conclusão de que

 $\gamma > 1$

resultado que será muito importante para interpretarmos as conclusões problema mais adiante. Retomando as relações entre os coeficientes A, B e C, agora com γ definido, temos

$$A + B = C$$
$$A - C = -B\gamma$$

De onde podemos escrever que

$$\frac{C}{A} = \frac{1+\gamma}{1-\gamma} \qquad (Eq. 7)$$
$$\frac{B}{A} = \frac{2}{1-\gamma} \qquad (Eq. 8)$$

Essas relações expressas nas Eq. 7 e 8 serão muito úteis pois estão associadas às amplitudes de transmissão (C) e reflexão (B), em função da incidência (A), o que facilitará a determinação

dos coeficientes de reflexão e transmissão de elétrons. Para determinar precisamente os coeficientes de transmissão e reflexão, é importante calcular as correntes de probabilidade $\vec{j}(z)$ a partir da definição apresentada por Dirac na mecânica quântica relativística, onde

$$\vec{j}(\vec{r},t) = c\Psi^*(\vec{r},t) \,\vec{\alpha}\Psi(\vec{r},t)$$

Podemos então calcular a corrente de probabilidade de incidência na região I, a partir do primeiro termo da Eq. 1, a corrente de probabilidade de reflexão na região I, a partir do segundo termo da Eq. 1, e a corrente de probabilidade de transmissão na região II. Importante lembrar que no formalismo matricial, o complexo conjugado converte uma matriz coluna em uma matriz linha.

 $\vec{I}_I(z) = c \Psi_I^*(z) \alpha_3 \Psi_I(z)$

Corrente de probabilidade de incidência $\vec{j}_I(z)$

$$\vec{J}_{I}(z) = cA^{*}(1 \quad 0 \quad \frac{pc}{E + mc^{2}} \quad 0)e^{-ipz/\hbar} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & -1\\ 1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} A \begin{pmatrix} 1\\ 0\\ \frac{pc}{E + mc^{2}}\\ 0 \end{pmatrix} e^{ipz/\hbar}$$
$$\vec{J}_{I}(z) = cA^{*}A \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{pc}{E + mc^{2}} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{pc}{E + mc^{2}}\\ 0\\ 1\\ 0 \end{pmatrix}$$
$$\vec{J}_{I}(z) = cA^{*}A \begin{pmatrix} \frac{2pc}{E + mc^{2}} \end{pmatrix} \hat{e}_{z}$$

Corrente de probabilidade de reflexão $\vec{J}_{I^{refl}}(z)$

$$\vec{J}_{I^{refl}}(z) = c \Psi^*_{I_{refl}}(z) \, \alpha_3 \Psi_{I_{refl}}(z)$$

$$\vec{J}_{I^{refl}}(z) = cC^{*}(1 \quad 0 \quad -\frac{pc}{E+mc^{2}} \quad 0)e^{ipz/\hbar} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & -1\\ 1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} C \begin{pmatrix} 1 & 0\\ -\frac{pc}{E+mc^{2}} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} e^{-ipz/\hbar}$$
$$\vec{J}_{I^{refl}}(z) = cC^{*}C \begin{pmatrix} 1 & 0 & -\frac{pc}{E+mc^{2}} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -\frac{pc}{E+mc^{2}} \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$
$$\vec{J}_{I^{refl}}(z) = -cC^{*}C \begin{pmatrix} \frac{2pc}{E+mc^{2}} \end{pmatrix} \hat{e}_{z}$$

Corrente de probabilidade de transmissão $\vec{J}_{II}(z)$

$$\vec{j}_{II}(z) = c\Psi_{II}^*(z) \alpha_3 \Psi_{II}(z)$$
$$\vec{j}_{II}(z) = cB^*(1 \quad 0 \quad -\frac{p'c}{V_0 - (E + mc^2)} \quad 0) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} B \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\frac{p'c}{V_0 - (E + mc^2)} \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$
$$\vec{j}_{II}(z) = cB^*B \begin{pmatrix} 1 & 0 & -\frac{p'c}{V_0 - (E + mc^2)} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -\frac{p'c}{V_0 - (E + mc^2)} \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$
$$\vec{j}_{II}(z) = -cB^*B \begin{pmatrix} \frac{2p'c}{V_0 - (E + mc^2)} \end{pmatrix} \hat{e}_z$$

Sistematizando os três resultados obtidos para as correntes de probabilidade, temos que

$$\vec{j}_I(z) = cA^*A\left(\frac{2pc}{E+mc^2}\right)\hat{e}_z$$
 (Eq. 09)

$$\vec{j}_{I^{refl}}(z) = -cC^*C\left(\frac{2pc}{E+mc^2}\right)\hat{e}_z \qquad (\text{Eq. 10})$$

$$\vec{J}_{II}(z) = -cB^*B\left(\frac{2p'c}{V_0 - (E + mc^2)}\right)\hat{e}_z$$
 (Eq. 11)

Fazendo uma análise das correntes de probabilidade, $\vec{j}_I \in \vec{j}_{I^{refl}}$ apresentam resultados consistentes indicando, respectivamente, um movimento de elétrons na direção positiva e negativa do eixo z para z < 0. A corrente de probabilidade $\vec{j}_{II}(z)$, por outro lado, apresenta um comportamento curioso, primeiro pelo fato de ela ser não nula, e segundo indicando a existência de elétrons se movimentando no sentido negativo do eixo z, como se estivessem vindo do interior da barreira do potencial.

Para investigar este resultado com mais cuidado, podemos extrair resultados interpretativos da interação dos elétrons com a barreira de potencial calculando o coeficiente de reflexão R, onde

$$R = \frac{|\vec{J}_{I}^{refl}|}{|\vec{J}_{I}|} = \frac{cC^{*}C\left(\frac{2pc}{E+mc^{2}}\right)}{cA^{*}A\left(\frac{2pc}{E+mc^{2}}\right)} = \frac{C^{*}C}{A^{*}A} = \frac{C^{2}}{A^{2}} = \left(\frac{C}{A}\right)^{2}$$

Recorrendo as relações entre C e A apresentadas na Eq. 7, temos que

$$R = \left(\frac{C}{A}\right)^2 = \left(\frac{1+\gamma}{1-\gamma}\right)^2$$

Como apontado na Eq. 6, temos que $\gamma > 1$, o que implica em $1 + \gamma > 1 - \gamma$, de modo que

$$\frac{1+\gamma}{1-\gamma} > 1$$

o que nos leva diretamente a um paradoxal resultado no qual

$$\left|\vec{j}_{I^{refl}}\right| > \left|\vec{j}_{I}\right|$$

que está nos dizendo que a barreira de potencial reflete mais partículas do que nela incidem! Como podemos interpretar estarem sendo refletidas mais partículas do que foram lançadas em direção a barreira? O resultado se torna mais intrigante quando calculamos o coeficiente de transmissão e obtemos um resultado não nulo, indicando que existem partículas sendo transmitidas no interior da barreira potencial.

$$T = \frac{|\vec{J}_{II}|}{|\vec{J}_{I}|} = \frac{cB^{*}B\left(\frac{2p'c}{V_{0} - (E + mc^{2})}\right)}{cA^{*}A\left(\frac{2pc}{E + mc^{2}}\right)} = \frac{4\gamma}{(1 - \gamma)^{2}}$$

Ainda que estranhos, estes resultados têm consistência interna, uma vez que concordam com o que havia sido apontado anteriormente sobre $\vec{j}_{II}(z)$ apontar sentido negativo do eixo z, indicando que estes elétrons adicionais encontrados na reflexão estão sendo produzidos diretamente do interior da barreira de potencial. Mas como isso é possível?

Podemos construir uma interpretação para este paradoxo admitindo que na interação de elétrons com a barreira de potencial ocorre a produção de antimatéria. Os elétrons adicionais na região I, que fazem com que $|\vec{j}_{I^{refl}}| > |\vec{j}_{I}|$, podem ser interpretados como provindos da criação de pares elétrons-pósitrons, frutos exatamente da interação dos elétrons com a barreira de potencial. Nesta produção de pares, os elétrons viajam para a região I no sentido negativo do eixo z, explicando o sentido negativo do vetor \vec{j}_{II} . Já os pósitrons seriam produzidos e viajariam no sentido positivo do eixo z, conservando a carga elétrica, o momento e a energia da interação.



Figura 6 - Representação explicativa do Paradoxo de Klein explicado a partir da produção de pares elétrons-pósitrons.

Neste fenômeno, representado pelo gráfico apresentado na Figura 6, podemos perceber que na região I os estados positivos e negativos de energia estão associados aos estados $\pm mc^2$ obtidos a partir da equação de Dirac que descreve o elétron livre. Na região II, as condições de energia dos elétrons delimitam os estados de energia positiva e negativa associados aa barreira de potencial como V₀ $\pm mc^2$. Esta condição delimita uma pequena região permitida, representada no gráfico pela área hachurada, no qual podem ser observadas a produção de elétrons e pósitrons que explicam $|\vec{j}_{I}refl| > |\vec{j}_{I}|$.

Ainda que seja uma solução bastante elegante e que explique adequadamente o Paradoxo de Klein, quando ela foi proposta, em meados de 1930, o pósitron ainda não havia sido detectado e ela foi muito questionada.

Mesmo que a proposta do Mar de Dirac tenha sido desconsiderada e não utilizada atualmente, a barreira de potencial relativística revela uma das consequências mais extraordinárias da teoria da relatividade restrita: a equivalência massa-energia. Ela nos comunica que, para energias de ordem relativística, é possível que haja a conversão de energia em matéria, como é o caso da produção de pares, ou de matéria em energia, como é o caso da aniquilação. Processos como estes dão vida a chamada Física de Altas Energias, na qual podemos utilizar a energia provinda da colisão de prótons, para produzir um conjunto imenso de partículas que não estavam inicialmente presentes na colisão, mas que tiveram sua produção favorecida devido a equivalência massa-energia. São elas nos permitem estudar com mais profundidade a estrutura elementar da matéria em grandes aceleradores como o LHC.

BIBLIOGRAFIAS CONSULTADAS

GREINER, W. **"Klein Paradox and Dirac's Hole Theory."** In: Relativistic Quantum Mechanichs: Wave Equations. Disponível em: <<u>link de acesso</u>>.