Universidade Federal do Espírito Santo Centro de Ciências Exatas Programa de Pós-Graduação em Física

Cássio Cecato Favarato

Padrões de difração de elétrons com e sem efeito de fase Aharonov-Bohm e a divergência em sua forma assintótica.

Vitória

2019

Cássio Cecato Favarato

Padrões de difração de elétrons com e sem efeito de fase Aharonov-Bohm e a divergência em sua forma assintótica.

Tese apresentada ao Programa de Pós Graduação em Física do Centro de Ciências Exatas da Universidade Federal do Espírito Santo como requisito parcial para a obtenção do grau de Doutor em Física.

Orientador: Prof. Dr. Sérgio Vitorino de Borba Golçalves Coorientador: Prof. Dra. Denise Assafrão de Lima

> Universidade Federal do Espírito Santo Centro de Ciências Exatas Programa de Pós-Graduação em Física

> > Vitória 2019

Ficha catalográfica disponibilizada pelo Sistema Integrado de Bibliotecas - SIBI/UFES e elaborada pelo autor

Favarato, Cássio Ccato, 1986-

F272p Padrões de difração de elétrons com e sem efeito de fase Aharonov-Bohm e a divergência em sua forma assintótica. / Cássio Ccato Favarato. - 2019. 138 f. : il.

> Orientador: Sergio Vitorino de Borba Gonçalves. Coorientadora: Denise da Costa Assafrão de Lima. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal do Espírito Santo, Centro de Ciências Exatas.

1. Difração. 2. Integrais de caminho de Feynman. 3. Funções de Fresnel. 4. Efeito Aharonov-Bohm. 5. Fase de Berry. I. Gonçalves, Sergio Vitorino de Borba. II. Lima, Denise da Costa Assafrão de. III. Universidade Federal do Espírito Santo. Centro de Ciências Exatas. IV. Título.

CDU: 53



UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

"Padrões de difração de elétrons com e sem efeito de fase Aharonov-Bohm e a divergência em sua forma assintótica"

Cássio Cecato Favarato

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Espírito Santo como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Física.

Aprovada por:

Prof/Dr Moises Porfirio Rojas Leyva (UFLA/MG)

Prof. Dr. Flávio Gimenes Alvarenga (UFES)

1

Prof. Dr. Wanderla Luis Scopel (PPGFis/UFES)

Sujis J. B. Concal

Prof. Dr.Sergio Vitorino de Borba Gonçalves (Orientador - PPGFis/UFES)

Prof^a. Dr^a. Denise da Costa Assafrão de Lima (Coorientadora - PPGFis/UFES)

Prof. Dr. Vinícius Cândido Mota (PPGFis/UFES)

Vitória-ES, 30 de maio de 2019.

Agradecimentos

Este trabalho foi financiado em parte pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) - Código Financeiro 001.

Aos professores Sérgio Vitorino Borba Gonçalves e Denise Assafrão de Lima pela orientação, oportunidade de trabalho e conhecimentos transmitido sobre os mais variados assuntos.

A minha amiga, companheira, namorada e noiva Laís Simonelli.

Ao meu pai Nilton Favarato por todo o necessário !

Aos meus tios, Luzia Cecato Bitti e Domingos Bitti

A minha mãe, que se faz sempre presente !

"Eu sou é eu mesmo. Diverjo de todo o mundo... Eu quase que nada não sei. Mas desconfio de muita coisa. O senhor concedendo, eu digo: para pensar longe, sou cão mestre – o senhor solte em minha frente uma idéia ligeira, e eu rastreio essa por fundo de todos os matos, amém! ... Ah, tem uma repetição, que sempre outras vezes em minha vida acontece. Eu atravesso as coisas – e no meio da travessia não vejo! só estava era entretido na idéia dos lugares de saída e de chegada. Assaz o senhor sabe: a gente quer passar um rio a nado, e passa; mas vai dar na outra banda é num ponto muito mais embaixo, bem diverso do em que primeiro se pensou. Viver nem não é muito perigoso?" (João Guimarães Rosa, Grande Sertão: Veredas)

Resumo

É comum, durante os cursos de graduação, estudarmos o fenômeno da difração de ondas eletromagnéticas por sistemas de fendas simples e dupla via teoria escalar da difração e a integral de Kirchoff. Alternativamente a isto, nessa tese, analisamos os padrões de difração e interferência de elétrons, via integrais de caminho de Feynman. Para isto, partimos do modelo conceitual, como originalmente proposto por R.P.Feynman em Quantum Mechanics and Path Integrals mas que, ao longo dos tempos, foi tratado com mais rigor por outros autores, e com maior sofisticação e clareza por M.Beau em Feynman path integral approach to electron diffraction for one and two slits: analytical results. Num primeiro momento, preservamos toda a análise concedida por este autor ao problema, com alguns apontamentos sobre prováveis equívocos e construimos os propagadores livres e as funções de onda para cada etapa do movimento para os diferentes sistemas estudados. H.Yabuki, em Feynman Path Integrals in the Young Double-Slit Experiment, deixa claro que na representação empregada, apesar de ser capaz de extrair informações sobre os mais diversos tipos de trajetórias possíveis, o peso probabilístico de eventos como laços são relativamente desprezíveis, validando o princípio da superposição como a soma das funções de onda emergentes de cada região de fenda. Disso obtém-se a expressão que leva as distribuições eletrônicas sobre a tela. Por meio da variação de parâmetros, como o geométrico e de número de Fresnel contidas nela, surgem os diferentes regimes da óptica: Fraunhouffer, Intermediário e Fresnel. Logo, percebeu-se que esses regimes poderiam ser recuperados mediante condições especiais conferidas as formas assintóticas das funções de Fresnel. Estendemos esses argumentos a expressão que leva a distribuição eletrônica com efeito de fase Aharonov-Bohm (AB). Ao longo de uma sucessão de aproximações, alcançamos uma expressão com significado físico e a existência de outras expressões matemáticas que carregavam divergências em seus domínios, corroborando a inexistência de uma expressão análoga àquela típica do regime de Fraunhoffer com fase mista, que manifeste as assimetrias AB. Por fim, demonstramos o surgimento da fase de Berry e sua relação com a fase AB.

Palavras-chave: Difração. Integrais de caminho de Feynman. Funções de Fresnel. Efeito Aharonov-Bohm. Comportamento assintótico. Fase de Berry.

Abstract

It is common during undergraduate courses to study the phenomenon of diffraction of electromagnetic waves by single and double slit systems via scalar diffraction theory and the Kirchoff integral. Alternatively to this, in this thesis, we analyzed the electron diffraction and interference patterns, via Feynman path integrals. For this, we start from the conceptual model, as originally proposed by RPFeynman in Quantum Mechanics and Path Integrals but which, over time, has been treated more rigorously by other authors, and with greater sophistication and clarity by M.Beau in Feynman path integral approach to electron diffraction for one and two slits: analytical results. At first, we preserve all the analysis given by this author to the problem, with some notes about probable misconceptions and construct the free propagators and wave functions for each stage of the movement for the different systems studied. H. Yabuki, in Feynman Path Integrals in the Young Double-Slit *Experiment*, makes it clear that in the employed representation, despite being able to extract information about the most diverse possible trajectories, the probabilistic weight of events as loops are relatively negligible, validating the superposition principle as the sum of the emerging wave functions of each slot region. From this we obtain the expression that takes the electronic distributions on the screen. By means of the variation of parameters, such as the geometric and Fresnel number contained in it, the different regimes of the optics appear: Fraunhouffer, Intermediate and Fresnel. Therefore, it was realized that these regimes could be recovered through special conditions conferred the asymptotic forms of Fresnel functions. We extend these arguments to the expression that leads to the electronic distribution with Aharonov-Bohm (AB) phase effect. Throughout a succession of approximations, we reached an expression with physical meaning and the existence of other mathematical expressions that carried divergences in their domains, corroborating the inexistence of an analogous expression to that typical of the regime of Fraunhoffer with mixed phase, that manifests the asymmetries AB. Finally, we demonstrate the emergence of the Berry phase and its relation to the AB phase.

Keywords: Diffraction. Feynman path integrals. Fresnel Functions. Aharonov-Bohm Effect. Asymptotic behavior. Berry Phase.

Lista de ilustrações

Figura 1 –	Aparato de difração por fenda dupla	16
Figura 2 –	Comportamento das funções de Fresnel.	20
Figura 3 –	Espiral de Cornu.	21
Figura 4 –	Curvas de difração por fenda simples em diferentes regimes ópticos	26
Figura 5 –	Curvas de difração por fenda semi infinita (borda reta)	29
Figura 6 –	Curvas de difração por fenda dupla em diferentes regimes ópticos	32
Figura 7 –	Representação gráfica dos raios vetores das ondas de alguns pontos	
	sobre a fenda siples e de ondas secundárias oriundas de alguns pontos	
	sobre a abertura.	37
Figura 8 –	Solução gráfica da equação transcendental no regime de Fraunhofer	38
Figura 9 –	Dimensionando a largura do máximo central no regime de Fraunhofer.	39
Figura 10 –	Curvas de difração: Fenda simples (1D).	55
Figura 11 –	Curvas de interferência geradas pela difração de elétrons por um fio	
	delgado.	57
Figura 12 –	Representação gráfica do aparato com a fonte emissora de ondas esféricas	
	e suas seções circulares no plano xOz	58
Figura 13 –	Esboço do aparato (fio delgado) evidenciando a menor diferença de	
	caminho óptico.	59
Figura 14 –	Esboço do aparato com caminhos exóticos	62
Figura 15 –	Combinações de caminhos	63
Figura 16 –	Tipos de caminhos para o propagador livre	68
Figura 17 –	Três diferentes tipos de caminhos exóticos.	69
Figura 18 –	Esboço do aparato de fenda dupla com solenóide	76
Figura 19 –	Curvas de difração por fenda dupla com efeito de fase AB em diferentes	
	regimes ópticos.	79
Figura 20 –	Curvas de difração por fio delgado com efeito de fase AB em diferentes	
	domínios da óptica	80

Figura 21 –	Resultados clássicos: curvas de difração no regime Fraunhoffer (expressão
	aproximda)
Figura 22 –	Curvas com divergencias
Figura 23 –	Distribuição eletrônica com efeito AB superposto no experimento de
	difração com fio delgado: θ variável e Φ_{AB} fixo
Figura 24 –	Distribuição eletrônica com efeito AB superposto no experimento de
	difração com fio delgado: θ fixo e Φ_{AB} fixo
Figura 25 –	Transporte paralelo de um vetor ao longo de uma curva geodésica fechada100
Figura 26 –	Elétron confinado numa caixa cúbica
Figura 27 –	Linha de fluxo: o efeito Aharonov-Bohm como manifestação da fase de
	Berry
Figura 28 –	Fluxo de campo magnético por uma superfície aberta

Sumário

	Introdução	10
1	APLICAÇÃO DA REPRESENTAÇÃO DAS INTEGRAIS DE TRA- JETÓRIA AO PROBLEMA DE DIFRAÇÃO DE ELÉTRONS POR	
	SISTEMAS DE UMA E DUAS FENDAS	13
1.1	Introdução	13
1.1.1	Parâmetros contidos nos argumentos das funções de Fresnel	22
1.1.2	Da fenda simples à fenda semi infinita	26
1.1.3	O sistema de fenda dupla	30
1.2	Parâmetros físicos, aproximações e interpretações	33
1.2.1	Aproximações para a fenda simples centrada	33
1.2.2	Aproximações para a fenda dupla	43
1.2.3	Considerações	51
2	ANÁLISE DA DIFRAÇÃO DE ELÉTRONS POR UM FIO DELGADO	54
2.1	Introdução	54
3	ESTIMANDO A CONTRIBUIÇÃO PROBABILÍSTICA ASSOCIADA	
	AOS CAMINHOS EXÓTICOS	61
3.1	Introdução	61
3.1.0.1	O termo de interferência não linear	67
3.1.0.2	Considerações	71
4	EFEITOS DA FASE <i>AB</i> SOBRE OS PADRÕES DE DIFRAÇÃO E INTERFERÊNIA DE ELÉTRONS COM A DIVERGÊNCIA EM SUA FORMA ASSINTÓTICA E SUA RELAÇÃO COM A FASE	
	DE BERRY	72
4.1	Introdução	72
4.1.1	O efeito AB padrão	75
4.1.2	O comportamento assintótico das funções de Fresnel sobre a parcela de	
	interferência $\mathcal{H}_{(+,-)}(x)$.	81
4.1.3	O efeito AB com fluxos magnéticos superpostos.	84
4.2	A Fase de Berry e sua Relação com o efeito AB	90
4.2.1	Introdução	90
4.2.2	Rudimentos matemáticos	91
4.2.3	Conexão com a fase AB	.02

5	CONSIDERAÇÕES FINAIS E CONCLUSÕES
	APÊNDICES 111
A.0.0.1	APÊNDICE A – O TEOREMA ADIABÁTICO 112 Demonstração do teorema adiabático para sistemas de espectro degenerado 112 APÊNDICE B – ARTIGOS PUBLICADOS 112
	ANEXOS 118 ANEXO A – O PROPAGADOR DA PARTÍCULA LIVRE 119
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Introdução

Após o trabalho de L.De Broglie [1], em que postula o princípio da dualidade onda-partícula, Davisson e Germer [2] confirmaram a natureza dual do elétron por vias experimentais. O problema quântico de difração e interferência de partículas massivas foi discutido, apoiado no princípio da dualidade onda-partícula [1] e com um viés mais qualitativo e conceitual, por R.P.Feynman em suas famosas lições The Feynman Lectures in Physics [3]. Um tratamento mais exato, porém, com algumas considerações a título de simplicidade, é encontrado em sua obra Quantum Mechanics and Path Integrals [4]. Décadas mais tarde, Roger Bach et al. [5] demonstraram a plena realização experimental do mecanismo idealizado por Feynman em [3]. A primeira observação experimental neste ambiente foi feita por Jönsson em 1961 [6] que estendeu a análise para difração por múltiplas fendas em 1974 [7]. Ainda na década de 70 do século XX, O.Donati, P.G.Merli, G.P.Missiroli e G.Pozzi [8,9] contribuíram com a primeira prova experimental da difração quântica de elétrons individuais que, mais tarde e de forma independente, também foi averiguado por A.Tonomura et al. [10] e também por [5]. Já em 2012, Rodolfo Rosa [11] examinou o experimento proposto por P.G.Merli et al. em [9] colocando-o em um contexto histórico e discutindo suas implicações filosóficas. Com os artifícios modernos e práticos que a nanotecnologia [12] proporciona, S.Fribboni et al. [13] construíram fendas em escala submicrométricas de modo que as experiências de interferência e difração de elétrons pudessem ser feitas mesmo com um microscópio eletrônico convencional. Somado a isto, experimentos de fenda foram realizados com nêutrons [14], átomos ultrafrios [15], átomos de Hélio [16] e com moléculas pesadas, como o C_{60} e o C_{70} [17–19]. M.Gondran e A.Gondram [20] apresentaram uma simulação numérica do experimento abordado em [15] e como o método das integrais de caminho de Feynman permite o cálculo da função de onda dependente do tempo além de simularem as trajetórias na interpretação de Broglie-Bohm [21].

Em [26] o autor discute, de maneira ainda mais sofisticada, o problema da difração

de elétrons empregando a formulação integral da Mecânica Quântica (MQ), ou seja, a representação das integrais de trajetória de Feynman. Demonstrou que certos parâmetros físicos, em particular os números de Fresnel, que surgem de maneira natural, estarão diretamente vinculados às formas gráficas dos padrões de interferência e difração, por fenda simples e dupla, que se traduzem nos diferentes regimes ópticos a saber: os regimes de Fraunhofer (campo distante), comumente abordado em cursos de graduação, Fresnel (campo próximo) e Intermediário. Assim como exposto por ele, recuperamos analiticamente (Cap.(1)) a expressão para as intensidades dos elétrons sobre a tela de observação e a partir dela, fizemos algumas aproximações, mediante certas condições especiais (fatores de escala), baseadas no comportamento assintótico das funções de Fresnel, reavendo assim, as expressões matemáticas típicas à cada regime.

Em seguida, no Cap.(2), o sistema é condicionado a uma nova configuração onde são eliminadas as paredes que se estendem para regiões além fendas, isso é feito ao redefinirmos os limites das integrais que surgirão durante os desdobramentos dos cálculos, com os padrões de interferência sendo gerados pela incidência de elétrons sobre um obstáculo que se resume a um fio delgado, nos permitindo avaliar de maneira didática as curvas de interferência com base na relação direta entre o comprimento de onda e o tamanho característico do obstáculo, nos levando a diferentes concepções gráficas, com e sem desvios de fase Aharonov-Bohm (AB), que indicam os variados domínios da óptica: ondulatória e geométrica.

No Cap.(3), discutimos o trabalho de Yabuki [54] a fim de justificar matematicamente as considerações atribuídas aos nossos hipotéticos modelos experimentais. Através de uma técnica peculiar de cálculo aproximativo, encontramos as funções de onda que carregam informações sobre trajetórias exóticas, mas que não foram reportadas em nossos resultados, uma vez que sua contribuição probabilística é insignificante.

No Cap.(4), inserimos nos sistemas mencionados nos capítulos iniciais um *whisker* magnetizado que, por sua vez, nos leva a observar as manifestações de fase Aharonov-Bohm mediante desvios dos padrões de interferência. Estudamos o comportamento da expressão que fornece a distribuição eletrônica sob sucessivas aproximações baseadas nos comportamentos assintótico das funções de Fresnel, em uma clara extensão dos trabalhos [25–28,30,31]. Nas diferentes etapas aproximativas, descobrimos uma expressão com sentido físico, e a existência de outras expressões matemáticas que carregam divergências em seus domínios, corroborando a inexistência de uma expressão análoga ao caso do regime de Fraunhoffer com fase mista, que manifeste as assimetrias AB. Por fim, demonstramos o surgimento da fase de Berry e sua relação com a fase AB como feito por M.Berry em [90].

No Cap.(5) reportamos os principais resultados desse trabalho.

1 Aplicação da representação das integrais de trajetória ao problema de difração de elétrons por sistemas de uma e duas fendas

1.1 Introdução

Em cursos de MQ de nível introdutório [22, 23] o comportamento ondulatório da matéria pode se mostrar um tanto quanto surpreendente e misterioso, especialmente quando visto em experiências com projeções de elétrons sobre obstáculos, como exemplo, sua difração por sistemas de uma e duas fendas. Isso pode dificultar o aprendizado de certos conceitos levando o estudante a questionamentos de natureza metafísica, que raramente são respondidos neste estágio.

Uma solução formal e completa deste problema, usando a representação das integrais de trajetória de Feynman, se mostra de grande ajuda nesse sentido. Com uma matemática de nível elementar aliada ao uso de software de simulação M.A.Fanaro *et al.* [24], apresentaram as ideias básicas da MQ a estudantes secundaristas. Por meio de conceitos de integrais de trajetória, *Sum of All Alternatives*, o experimento de difração se prestou a desmistificação e ao esclarecimento do princípio da dualidade onda-partícula. D.H.Kobe [25], já em 1979, argumentava que esta representação proporciona uma maneira muito natural de lidar com a difração, já que a amplitude de probabilidade total de um elétron propagar-se de um ponto ao outro no espaço-tempo é dado em termos de uma soma de amplitudes, uma para cada caminho individual, e com caminhos proibidos devido as barreiras sendo facilmente excluídos dessa soma.

Neste trabalho consideramos o exemplo abordado por M. Beau, descrevendo-o tal como ele o faz em [26]. Uma fonte emissora de elétrons é posicionada no ponto de coordenadas (x,y,z) = (0,0,0). Por estar muito bem localizada, a função de onda em t = 0 é representada por uma delta de Dirac. É então construído um aparato, conforme visto na

Capítulo 1. Aplicação da representação das integrais de trajetória ao problema de difração de elétrons por sistemas de uma e duas fendas 14

Fig.(1), que se resume a um obstáculo com duas fendas posicionado a uma distância D da fonte. Sobre seu eixo, as partículas terão trânsito livre sobre os pontos pertencentes a duas regiões distintas, que denominaremos de fenda (-) entre -(b + a) < x < a - b e fenda (+) que vai de (b - a) < x < b + a. Em z = D + L é colocado uma tela (tela de interferência) onde os elétrons incidirão, imprimindo marcas que denunciam os diversos pontos de colisão. Neste problema, a gravidade é negligenciada assim como os efeitos de correlação (não há interações eletrônicas). Admitimos que a dimensão do obstáculo na direção ortogonal ao plano da Fig.(1) (plano xOz) é suficientemente alta nos permitindo desprezar efeitos de difração nesse sentido. Dito isto, as deflexões dos elétrons ocorrem apenas ao longo da direção do comprimento do objeto, o que permitirá também reduzir o problema a uma dimensão, isto é, somente ao longo do comprimento das fendas.

A partir do modelo conceitual do sistema de fenda simples, como originalmente concebido em [4] e revisitado com maiores detalhes em [26], o movimento é subdividido em duas partes. A primeira, partindo da fonte para as regiões de fendas (\pm) , durante o intervalo de tempo T e a segunda partindo destas para a tela durante o intervalo de tempo τ . O passo seguinte é determinar a amplitude de probabilidade (transição) para um elétron saindo da fonte em (x = 0, y = 0, z = 0) em t = 0 chegar à tela na posição (x,z = D + L) no instante $t = T + \tau$, sabendo que ele atravessa uma região intermediária em ($\omega, z = D$), com -(b + a) < x < a - b e b - a < x < a + b em t = T. A princípio, pelas leis da MQ, não há nenhuma razão para separar o movimento em duas partes independentes, uma vez que não é conhecida a posição da partícula no instante T. Em síntese, pelo princípio da incerteza, não é possível afirmar com total precisão o momento em que a partícula atravessa as fendas. No entanto, como em todas as demais referências [25–31], esta abordagem clássica é igualmente apropriada ao estudo do problema. Isso se justifica uma vez que, na direção z o elétron tem como componente de momento linear $p_z = K_z \, \hbar$ (com K_z a componente do vetor de onda nesta direção), que está relacionada à componente da velocidade clássica $v_z = D/T = L/\tau$ com D supostamente muito maior que as dimensões consideradas na direção x, isto é, $\{x, b, a\} \ll \{D, L\}$. Além disso, é suposto que o comprimento de onda λ , que por sua vez é aproximadamente igual a sua componente na direção $z, \lambda \simeq \lambda_z = 2\pi \hbar/(m \nu_z)$, é muito menor que as distâncias $D \in L (\lambda \ll (D,L))$. Capítulo 1. Aplicação da representação das integrais de trajetória ao problema de difração de elétrons por sistemas de uma e duas fendas 15

Dessa forma, na direção z, o movimento é aproximadamente clássico, nos permitindo separar o problema em dois intervalos independentes.

Formulado por Richard Phillips Feynman [32] em 1948, o conceito de integral de caminho baseia-se em um artigo de A. P. M. Dirac [33]. Sua proposta fundamentava-se no princípio de mínima ação quântica: "A amplitude de transição sobre os estados $|a\rangle$ e $|b\rangle$ de um sistema quântico-mecânico é a soma das contribuições elementares, uma para cada trajetória, passando em $|a\rangle$ no instante t_a , e em $|b\rangle$ no instante t_b . Cada uma dessas contribuições possui o mesmo módulo, porém, sua fase é a ação clássica \mathscr{S}_{cl} para cada caminho"[4]. Esse princípio é traduzido por:

$$\mathscr{K}(a \to b) = \int_{a}^{b} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathscr{S}_{cl}\right) D[x(t)],$$
 (1.1)

em que,

$$\mathscr{S}_{cl}(b,a) = \int_{a}^{b} \mathscr{L}(q,\dot{q},t) \, dt \,, \qquad (1.2)$$

e D[x(t)] é a medida de Feynman. A integral que define $\mathcal{K}(a \to b)$ é chamada de *integral de caminho* ou propagador de Feynman.



Figura 1 – Representação esquemática do aparato com a fonte e os respectivos eixos, das fendas e da tela de observação. $\Psi^{(+)}$ e $\Psi^{(-)}$ são funções de onda, ou amplitudes de transição, provenientes de cada uma das fendas, e os segmentos ($\{\mathcal{O}, F^{\pm}\}$ e $\{F^{\pm}, \mathscr{X}\}$) denotam os caminhos clássicos (aqueles que extremizam a ação) assumidos pelas partículas.

Com base na Fig.(1) os propagadores livres, associados a dinâmica dos elétrons na ausência de interações, em cada subintervalo do movimento podem facilmente ser encontrados: para os propagadores da fonte à cada uma das fendas da forma¹,

$$\mathcal{K}_{0}(F^{(\pm)},\mathcal{O}) \longrightarrow \mathcal{K}_{0}(\omega,T;0,0) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t_{F^{(\pm)}} - t_{\mathcal{O}})}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{i m}{2\hbar} \frac{|F^{(\pm)} - \mathcal{O}|^{2}}{(t_{F^{(\pm)}} - t_{\mathcal{O}})}\right),$$
$$= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar T}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{i m}{2\hbar} \frac{(\omega^{2} + D^{2})}{T}\right), \qquad (1.3)$$

e da forma,

$$\mathscr{K}_{0}(\mathscr{X}^{(\pm)}, F^{(\pm)}) \longrightarrow \mathscr{K}_{0}(x, T+\tau; \omega, T) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t_{\mathscr{X}^{(\pm)}} - t_{F^{(\pm)}})}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{i m}{2\hbar} \frac{|\mathscr{X}^{(\pm)} - F^{(\pm)}|^{2}}{(t_{\mathscr{X}^{(\pm)}} - t_{F^{(\pm)}})}\right),$$

$$= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \tau}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{i m (L^{2} + (\pm x^{2} \mp \omega^{2}))}{\tau}\right),$$

$$(1.4)$$

para os propagadores do plano das fendas à tela.

As fendas são representadas matematicamente por funções de distribuição, como

Aqui, o ω denota a variável de integração, isto é, pertence ao domínio das fendas. 1

funções Gaussianas e as chamadas funções porta (função degrau). Nas Ref.[4,25,34], os autores, por questões de simplicidade matemática, optam pela primeira, o que não invalida suas conclusões qualitativas. O modelo de função porta, porém, é o mais realístico e condizente com resultados exatos [26–31] podendo ser escrita como,

$$\boldsymbol{\aleph}_{[(-),(+)]}(\omega) = \begin{cases} 0 & se \ b+a \le \omega \le a-b \ , \ a-b \le \omega \le b-a \ , \\ 1 & se \ -(a+b) < \omega < a-b \ , \ b-a < \omega < a+b \ . \end{cases}$$
(1.5)

As funções de onda, emergentes de cada uma das fendas, são então calculadas como:

1

$$\Psi^{(\pm)}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathscr{K}_0(\mathscr{X}^{\prime(\pm)}, F^{(\pm)}) \aleph_{[(-), (+)]}(\omega) \mathscr{K}_0(F^{(\pm)}, \mathscr{O}) \, d\omega \,. \tag{1.6}$$

Nota-se que as funções $\aleph_{[(-),(+)]}(\omega)$ são responsáveis por fixar os limites de cada integral, limitando as possíveis trajetórias ao longo do comprimento das fendas, de forma que a função de onda será escrita como

$$\Psi^{(\pm)}(x) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\sqrt{T\tau}}\right) \exp\left[\frac{i\,m}{2\,\hbar}\left(\frac{D^2}{T} + \frac{L^2}{\tau}\right)\right] \int_{\pm b-a}^{\pm b+a} \exp\left[\frac{i\,m}{2\,\hbar}\left(\frac{\omega^2}{T} + \frac{(\pm x\mp\omega)^2}{\tau}\right)\right] d\omega \,.$$
(1.7)

Com alguma manipulação algébrica podemos escrever o argumento da função exponencial no integrando da Eq.(1.7), e obter

•
$$\frac{m}{2\hbar} \left(\frac{\omega^2}{T} + \frac{(\pm x \mp \omega)^2}{\tau} \right) = \frac{m}{2\hbar} \frac{1}{T\tau} \left(\tau \omega^2 + T \left(x^2 + \omega^2 - 2x\omega \right) \right),$$

$$= \frac{m}{2\hbar} \frac{1}{T\tau} \left((T + \tau) \omega^2 - 2x\omega T + x^2 T \right),$$

$$= \frac{m}{2\hbar} \frac{(T + \tau)}{T\tau} \left(\omega^2 - 2\omega \frac{Tx}{(T + \tau)} + \frac{Tx^2}{(T + \tau)} \right),$$

$$= \frac{m}{2\hbar} \frac{(T + \tau)}{T\tau} \left(\left(\omega^2 - 2\omega \frac{Tx}{(T + \tau)} + \left(\frac{Tx}{(T + \tau)} \right)^2 \right) - \left(\frac{Tx}{(T + \tau)} \right)^2 + \frac{Tx^2}{(T + \tau)} \right),$$

$$= \frac{m}{2\hbar} \left(\frac{1}{T} + \frac{1}{\tau} \right) \left(\left(\omega - \frac{Tx}{(T + \tau)} \right)^2 - \left(\frac{Tx}{(T + \tau)} \right)^2 + \frac{Tx^2}{(T + \tau)} \right), \quad (1.8)$$

 com

•
$$\vartheta^{(\pm)} = \frac{m}{2\hbar} \left(\frac{1}{T} + \frac{1}{\tau} \right) \left(\frac{T x^2}{(T+\tau)} - \left(\frac{T x}{(T+\tau)} \right)^2 \right),$$
$$= \frac{m}{2\hbar} \left(\frac{x^2}{\tau} - \frac{x^2 T}{\tau (T+\tau)} \right),$$
$$= \frac{m x^2}{2\hbar} \left(\frac{(T+\tau)}{\tau (T+\tau)} - \frac{T}{\tau ((T+\tau))} \right),$$
$$= \frac{m x^2}{2\hbar (T+\tau)},$$
(1.9)

sendo um fator de fase comum a ambas as funções provenientes de cada uma das fendas. Isso nos conduzirá à

$$\Psi^{(\pm)}(x) = \mathcal{N} e^{i(\xi + \vartheta^{(\pm)})} \int_{\pm b-a}^{\pm b+a} \exp\left\{i\left[\nu\left(\omega - \frac{Tx}{T+\tau}\right)^2\right]\right\} d\omega, \qquad (1.10)$$

levando em conta as seguintes nomeações,

$$\mathcal{N} = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \sqrt{T \tau}}\right), \qquad (1.11)$$

$$\nu = \frac{m}{2\hbar} \left(\frac{1}{T} + \frac{1}{\tau} \right), \qquad (1.12)$$

$$\xi = \exp\left[\frac{m}{2\hbar}\left(\frac{D^2}{T} + \frac{L^2}{\tau}\right)\right].$$
(1.13)

Apesar de termos mencionado anteriormente que o problema se restringia a uma dimensão (abertura das fendas), consideramos também, até o momento, as distâncias perpendiculares aos planos do obstáculo e da tela. Esses segmentos são as projeções dos vetores da Fig.(1) ({ \mathcal{O}, F^{\pm} } e { F^{\pm}, \mathcal{X} }) na direção do eixo z e, portanto, compõem os chamados propagadores livres em cada sub intervalo do movimento em z, análogo ao que foi feito, discretamente, por A.O.Barut [29] e com mais rigor em [26], quando tratados os casos de fenda simples e dupla. Aqui, os nomearemos como,

$$\mathscr{K}_0(D) = \exp\left(\frac{i\,m\,D^2}{2\,\hbar\,T}\right),\tag{1.14a}$$

$$\mathscr{K}_0(L) = \exp\left(\frac{i\,m\,L^2}{2\,\hbar\,\tau}\right). \tag{1.14b}$$

Carregar estes propagadores ao longo dos cálculos não implicará em nenhum dano, uma vez que farão parte de uma função do tipo exponencial complexa. Logo, quando extraído o seu módulo ao quadrado, ficamos com a unidade não interferindo no resultado final, ou Capítulo 1. Aplicação da representação das integrais de trajetória ao problema de difração de elétrons por sistemas de uma e duas fendas 19

seja, na propriedade a ser medida.

Com a finalidade de deixar o integrando das funções (1.10) com aspecto um pouco mais familiar, aplicamos duas mudanças de variáveis, com a primeira delas sendo,

$$\gamma^{(\pm)} = \omega - \frac{T x}{(T + \tau)} \longrightarrow d\gamma^{(\pm)} = d\omega,$$
 (1.15)

que, acompanhada dos novos limites de integração superior e inferior, respectivamente, darão

$$\gamma_2^{(\pm)} = (\pm b + a) - \frac{T x}{(T + \tau)},$$
(1.16a)

$$\gamma_1^{(\pm)} = (\pm b - a) - \frac{T x}{(T + \tau)}.$$
(1.16b)

Assim, a função de onda na Eq.(1.10) ficará escrita como

$$\Psi^{(\pm)}(x) = \mathcal{N} e^{i\left(\xi+\vartheta\right)} \int_{\gamma_1^{(\pm)}}^{\gamma_2^{(\pm)}} \exp\left(i\nu\left(\gamma^{(\pm)}\right)^2\right) d\gamma^{(\pm)}.$$
(1.17)

A próxima mudança de variáveis será

$$\zeta^{(\pm)} = \sqrt{\frac{2}{\pi}\nu} \gamma^{(\pm)} \quad \to \quad d\gamma^{(\pm)} = \sqrt{\frac{\pi}{2\nu}} d\zeta^{(\pm)}, \qquad (1.18)$$

juntamente com seus limites de integração superiores e inferiores, respectivamente,

$$\zeta_{2}^{(\pm)} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \nu \gamma_{2}^{(\pm)}, \qquad (1.19a)$$

$$\zeta_1^{(\pm)} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \, \nu \, \gamma_1^{(\pm)} \,. \tag{1.19b}$$

E as funções de onda, na forma integral (Eq.(1.17)) ficam escritas como

$$\Psi^{(\pm)}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} v \mathcal{N} e^{i(\xi+\vartheta)} \int_{\zeta_1^{(\pm)}}^{\zeta_2^{(\pm)}} \exp\left(i\frac{\pi}{2}(\zeta^{(\pm)})^2\right) d\zeta^{(\pm)},$$

$$= \sqrt{\frac{2}{\pi}} v \mathcal{N} e^{i(\xi+\vartheta)} \left[\int_0^{\zeta_2^{(\pm)}} \exp\left(i\frac{\pi}{2}(\zeta^{(\pm)})^2\right) d\zeta^{(\pm)} - \int_0^{\zeta_1^{(\pm)}} \exp\left(i\frac{\pi}{2}(\zeta^{(\pm)})^2\right) d\zeta^{(\pm)}\right].$$
(1.20)

Os integrandos da Eq.(1.20) são funções do tipo exponencial complexa e portanto, com o auxílio da fórmula de Euler, podemos expressá-los como uma soma de seno e cosseno trigonométricos,

$$\Psi^{(\pm)}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \nu \mathcal{N} e^{i(\xi+\vartheta)} \left\{ \int_0^{\zeta_2^{(\pm)}} \left[\cos\left(\frac{\pi}{2} \left(\zeta^{(\pm)}\right)^2\right) + i \sin\left(\frac{\pi}{2} \left(\zeta^{(\pm)}\right)^2\right) \right] d\zeta^{(\pm)} - \int_0^{\zeta_1^{(\pm)}} \left[\cos\left(\frac{\pi}{2} \left(\zeta^{(\pm)}\right)^2\right) + i \sin\left(\frac{\pi}{2} \left(\zeta^{(\pm)}\right)^2\right) \right] d\zeta^{(\pm)} \right\}.$$
(1.21)

As integrais de funções trigonométricas seno e cosseno com argumentos que são polinômios de grau dois, presentes na Eq.(1.21), são comumente conhecidas como integrais de Fresnel dessas respectivas funções,

$$\mathscr{C}(\zeta_{(2/1)}^{(\pm)}) = \int_0^{\zeta_{(2/1)}^{(\pm)}} \cos\left(\frac{\pi}{2} \left(\zeta^{(\pm)}\right)^2\right) d\zeta^{(\pm)}, \qquad (1.22a)$$

$$\mathscr{S}(\zeta_{(2/1)}^{(\pm)}) = \int_0^{\zeta_{(2/1)}^{(\pm)}} \sin\left(\frac{\pi}{2} \, (\zeta^{(\pm)})^2\right) \, d\zeta^{(\pm)} \,. \tag{1.22b}$$

Ambas são integrais que não apresentam formas fechadas, com seus valores numéricos obtidos de forma tabelada [35–37]. Da Fig.(2), percebe-se que essas funções são ímpares de seus argumentos,



convergindo para os seguintes valores quando tomados os limites,

$$\lim_{\zeta \to \pm \infty} \mathscr{C}(\zeta) = \pm 1/2, \qquad (1.23a)$$

$$\lim_{\zeta \to \pm \infty} \mathscr{S}(\zeta) = \pm 1/2.$$
 (1.23b)

Essas funções eram calculadas através da espiral de Cornu, uma curva gerada por uma representação paramétrica de $\mathscr{S}(\zeta)$ e $\mathscr{C}(\zeta)$ no plano complexo, como pode ser visto na Fig.(3).

Capítulo 1. Aplicação da representação das integrais de trajetória ao problema de difração de elétrons por 21sistemas de uma e duas fendas



Figura 3 – A representação paramétrica das funções de Fresnel no plano complexo são as espirais de Cornu.

Também conhecida como radióide de arcos, Clotóide ou espiral de Euler [38] foi introduzida por M. A. Cornu como auxiliar no estudo da teoria da difração de Fresnel, com seu conceito usualmente aplicado na elaboração do desenho geométrico de rodovias e ferrovias 39–42]. Um elemento de arco dessa curva é dado como

$$|d\mathbf{l}| = \sqrt{\left(\frac{d\mathscr{C}(\zeta)}{d\zeta}\right)^2 + \left(\frac{d\mathscr{S}(\zeta)}{d\zeta}\right)^2}, \qquad (1.24)$$

que, usando as Eq.(1.22a) e (1.22b) teremos

$$|d\mathbf{l}| = \sqrt{\left(\cos\left(\frac{\pi}{2}\zeta^2\right)\right)^2 + \left(\sin\left(\frac{\pi}{2}\zeta^2\right)\right)^2} d\zeta,$$

= $d\zeta$, (1.25)

o que significa dizer que o comprimento de arco entre dois pontos quaisquer pertencentes à espiral de Cornu corresponde à diferença entre os valores de ζ associados a estes pontos.

Luís Blanch et. al [43] fazeram um estudo pormenorizado e muito didático sobre essa curva. Partindo das propriedades geométricas que definem uma Clotóide, eles obtiveram sua equação a partir das integrais de Fresnel definidas em (1.22a) e (1.22a), representando geometricamente certas características encontradas e alcançando uma aproximação numérica para a mesma. A título de curiosidade, apontamos ainda outros trabalhos como

Capítulo 1. Aplicação da representação das integrais de trajetória ao problema de difração de elétrons por sistemas de uma e duas fendas 22

[44,45], que lidam com as funções de Fresnel em suas mais diversas formas e aplicações em problemas de espalhamento em Física Óptica.

A adoção de ferramentas computacionais como softwares matemáticos na elaboração de trabalhos de natureza mais sofisticada, em substituição a técnicas rudimentares, tornouse imprescindível, como será visto mais adiante, onde avaliamos as integrais de Fresnel nas construções gráficas dos padrões de interferência por meio do software Mathematica® [46–49].

1.1.1 Parâmetros contidos nos argumentos das funções de Fresnel

Em algum momento, durante a graduação, estudantes dos cursos de Física ou engenharia encaram a tarefa de investigar o comportamento ondulatório da matéria, e para isso, fazem uso de uma série de livros tradicionais [3,23,50,51], que abordam o problema com mecanismos de fendas simples e dupla. Porém, poucos são os que fazem com clareza, objetividade e rigor matemático no que diz respeito ao diagnóstico dos diferentes regimes ópticos, que surgem mediante mudanças nas configurações geométricas do sistema [52,53].

Em [29] o autor, empregando a representação de Feynman, encontra a função de onda sobre a tela e aquilo que diz ser a intensidade de difração não normalizada no regime de Fresnel. Em seguida, passa ao regime de Fraunhofer tomando o limite da função de onda quando o intervalo de tempo entre a fonte e o plano na fenda torna-se infinito e por consequência, essa distância também vai ao infinito. No entando, classificar a figura de difração obtida, baseado apenas nos intervalos de tempo de vôo da partícula, é inviável em certas situações. Nesse sentido M. Beau [26] trata ambos os casos, uma e duas fendas, com o auxílio dos chamados números de Fresnel. Extraídos de maneira natural, com alguma manipulação algébrica, essas quantidades permitem mapear as configurações geométricas do aparato (a, b, D, L), relacionando-as às características do feixe difratado (λ) , possibilitando-o tipificar com mais segurança as diferentes formas gráficas de acordo com os regimes de Fresnel, Intermediário e de Fraunhofer. Com finalidade semelhante,

Capítulo 1. Aplicação da representação das integrais de trajetória ao problema de difração de elétrons por 23sistemas de uma e duas fendas

vamos reorganizar a estrutura dos argumentos das funções de Fresnel da forma

•
$$\zeta_{2}^{(\pm)} = \left(\frac{m}{\pi\hbar}\left(\frac{1}{\tau}+\frac{1}{T}\right)\right)^{1/2} \left((a\pm b)-\frac{Tx}{(T+\tau)}\right),$$

$$= \left(\frac{m}{\pi\hbar}\left(\frac{1}{\tau}+\frac{1}{T}\right)\right)^{1/2} (a\pm b) - \left(\frac{m}{\pi\hbar}\left(\frac{1}{\tau}+\frac{1}{T}\right)\right)^{1/2} \frac{Tx}{(T+\tau)},$$

$$= \left(\frac{m}{\pi\hbar}\left(\frac{1}{\tau}+\frac{1}{T}\right)\right)^{1/2} (a\pm b) - \left(\frac{mT}{\pi\hbar(T+\tau)}\right)x,$$
(1.26)

e usando a condição $v = D/T = L/\tau$, teremos

•
$$\zeta_{2}^{(\pm)} = \left(\frac{m\,\nu}{\pi\,\hbar}\left(\frac{1}{D} + \frac{1}{L}\right)\right)^{1/2} \left((a\pm b) - \frac{\frac{D}{\nu}\,x}{\left(\frac{D}{\nu} + \frac{L}{\nu}\right)}\right),$$

$$= \left(\frac{(h/\lambda)}{\pi\,(h/2\,\pi)}\left(\frac{1}{D} + \frac{1}{L}\right)\right)^{1/2} \left((a\pm b) - \frac{\frac{D}{\nu}\,x}{\left(\frac{D}{\nu} + \frac{L}{\nu}\right)}\right),$$

$$= \left(\frac{2}{\lambda\,L}\left(1 + \frac{L}{D}\right)\right)^{1/2} \left((a\pm b) - \frac{x}{\left(1 + \frac{L}{D}\right)}\right),$$

$$= \left(\frac{2a^{2}}{\lambda\,L}\left(1 + \frac{L}{D}\right)\right)^{1/2} \left(\left(1\pm \frac{b}{a}\right) - \frac{x}{a\left(1 + \frac{L}{D}\right)}\right),$$

$$= \sqrt{N_{F}(a)\,\beta} \left(\left(1\pm \frac{b}{a}\right) - \frac{x}{a\,\beta}\right).$$
(1.27)

O mesmo procedimento é feito para os limites inferiores de integração

•
$$\zeta_1^{(\pm)} = \left(\frac{m}{\pi \hbar} \left(\frac{1}{\tau} + \frac{1}{T}\right)\right)^{1/2} \left((-a \pm b) - \frac{T x}{(T + \tau)}\right),$$

$$= \sqrt{N_F(a) \beta} \left(\left(-1 \pm \frac{b}{a}\right) - \frac{x}{a \beta}\right), \qquad (1.28)$$

de modo que, comparando as Eq.(1.27) e Eq.(1.28), teremos

$$\zeta_2^{(\pm)}(x, N_F(a), 1) = \zeta_1^{(\pm)}(x, N_F(a), -1) .$$
(1.29)

Nas equações (1.27) e (1.28) surge o número de Fresnel $N_F(a)$, associado ao tamanho característico das fendas (2a) e um parâmetro geométrico adimensional β , ambos definidos por [26]:

$$N_F(a) \equiv \frac{2 a^2}{\lambda L}, \qquad (1.30a)$$

$$\beta \equiv \left(1 + \frac{L}{D}\right). \tag{1.30b}$$

Vamos encontrar a intensidade dos elétrons sobre a tela de observação para cada uma das fendas isoladamente e, para isto, começamos reescrevendo função (1.20) com

Capítulo 1. Aplicação da representação das integrais de trajetória ao problema de difração de elétrons por sistemas de uma e duas fendas 24

as considerações feitas nas etapas anteriores, ou seja, usando as Eq.(1.22a) e Eq.(1.22b). Assim,

$$\Psi^{(\pm)}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} v \mathscr{N} e^{i(\xi+\vartheta)} \left\{ \left[\mathscr{C}\left(\zeta_{2}^{(\pm)}\right) + i \mathscr{S}\left(\zeta_{2}^{(\pm)}\right) \right] - \left[\mathscr{C}\left(\zeta_{1}^{(\pm)}\right) + i \mathscr{S}\left(\zeta_{1}^{(\pm)}\right) \right] \right\},$$

$$= \sqrt{\frac{2}{\pi}} v \mathscr{N} e^{i(\xi+\vartheta)} \left\{ \left[\mathscr{C}\left(\zeta_{2}^{(\pm)}\right) - \mathscr{C}\left(\zeta_{1}^{(\pm)}\right) \right] + i \left[\mathscr{S}\left(\zeta_{2}^{(\pm)}\right) - \mathscr{S}\left(\zeta_{1}^{(\pm)}\right) \right] \right\},$$

$$= \sqrt{\frac{2}{\pi}} v \mathscr{N} e^{i(\xi+\vartheta)} \left[\Delta \mathscr{C}\left(\zeta^{(\pm)}\right) + i \Delta \mathscr{S}\left(\zeta^{(\pm)}\right) \right].$$
(1.31)

Notadamente, o fator complexo que precede a função exponencial pode ser reorganizado da forma

•
$$\sqrt{\frac{2}{\pi}} v \mathscr{N} = (-i) \left(\frac{m}{2\pi \hbar \sqrt{T \tau}} \right) \left(\frac{2\hbar}{m} \frac{T \tau}{(T + \tau)} \right)^{1/2},$$
$$= (-i) \left(\frac{m^2 h}{2m h^2 \left(\frac{D}{v} + \frac{L}{v} \right)} \right)^{1/2},$$
$$= (-i) \left(\frac{m v}{2h (D + L)} \right)^{1/2},$$
$$= (-i) \left(\frac{1}{2\lambda (D + L)} \right)^{1/2}, \qquad (1.32)$$
$$= (-i) \left(\frac{1}{2\lambda D \beta} \right)^{1/2}, \qquad (1.33)$$

extraindo o módulo ao quadrado das funções $\Psi^{(\pm)}(x)$ na Eq.(1.31), teremos

$$\mathcal{P}^{(\pm)}(x) = \left| \Psi^{(\pm)}(x) \right|^{2},$$

$$= \Psi^{(\pm)^{*}}(x)\Psi^{(\pm)}(x),$$

$$= \left(\frac{1}{2\lambda (D+L)} \right) \left\{ \left[\Delta \mathscr{C} \left(\zeta^{(\pm)} \right) - i \Delta \mathscr{S} \left(\zeta^{(\pm)} \right) \right] \left[\Delta \mathscr{C} \left(\zeta^{(\pm)} \right) + i \Delta \mathscr{S} \left(\zeta^{(\pm)} \right) \right] \right\},$$

$$= \frac{\left(\Delta \mathscr{C} \left(\zeta^{(\pm)} \right)^{2} + \Delta \mathscr{S} \left(\zeta^{(\pm)} \right)^{2} \right)}{2\lambda (D+L)}.$$
(1.34)

Analisando a Eq.(1.34) com mais detalhes, nota-se que sua dimensão varia com o inverso do quadrado do comprimento e, portanto, estando dimensionalmente inconsistente ², ou seja, não representa uma probabilidade nem densidade de probabilidade. Porém, nos valendo da nomenclatura cunhada por M. Beau [26], vamos chamá-las de *populações relativas*.

 $[\]overline{^2}$ A distribuição se dá sobre o eixo paralelo ao eixo das fendas, portanto, em uma dimensão.

Podemos sanar este equívoco reinterpretando o problema. Para encontrar o elétron no ponto x sobre a tela, passados $T + \tau$, devemos respeitar a condição de que no instante T ele estava na posição da fenda, confinado ao intervalos $[\pm b + a, \pm b - a]$ para cada fenda isoladamente. Assim

$$\mathscr{P}^{(1)}(x,T+\tau|\,\omega\in[\pm b+a,\,\pm b-a],T) \equiv \frac{\left|\Psi^{(\pm)}(x)\right|^2}{\int_{\pm b-a}^{\pm b+a}\left|\int_{-\infty}^{+\infty}K_0(\omega,T;x_0,0)\,\delta(x_0)\,dx_0\right|^2\,d\omega},\tag{1.35}$$

sendo,

$$\int_{\pm b-a}^{\pm b+a} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} K_0(\omega,T;x_0,0) \,\delta(x_0) \,dx_0 \right|^2 \,d\omega = \int_{\pm b-a}^{\pm b+a} |K_0(\omega,T;x_0,0)|^2 \,d\omega ,$$

$$= \left(\frac{m}{2\pi \hbar T}\right) \int_{\pm b-a}^{\pm b+a} d\omega ,$$

$$= \left(\frac{m\nu}{2\pi \hbar D}\right) (2a) ,$$

$$= \frac{2a}{D\lambda} .$$
(1.36)

Substituindo (1.36) em (1.35), ficamos :

$$\mathcal{P}^{(1)}(x,T+\tau|\omega\in[\pm b+a,\pm b-a],T) = \frac{D\lambda}{2a} \left(\frac{\Delta \mathscr{C}\left(\zeta^{(\pm)}\right)^2 + \Delta \mathscr{S}\left(\zeta^{(\pm)}\right)^2}{2\lambda\left(D+L\right)}\right),$$
$$= \frac{D\lambda}{2a} \mathcal{P}^{(\pm)}(x).$$
(1.37)

Estando agora com a dimensão correta , a Eq.(1.37) pode ser adequadamente chamada de densidade de probabilidade. Quando normalizada, a probabilidade condicional é

$$\int_{R_x} \mathscr{P}^{(1)}(x, T + \tau | \omega \in [\pm b + a, \pm b - a], T) \, dx = 1, \qquad (1.38)$$

implicando em,

$$\int_{R_x} \left| \Psi^{(\pm)}(x) \right|^2 \, dx = \int_{\pm b-a}^{\pm b+a} |K_0(\omega, T; 0, 0)|^2 \, d\omega \,. \tag{1.39}$$

As curvas, traçadas a partir da Eq.(1.34), são representadas na Fig.(4):



Capítulo 1. Aplicação da representação das integrais de trajetória ao problema de difração de elétrons por sistemas de uma e duas fendas 26

Figura 4 – Sucessão de padrões de difração para fenda simples observadas a distâncias crescentes do plano da fenda. As abscissas são as distâncias dadas em unidades de a (semi comprimento característico da fenda), com as ordenadas representando as populações relativas normalizadas.

1.1.2 Da fenda simples à fenda semi infinita

Vamos admitir agora um sistema de fenda única, centrada exatamente em x = 0 e tomando $\omega \in [-a, +a]$. As equações (1.27) e (1.28) ficam

$$\zeta_2 = \sqrt{N_F(a)\beta} \left(1 - \frac{x}{a\beta}\right), \qquad (1.40a)$$

$$\zeta_1 = \sqrt{N_F(a)\beta} \left(-1 - \frac{x}{a\beta} \right). \tag{1.40b}$$

Em seguida, encontramos o comprimento do domínio de integração $[\zeta_1, \zeta_2]$, da forma

$$\Delta \zeta = \zeta_2 - \zeta_1,$$

= $\sqrt{N_F(a)\beta} \left[\left(1 - \frac{x}{a\beta} \right) - \left(-1 - \frac{x}{a\beta} \right) \right],$
= $2\sqrt{N_F(a)\beta}.$ (1.41)

com o valor médio desse intervalo dado por

$$\begin{aligned} \zeta_m &= \frac{(\zeta_2 + \zeta_1)}{2}, \\ &= \frac{\sqrt{N_F(a)\beta}}{2} \left[\left(1 - \frac{x}{a\beta} \right) + \left(-1 - \frac{x}{a\beta} \right) \right], \\ &= -\frac{\Delta \zeta x}{2\beta a}. \end{aligned}$$
(1.42)

Dessa forma, $\zeta_1 \in \zeta_2$ podem ser reescritos em função de (1.41) e (1.42), da seguinte maneira

$$\zeta_1 = \zeta_m - \frac{\Delta \zeta}{2}, = -\frac{\Delta \zeta}{2} \left(\frac{x}{\beta a} + 1 \right);$$
(1.43a)

$$\zeta_2 = \zeta_m + \frac{\Delta \zeta}{2},$$

= $-\frac{\Delta \zeta}{2} \left(\frac{x}{\beta a} - 1 \right).$ (1.43b)

Não havendo distinção entre $\Psi^{(+)}$ e $\Psi^{(-)}$ dizemos simplesmente que $\mathscr{P}^{(\pm)}(x) = \mathscr{P}(x)$. Para fins práticos, idealizamos um aparato com uma única fenda, centrada em x = 0 e extremamente grande, ao ponto de nos permitir aplicar os limites dados em (1.23a) e (1.23b) na Eq.(1.34) e encontrar o valor,

$$\mathcal{P}_{0} = \frac{1}{2\lambda (D+L)} \lim_{\zeta \to \infty} \left[\left(\mathscr{C}(\zeta) - \mathscr{C}(-\zeta) \right)^{2} + \left(\mathscr{S}(\zeta) - \mathscr{S}(-\zeta) \right)^{2} \right],$$

$$= \frac{1}{2\lambda (D+L)} \left[\left(1/2 - (-1/2) \right)^{2} + \left(1/2 - (-1/2) \right)^{2} \right],$$

$$= \frac{1}{\lambda (D+L)}.$$
 (1.44)

Feito isso, somos capazes de determinar valores da Eq.(1.34) em alguns pontos relevantes:

• $x = 0 \Rightarrow \zeta_2 = -\zeta_1$

$$\zeta_2 = \frac{\Delta \zeta}{2} , \qquad (1.45a)$$

$$\zeta_1 = -\frac{\Delta\zeta}{2}, \qquad (1.45b)$$

Capítulo 1. Aplicação da representação das integrais de trajetória ao problema de difração de elétrons por sistemas de uma e duas fendas 28

logo,

$$\mathcal{P}(x=0) = \frac{\mathcal{P}_0}{2} \left[\left(\mathscr{C}\left(\zeta_2\right) - \mathscr{C}\left(\zeta_1\right) \right)^2 + \left(\mathscr{S}\left(\zeta_2\right) - \mathscr{S}\left(\zeta_1\right) \right)^2 \right], \\ = \frac{\mathcal{P}_0}{2} \left[\left(\mathscr{C}\left(\frac{\Delta\zeta}{2}\right) - \mathscr{C}\left(-\frac{\Delta\zeta}{2}\right) \right)^2 + \left(\mathscr{S}\left(\frac{\Delta\zeta}{2}\right) - \mathscr{S}\left(-\frac{\Delta\zeta}{2}\right) \right)^2 \right], \\ = 2 \mathcal{P}_0 \left[\mathscr{C}^2\left(\frac{\Delta\zeta}{2}\right) + \mathscr{S}^2\left(\frac{\Delta\zeta}{2}\right) \right].$$
(1.46)

Outros pontos interessantes dizem respeito aqueles que, se a óptica geométrica fosse estritamente válida, seriam regiões de sombra. Em outras palavras, regiões de intensidade nula. Nesse caso, se x < -a ou x > a, teríamos a região de sombra. Para os extremos da fenda, as Eqs.(1.43b) e (1.43a) fornecem

• $x = \mp a$

$$\zeta_2 = \pm \frac{\Delta \zeta}{2} \left(\frac{1}{\beta} \pm 1 \right) , \qquad (1.47a)$$

$$\zeta_1 = \pm \frac{\Delta \zeta}{2} \left(\frac{1}{\beta} \pm 1 \right) , \qquad (1.47b)$$

logo,

$$\mathcal{P}(x = \mp a) = \frac{\mathcal{P}_0}{2} \left\{ \left[\mathscr{C}\left(\frac{\Delta\zeta}{2}\left(\frac{1}{\beta} + 1\right)\right) - \mathscr{C}\left(\frac{\Delta\zeta}{2}\left(\frac{1}{\beta} - 1\right)\right) \right]^2 + \left[\mathscr{S}\left(\frac{\Delta\zeta}{2}\left(\frac{1}{\beta} + 1\right)\right) - \mathscr{S}\left(\frac{\Delta\zeta}{2}\left(\frac{1}{\beta} - 1\right)\right) \right]^2 \right\}.$$
(1.48)

Examinamos o caso particular descrito por uma fenda semi-infinita (borda reta), cuja parede se estende de $(-\infty, 0]$ e cuja abertura que vai de $(0, +\infty)$. Isso implica em adotar os limites,

$$\zeta_2 \longrightarrow +\infty, \qquad (1.49a)$$

$$\zeta_1 \to \zeta(x;\beta) = -\sqrt{\frac{2}{\lambda L}} \frac{x}{\beta}.$$
 (1.49b)

Empregando as Eq.(1.49a) e Eq.(1.49b) como argumentos das funções de Fresnel na Eq.(1.34), podemos avaliar analítica e graficamente o comportamento das populações

Capítulo 1. Aplicação da representação das integrais de trajetória ao problema de difração de elétrons por sistemas de uma e duas fendas 29

relativas:

$$\mathcal{P}^{(Semi)}(x) = \frac{\mathscr{P}_0}{2} \left\{ \left[1/2 - \mathscr{C}\left(-\sqrt{\frac{2}{\lambda L}}\frac{x}{\beta}\right)\right]^2 + \left[1/2 - \mathscr{S}\left(-\sqrt{\frac{2}{\lambda L}}\frac{x}{\beta}\right)\right]^2 \right\},\$$
$$= \frac{\mathscr{P}_0}{2} \left\{ \left[1/2 + \mathscr{C}\left(\sqrt{\frac{2}{\lambda L}}\frac{x}{\beta}\right)\right]^2 + \left[1/2 + \mathscr{S}\left(\sqrt{\frac{2}{\lambda L}}\frac{x}{\beta}\right)\right]^2 \right\}.$$
(1.50)

Esta equação nos chama a atenção para alguns pontos igualmente interessantes. Vejamos o que ocorre no limite geométrico da semi fenda, ou seja,

$$\mathcal{P}^{(Semi)}(x=0) = \frac{\mathcal{P}_0}{2} \left\{ \left[1/2 + \mathscr{C}(0) \right]^2 + \left[1/2 + \mathscr{S}(0) \right]^2 \right\},$$
$$= \frac{\mathcal{P}_0}{4}.$$
(1.51)

À medida que adentramos a região de sombra, com x assumindo valores negativos, a intensidade cai gradualmente até se anular em $x \to -\infty.$ Em contrapartida, quando x se torna positivo (região geométrica de iluminação), a intensidade aumenta assumindo um valor máximo em 1.37, aproximadamente, para em seguida cair flutuando em torno de um valor constante e, por isso, adquirindo um aspecto gráfico serrilhado visto na Fig.(5). Neste caso,

$$\lim_{x \to \infty} \mathscr{P}^{(+)}(x) = \mathscr{P}_0. \tag{1.52}$$



Figura 5 - Padrão de difração por uma fenda semi-infinita (borda reta), mostrando as oscilações de intensidade em torno de \mathcal{P}_0 , para x, graduado em unidades arbitrárias de comprimento, crescente.

Capítulo 1. Aplicação da representação das integrais de trajetória ao problema de difração de elétrons por sistemas de uma e duas fendas 30

Note que neste caso, o conceito usual de fenda finita e mensurável com respeito a λ se perde e diferentemente do que pode vir a ocorrer nos casos de fenda simples (ver Fig.(4)) e dupla (ver Fig.(6)) cujos os padrões de interferência dependem fortemente da relação entre as dimensões das fendas, distância entre elas e de λ , em diferentes regimes ópticos, aqui sua forma se preserva. Isso fica claro ao variarmos o parâmetro adimensional β , a intensidade é redimensionada, ficando comprimida ($L \ll D$) ou distendida (L > D) e, neste caso, a região iluminada vai se estendendo ainda mais fundo para valores de xnegativo. Mesmo assim, o padrão de intensidade, característico do regime de Fresnel, se mantém [50].

1.1.3 O sistema de fenda dupla

De acordo com o princípio de Huygens, para a fenda dupla, os orifícios ou os pontos pertencentes a seus domínios comportam-se como fontes secundárias coerentes, cujas ondas interferem entre si no lado direito sobre a tela, assim como discutido anteriormente para fenda simples. A função de onda (amplitude transição) total sobre a tela de observação será, pelo princípio da superposição, dada por

$$\Psi_{D}(x) = \Psi^{(+)}(x) + \Psi^{(-)}(x),$$

$$= \sqrt{\frac{2}{\pi}} v \mathcal{N} e^{i(\xi+\vartheta)} \left\{ \left[\Delta \mathscr{C} \left(\zeta^{(+)} \right) + i \Delta \mathscr{S} \left(\zeta^{(+)} \right) \right] + \left[\Delta \mathscr{C} \left(\zeta^{(-)} \right) + i \Delta \mathscr{S} \left(\zeta^{(-)} \right) \right] \right\}.$$
(1.53)

Contudo, chamamos a atenção do leitor pois a Eq.(2.2) não está rigorosamente correta. De acordo H.Yabuki em [54], tal como em seu experimento de fenda dupla, as funções de onda $\Psi(x)$, $\Psi^{(+)}(x) \in \Psi^{(-)}(x)$, pertencentes a diferentes espaços de Hilbert, são tidas como soluções da equação de Schrödinger para diferentes condições de contorno. Desta forma, para corrigir este detalhe deveríamos levar em consideração a contribuição de caminhos exóticos (discutido no Cap.(3), Fig.(14)), como aqueles associados a possibilidade da partícula circular o obstáculo várias vezes antes de atingir a tela. Porém, no presente caso, recorremos a simplicidade, descartando essas contribuições, uma vez que, o peso probabilístico desses eventos é relativamente desprezível (como visto no Cap.(3)). Para uma compreensão mais fina sobre este assunto, recomendamos as referências [56–62], onde os autores examinam as contribuições de caminhos não clássicos em sistemas de fendas dupla e tripla. As populações relativas são expressas por seu módulo ao quadrado [55], da forma

$$\mathcal{P}_{D}(x) = |\Psi_{D}(x)|^{2},$$

$$= \left(\Psi^{(+)}(x) + \Psi^{(-)}(x)\right)^{*} \left(\Psi^{(+)}(x) + \Psi^{(-)}(x)\right),$$

$$= \left|\Psi^{(+)}(x)\right|^{2} + \left|\Psi^{(-)}(x)\right|^{2} + \left(\Psi^{(-)^{*}}\Psi^{(+)} + \Psi^{(+)^{*}}\Psi^{(-)}\right). \quad (1.54)$$

Existe um termo adicional, comparado ao caso de uma fenda simples, chamado de termo de interferência, similar ao que surge na abordagem da difração da luz [51, 53] quando dois ou mais movimentos ondulatórios coincidem no espaço e no tempo, sendo responsável por gerar as curvas de interferência³,

$$\mathscr{I}_{(+,-)}(x) = \left(\Psi^{(-)^{*}}\Psi^{(+)} + \Psi^{(+)^{*}}\Psi^{(-)}\right),$$

$$= \frac{\gamma}{\lambda D \beta} \left(\Delta C(\zeta^{(-)})\Delta C(\zeta^{(+)}) + \Delta S(\zeta^{(+)})\Delta S(\zeta^{(-)})\right).$$
(1.55)

O fator multuplicativo na Eq.(1.55) é comum também nas expressões para cada fenda isoladamente, exceto pelo fator 1/2 (ver Eq.(1.34)),

$$\frac{1}{\lambda (D+L)} = \frac{L}{D} \left(\frac{1}{L \lambda (1 + \frac{L}{D})} \right),$$
$$= \frac{\gamma}{L \lambda \beta},$$
(1.56)

com γ , outro parâmetro geométrico (de proporção) definido por [26],

$$\gamma \equiv \beta - 1. \tag{1.57}$$

Com base nisso, reescremos a Eq.(1.54) em sua forma explícita como

$$\mathcal{P}_{D}(x) = \frac{\gamma}{2 L \lambda \beta} \left[\left(\Delta \mathscr{C} \left(\zeta^{(+)} \right)^{2} + \Delta \mathscr{S} \left(\zeta^{(+)} \right)^{2} \right) + \left(\Delta \mathscr{C} \left(\zeta^{(-)} \right)^{2} + \Delta \mathscr{S} \left(\zeta^{(-)} \right)^{2} \right) + 2 \left(\Delta C(\zeta^{(-)}) \Delta C(\zeta^{(+)}) + \Delta S(\zeta^{(+)}) \Delta S(\zeta^{(-)}) \right) \right], \quad (1.58)$$

e traçamos graficamente o seu comportamento fixando valores para algumas variáveis (β) e flutuando outras ($N_F(a)$):

³ Na Ref. [26] o autor troca no denominador o fator multiplicativo D por L, na Eq. (45).





Figura 6 – Padrões de difração e interferência para fenda dupla. As abscissas são as distâncias dadas em unidades de a (semi comprimento característico da fenda), com as ordenadas representando as populações relativas normalizadas.

Capítulo 1. Aplicação da representação das integrais de trajetória ao problema de difração de elétrons por sistemas de uma e duas fendas 33

Parâmetros físicos, aproximações e interpretações 1.2

Ao observarmos as formas gráficas de difração e interferência (ver Fig.(4) e Fig(6)), geradas pelas equações (1.34) e (1.58), não podemos deixar de notar as diferenças, peculiares a cada regime óptico: Fresnel (campo próximo), Intermediário e Fraunhofer (campo distante). Isso se deve ao comportamento das funções de Fresnel que carregam em seus argumentos os parâmetros $N_F(a) \in \beta$. Essas diferenças são ainda mais pronunciadas quando o número de Fresnel $N_F(a)$ é muito maior ou muito menor que a unidade. Para entender essas diferenças de forma explícita, analisaremos o comportamento assintótico dessas funções para diferentes regimes de $N_F(a)$, como originalmente apresentado em [26], usando as conhecidas formas assintóticas das funções de Fresnel (essas identidades também podem ser verificadas com o auxílio do software Maple[®]):

$$\mathscr{C}(\pm\zeta) \approx \pm \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi\zeta} \sin\left(\frac{\pi\zeta^2}{2}\right), \quad \text{para} \quad \zeta \gg 1,$$
 (1.59a)

$$\mathscr{S}(\pm\zeta) \approx \pm \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi\zeta} \cos\left(\frac{\pi\zeta^2}{2}\right), \quad \text{para} \quad \zeta \gg 1.$$
 (1.59b)

Aproximações para a fenda simples centrada 1.2.1

Considerando o sistema de fenda única, centrada em x = 0, avaliamos as Eqs.(1.40a) e (1.40b) para os seguintes casos: (**I**) $N_F(a) \ll 1$ e (**II**) $N_F(a) \gg 1$.

Limite superior $\rightarrow \zeta_2 = \zeta(x; a) \ll -1$ (x positivo) : (**I-A**)

$$\sqrt{N_F(a)\beta} \left(1 - \frac{x}{a\beta}\right) \ll -1,
-\left(\frac{x}{a\beta} - 1\right) \ll -1/\sqrt{N_F(a)\beta},
\underbrace{\left(\frac{x}{a\beta} - 1\right)}_{mositive} \gg 1/\sqrt{N_F(a)\beta}.$$
(1.60)

positivo
Capítulo 1. Aplicação da representação das integrais de trajetória ao problema de difração de elétrons por sistemas de uma e duas fendas 34

 $(\mathbf{I-B}) \quad Limite \ inferior \rightarrow \zeta_1 = \zeta(x;-a) \gg 1 \ (x \ \mathrm{negativo}) :$

$$\sqrt{N_F(a)\beta} \left(-1 - \frac{x}{a\beta} \right) \gg 1,
- \left(\frac{x}{a\beta} + 1 \right) \gg 1/\sqrt{N_F(a)\beta},
\underbrace{\left(\frac{x}{a\beta} + 1 \right)}_{meanting} \ll -1/\sqrt{N_F(a)\beta}.$$
(1.61)

negativo

Teremos,

$$\zeta(x;a) \ll -1 \ \mathrm{e} \ \zeta(x;-a) \gg 1 \ \Leftrightarrow \ \pm \zeta(x;\mp a) \gg 1 \ \mathrm{com} \ |x| > \beta \ a \,. \tag{1.62}$$

Para entender melhor este tipo de análise, a Ref.[26] recorre a certas condições especiais para avaliar a posição x sobre a tela, isto é, ele examina essas funções através dos fatores de escala: $|x - \beta b| \gg \beta a$ e $|x + \beta b| \gg \beta a$, nos permitindo empregar corretamente as equações (1.59a) e (1.59b) em diferentes níveis de aproximação. Desse modo, encontramos as formas assintóticas das funções de Fresnel presentes na Eq.(1.34):

• $\mathscr{C}(\zeta(x; \pm a))$:

$$\begin{aligned} \mathscr{C}(\zeta(x;\pm a)) &\approx \pm \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi \,\zeta(x;\pm a)} \,\sin\left(\frac{\pi \,\zeta(x;\pm a)^2}{2}\right), \\ &= \pm \frac{1}{2} \mp \frac{1}{\pi \,\sqrt{N_F(a) \,\beta} \left(\frac{x}{\beta \,a} \mp 1\right)} \,\sin\left(\frac{\pi \,N_F(a) \,\beta \left(\frac{x}{\beta \,a} \mp 1\right)^2}{2}\right). \end{aligned} \tag{1.63}$$

$$\Delta \mathscr{C}(\zeta)^{2} = \left(\mathscr{C}(\zeta(x;a)) + \mathscr{C}(\zeta(x;-a))\right)^{2},$$

$$= \left[\frac{1}{\pi\sqrt{N_{F}(a)\beta}} \left(\frac{1}{\left(\frac{x}{\beta a}+1\right)}\sin\left(\frac{\pi N_{F}(a)\beta\left(\frac{x}{\beta a}+1\right)^{2}}{2}\right) - \frac{1}{\left(\frac{x}{\beta a}-1\right)}\sin\left(\frac{\pi N_{F}(a)\beta\left(\frac{x}{\beta a}-1\right)^{2}}{2}\right)\right)\right]^{2}.$$
(1.64)

Capítulo 1. Aplicação da representação das integrais de trajetória ao problema de difração de elétrons por sistemas de uma e duas fendas 35

• $\mathscr{S}(\zeta(x; \pm a))$:

$$\mathcal{S}(\zeta(x;\pm a)) \approx \pm \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi \zeta(x;\pm a)} \cos\left(\frac{\pi \zeta(x;\pm a)^2}{2}\right),$$
$$= \pm \frac{1}{2} \pm \frac{1}{\pi \sqrt{N_F(a)\beta} \left(\frac{x}{\beta a} \mp 1\right)} \cos\left(\frac{\pi N_F(a)\beta \left(\frac{x}{\beta a} \mp 1\right)^2}{2}\right). \quad (1.65)$$

$$\Delta \mathscr{S}(\zeta)^{2} = \left(\mathscr{S}(\zeta(x;a)) + \mathscr{S}(\zeta(x;-a))\right)^{2},$$

$$= \left[\frac{1}{\pi\sqrt{N_{F}(a)\beta}} \left(\frac{1}{\left(\frac{x}{\beta a}-1\right)}\cos\left(\frac{\pi N_{F}(a)\beta\left(\frac{x}{\beta a}-1\right)^{2}}{2}\right) - \frac{1}{\left(\frac{x}{\beta a}+1\right)}\cos\left(\frac{\pi N_{F}(a)\beta\left(\frac{x}{\beta a}+1\right)^{2}}{2}\right)\right)\right]^{2},$$

$$(1.66)$$

com a somas das Eqs. (1.64) e (1.66), dada por

$$\Delta \mathscr{C}(\zeta)^{2} + \Delta \mathscr{S}(\zeta)^{2} = \frac{1}{\pi^{2} N_{F}(a) \beta} \left[\frac{1}{\left(\frac{x}{\beta a} + 1\right)^{2}} + \frac{1}{\left(\frac{x}{\beta a} - 1\right)^{2}} - \frac{2}{\left(\frac{x}{\beta a} + 1\right) \left(\frac{x}{\beta a} - 1\right)} \cos\left(\frac{2\pi N_{F}(a) x}{a}\right) \right],$$
$$= \frac{4}{\pi^{2} N_{F}(a) \beta} \left[\frac{1}{\left(\left(\frac{x}{\beta a}\right)^{2} - 1\right)^{2}} + \frac{1}{\left(\left(\frac{x}{\beta a}\right)^{2} - 1\right)} \sin\left(\frac{\pi N_{F}(a) x}{a}\right)^{2} \right], \quad (1.67)$$

que aplicada a Eq.(1.34) fornece 4

$$\mathcal{P}(x) \approx \frac{\frac{\pi^2 N_F(a)\beta}{2 \lambda D (1 + L/D)}}{\left[\frac{1}{\left(\left(\frac{x}{\beta a} \right)^2 - 1 \right)^2} + \frac{1}{\left(\left(\frac{x}{\beta a} \right)^2 - 1 \right)} \sin \left(\frac{\pi N_F(a) x}{a} \right)^2 \right],$$

$$= \frac{\frac{4}{\pi^2 \frac{2a^2}{\lambda L} \beta}}{2 \lambda D \beta} \left[\frac{a^4}{\left(\left(\frac{x}{\beta} \right)^2 - a^2 \right)^2} + \frac{a^2}{\left(\left(\frac{x}{\beta} \right)^2 - a^2 \right)} \sin \left(\frac{\pi N_F(a) x}{a} \right)^2 \right],$$

$$= \frac{\gamma}{(\pi \beta a)^2} \left[\frac{1}{\left(\left(\frac{x}{\beta a} \right)^2 - 1 \right)^2} + \frac{1}{\left(\left(\frac{x}{\beta a} \right)^2 - 1 \right)} \sin \left(\frac{\pi N_F(a) x}{a} \right)^2 \right]. \quad (1.68)$$

⁴ Chamamos a atenção do leitor ao comparar a Eq.(1.68) com a Eq.(29) da Ref.[26], onde notará que o autor usa um fator multiplicativo 2 na frente da expressão além de a^2 no numerador da primeira parcela.

Capítulo 1. Aplicação da representação das integrais de trajetória ao problema de difração de elétrons por sistemas de uma e duas fendas 36

Ainda é possível extrair outro comportamento assintótico de (1.68), se $\frac{x}{a\beta} \gg 1$, isto é, para grandes distâncias sobre a tela,

г

$$\mathcal{P}(x) \approx \frac{\gamma}{(\pi \beta a)^2} \left[\frac{\left(\frac{\beta q}{x^2}\right)^{2^{n}}}{\left(1 - \left(\frac{\beta q}{x}\right)^2\right)^{q}} + \frac{\left(\frac{\beta a}{x}\right)^2}{\left(1 - \left(\frac{\beta q}{x}\right)^2\right)^{q}} \sin\left(\frac{\pi N_F(a)x}{a}\right)^2\right],$$
$$= \frac{\gamma}{\pi^2} \left(\frac{\sin\left(\pi N_F(a)\frac{x}{a}\right)}{x}\right)^2, \qquad (1.69)$$

sendo esta⁵ uma expressão comum ao regime de Fraunhofer, largamente abordo na literatura [52] análoga a difração de ondas planas eletromagnéticas. É curioso notar que, nesse regime (Fig.(4)-(d)), existe um máximo central que é bastante intenso, da forma

$$\lim_{x \to 0} \mathscr{P}(x) = \frac{\gamma}{\pi^2} \lim_{x \to 0} \left(\frac{\sin\left(\pi N_F(a) \frac{x}{a}\right)}{x} \right)^2,$$

$$= \frac{\gamma}{\pi^2} \left(\frac{\pi N_F(a)}{a} \right)^2,$$

$$= \frac{\gamma N_F(a)^2}{a^2}.$$
 (1.70)

Note que as intensidades dos máximos secundários caem rapidamente com o aumento de |x|.

Observando as ondas difratadas em diferentes ângulos α em relação a direção de incidência (Fig.(7)-(a)) percebe-se que, para certas direções, sua intensidade é nula. Com essas direções fornecidas pela relação

$$2 a \sin(\alpha) = \epsilon \lambda, \quad (\epsilon = \pm 1, \pm 2, \ldots)$$
(1.71)

 $[\]mathbf{5}$ Chamamos a atenção do leitor ao comparar a Eq.(1.69) com a Eq.(30) da Ref.[26], onde notará que o autor usa um fator multiplicativo 2 na frente da expressão.

Capítulo 1. Aplicação da representação das integrais de trajetória ao problema de difração de elétrons por sistemas de uma e duas fendas 37



Figura 7 – Representação gráfica dos raios vetores das ondas (e frentes circulares de onda) provenientes de alguns pontos sobre a fenda simples, que pelo princípio de Huygens, agem como fontes secundárias.

O valor de $\epsilon = 0$ é descartado uma vez que isso corresponde à observação na direção de incidência, o que implica um máximo de iluminação (Eq.(1.70)). A Eq.(1.71) se justifica quando a diferença de caminho entre dois raios quaisquer da Fig.(7-(a)) é

$$r_1 - r_2 = \epsilon \,\lambda/2\,,\tag{1.72}$$

nos dando interferências destrutivas. Da Fig.(7)-(a), para os raios que partem dos pontos $A \in C$ (ponto médio), $r_1 - r_2 = \overline{CF}$, temos

$$a\,\sin\left(\alpha\right) = \epsilon\,\lambda/2\,.\tag{1.73}$$

Consequentemente, para $\epsilon = 1, 3, 5, \ldots$, esses dois raios e todos os demais pares de raios que se originam em pontos distantes entre si de *a* interferem destrutivamente e nenhuma onda é observada na direção α .

Vamos tomar os pontos $A \in B$, separados por a/2 e analisar os casos em que ϵ é par. Então, sendo $r_1 - r_2 = \overline{BG}$,

$$(a/2)\sin(\alpha) = (\epsilon/2)(\lambda/2).$$
(1.74)

Para um inteiro $\epsilon/2$ ímpar, ou $\epsilon = 2, 6, 10, \ldots$, esses dois raios, assim como todos os outros pares de raios cuja origem são pontos separados por a/2, interferem destrutivamente e, novamente, nenhuma onda é observada na direção subentendida pelo ângulo α . O procedimento se estende até que todos os inteiros sejam incluídos. Quando $\alpha = 0$, não haverá nenhuma diferença de fase entre raios que se originam em pontos distintos, e a interferência é construtiva, gerando um máximo de grande intensidade, já discorrido anteriormente.

Os máximos sucessivos ocorrerão quando,

$$\frac{d\mathscr{P}(x)}{dx} = 0 \quad \to \quad \frac{d}{dx} \left(\frac{\sin\left(\pi N_F(a) \frac{x}{a}\right)}{x} \right)^2 = 0, \tag{1.75}$$

nos levando a,

$$\tan\left(\pi N_F(a)\frac{x}{a}\right) = \pi N_F(a)\left(\frac{x}{a}\right).$$
(1.76)

Esta é uma equação do tipo transcendental (sem solução analítica), e suas soluções, são pontos de interseção, são obtidos por meio de uma inspeção gráfica (ver Fig.(8)):



Figura 8 – Solução gráfica da equação transcendental (1.76) para alguns pontos de máximo da Fig.(4)-(d).

Os mínimos de intensidade ocorrem quando,

$$\mathscr{P}(x) = 0 \quad \to \quad \sin\left(\pi N_F(a) \frac{x}{a}\right) = 0.$$
 (1.77)

Logo, esses pontos serão dados por,

$$\pi N_F(a) \frac{x}{a} = \epsilon \pi ,$$

$$x = \epsilon \frac{a}{N_F(a)}.$$
(1.78)

Com base nos argumentos anteriores, construimos a Fig.(9), onde particularizamos as posições dos mínimos adjacentes ao máximo central, com este último apresentando o dobro da largura dos outros.



Figura 9 – Dimensionando a largura do máximo central no regime de Fraunhofer para fenda simples. $\mathcal{O} \rightarrow \text{fonte}, \overline{AE} = 2 a \rightarrow \text{largura da fenda}, 2 \alpha \rightarrow \text{abertura angular da fenda com respeito a posição da fonte, } 2 a/N_F(a) \rightarrow \text{extensão do máximo central.}$

Tomados os raios que partem dos pontos $A \in C$ (ver Fig.(9)) com a Eq.(1.73), a largura angular do primeiro máximo fica⁶:

$$\sin\left(\alpha\right) = \frac{a}{L N_F(a)},\tag{1.79a}$$

$$\alpha \approx \frac{a}{L N_F(a)},$$
(1.79b)

onde é usada a condição de que o comprimento de onda é muito menor que o tamanho característico da fenda, de modo que α é um ângulo pequeno (aproximação paraxial). A Eq.(1.79b), nos dá o poder resolutivo de uma fenda, que foi definido pelo físico inglês Lord Rayleigh [50] como o menor ângulo subtendido por duas ondas incidentes oriundas de duas fontes puntiformes distantes de modo a permitir que suas figuras de difração sejam distinguidas. Nos cabe ainda avaliar a potência irradiada na região do máximo central

⁶ Lembrando que, aqui vale a aproximação: $\tan(\alpha) \simeq \sin(\alpha) \simeq \alpha$. O grau de acurácia dessa aproximação varia dentro do espectro do regime de campo distante.

Capítulo 1. Aplicação da representação das integrais de trajetória ao problema de difração de elétrons por sistemas de uma e duas fendas 40

com,

$$Pot_{max} = \frac{\gamma}{\pi^2} \int_{-a/N_F(a)}^{a/N_F(a)} \left(\frac{\sin\left(\pi N_F(a)\frac{x}{a}\right)}{x}\right)^2 dx \,. \tag{1.80}$$

É interessante notar que ao considerarmos os valores dos parâmetros da Fig.(4)-(d), para efeitos práticos, cerca de 90% da potência irradiada é encontrada nessa região, enquanto o próximo máximo responde por aproximadamente 2% da potencia total e assim sucessivamente. Algumas referências na literatura apontam esta fração em torno de 5% (ver Ref.[52], no contexto da difração de luz), o que claramente vai depender do valor assumido por $N_F(a)$ dentro do espectro deste regime. Além disso, quanto mais estreita a fenda (amenor) maior é a abertura angular do máximo central, e também dos outros máximos, se suas posições angulares forem determinadas como feito anteriormente. Isso indica que os efeitos de difração são maiores e que estamos nos afastando da óptica geométrica. A importância direta disso está na resolução de instrumentos ópticos, como microscópios e telescópios [50].

Ambas as aproximações (1.68) e (1.69) permanecem válidas se $N_F(a)$ for da ordem da unidade (regime intermediário), desde que $x \gg a \beta$. Isso significa que o padrão sobre a tela, distante da posição do máximo central, pode ser bem aproximado pelas Eq.(1.68) e Eq.(1.69) (ver a Fig.(4)-(c)). Em contraste, para $N_F(a) \gg 1$, obtemos outras formas assintóticas particularmente diferentes em certas situações. Vejamos,

(II-A) Limite superior $\rightarrow \zeta_2 = \zeta(x; a) \gg 1$ (x positivo)

$$\frac{\sqrt{N_F(a)\beta}\left(1-\frac{x}{a\beta}\right)}{\sum_{positivo}} \gg 1,$$

$$\frac{\left(1-\frac{x}{a\beta}\right)}{\sum_{positivo}} \gg 1/\sqrt{N_F(a)\beta}, \text{ para: } \frac{|x|}{\beta a} < 1 \Rightarrow |x| < \beta a. (1.81)$$

Capítulo 1. Aplicação da representação das integrais de trajetória ao problema de difração de elétrons por sistemas de uma e duas fendas 41

(II-B) Limite inferior $\rightarrow \zeta_1 = \zeta(x; -a) \ll -1$ (x negativo)

$$\begin{split} \sqrt{N_F(a)\beta} \left(-1 - \frac{x}{a\beta} \right) &\ll -1, \\ \underbrace{\left(\frac{x}{a\beta} + 1 \right)}_{positivo} &\gg 1/\sqrt{N_F(a)\beta}, \text{ para: } \frac{|x|}{\beta a} < 1 \Rightarrow |x| < \beta a. \ (1.82) \end{split}$$

•
$$\mathscr{C}(\zeta(x; \pm a))$$

$$\mathscr{C}(\zeta(x;\pm a)) \approx \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi \zeta(x;\pm a)} \sin\left(\frac{\pi \zeta(x;\pm a)^2}{2}\right),$$

$$= \frac{1}{2} \mp \frac{1}{\pi \sqrt{N_F(a)\beta} \left(\frac{x}{\beta a} \mp 1\right)} \sin\left(\frac{\pi N_F(a)\beta \left(\frac{x}{\beta a} \mp 1\right)^2}{2}\right). \quad (1.83)$$

$$\Delta \mathscr{C}(\zeta)^{2} = \left(\mathscr{C}(\zeta(x;a)) + \mathscr{C}(\zeta(x;-a))\right)^{2},$$

$$= \left[1 + \frac{1}{\pi\sqrt{N_{F}(a)\beta}} \left(\frac{1}{\left(\frac{x}{\beta a}+1\right)} \sin\left(\frac{\pi N_{F}(a)\beta\left(\frac{x}{\beta a}+1\right)^{2}}{2}\right) - \frac{1}{\left(\frac{x}{\beta a}-1\right)} \sin\left(\frac{\pi N_{F}(a)\beta\left(\frac{x}{\beta a}-1\right)^{2}}{2}\right)\right)\right]^{2}.$$
(1.84)

•
$$\mathscr{S}(\zeta(x; \pm a))$$

 $\mathscr{S}(\zeta(x; \pm a)) \approx \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi \zeta(x; \pm a)} \cos\left(\frac{\pi \zeta(x; \pm a)^2}{2}\right),$
 $= \frac{1}{2} \pm \frac{1}{\pi \sqrt{N_F(a)\beta}\left(\frac{x}{\beta a} \mp 1\right)} \cos\left(\frac{\pi N_F(a)\beta\left(\frac{x}{\beta a} \mp 1\right)^2}{2}\right).$ (1.85)

$$\Delta \mathscr{S}(\zeta)^{2} = \left(\mathscr{S}(\zeta(x;a)) + \mathscr{S}(\zeta(x;-a))\right)^{2},$$

$$= \left[1 + \frac{1}{\pi\sqrt{N_{F}(a)\beta}} \left(\frac{1}{\left(\frac{x}{\beta a} - 1\right)}\cos\left(\frac{\pi N_{F}(a)\beta\left(\frac{x}{\beta a} - 1\right)^{2}}{2}\right) - \frac{1}{\left(\frac{x}{\beta a} + 1\right)}\cos\left(\frac{\pi N_{F}(a)\beta\left(\frac{x}{\beta a} + 1\right)^{2}}{2}\right)\right)\right]^{2}.$$
(1.86)

Capítulo 1. Aplicação da representação das integrais de trajetória ao problema de difração de elétrons por sistemas de uma e duas fendas 42

Com o desenvolvimento e posterior soma das equações (1.84) e (1.86), a Eq.(1.34) assume a forma:⁷

$$\mathcal{P}(x) \simeq \frac{\gamma}{\beta} \left\{ \left[\frac{\sqrt{N_F(a)}}{a} + \frac{1}{\pi a \sqrt{\beta}} \left(\frac{(-1)}{\left(1 - \frac{x}{\beta a}\right)} \cos\left(\frac{\pi N_F(a) \beta \left(\frac{x}{\beta a} - 1\right)^2}{2} \right) - \frac{1}{\left(\frac{x}{\beta a} + 1\right)} \times \right. \\ \left. \times \cos\left(\frac{\pi N_F(a) \beta \left(\frac{x}{\beta a} + 1\right)^2}{2} \right) \right) \right]^2 + \left[\frac{\sqrt{N_F(a)}}{a} + \frac{1}{\pi a \sqrt{\beta}} \left(\frac{1}{\left(\frac{x}{\beta a} + 1\right)} \times \right. \\ \left. \times \sin\left(\frac{\pi N_F(a) \beta \left(\frac{x}{\beta a} + 1\right)^2}{2} \right) - \frac{(-1)}{\left(1 - \frac{x}{\beta a}\right)} \sin\left(\frac{\pi N_F(a) \beta \left(\frac{x}{\beta a} - 1\right)^2}{2} \right) \right) \right]^2 \right\}.$$

$$(1.87)$$

Procedimento análogo também é feito para o caso em que $\frac{|x|}{\beta a} > 1 \Rightarrow |x| > \beta a$:

 $(\operatorname{\mathbf{II-C}}) \quad Limite \ superior \rightarrow \zeta_2 = -\zeta(x;a) \gg 1 \ \big(x \ \text{positivo}\big)$

$$-\sqrt{N_F(a)\beta} \left(1 - \frac{x}{a\beta}\right) \gg 1,$$

$$\underbrace{\left(\frac{x}{a\beta} - 1\right)}_{positivo} \gg 1/\sqrt{N_F(a)\beta} , |x| > \beta a.$$
(1.88)

(II-D) Limite inferior $\rightarrow \zeta_1 = \zeta(x; -a) \gg 1$ (x negativo)

$$\sqrt{N_F(a)\beta} \left(-1 - \frac{x}{a\beta} \right) \gg 1, \\
\underbrace{\left(\frac{x}{a\beta} + 1\right)}_{negativo} \ll -1/\sqrt{N_F(a)\beta}, \quad |x| > \beta a. \quad (1.89)$$

que, abreviadamente, escrevemos como:

$$-\zeta(x;a) \gg 1 \ \mathrm{e} \ \zeta(x;-a) \gg 1 \ \Leftrightarrow \ \pm \zeta(x;\mp a) \gg 1 \ \mathrm{com} \ |x| > \beta \ a \,. \tag{1.90}$$

Claramente reconhecemos que os resultados (1.88) e (1.89) nos levam as mesmas expressões para as formas assintóticas das funções de seno (Eq.(1.65)) e cosseno (Eq.(1.63)) de Fresnel

 $[\]overline{^{7}}$ Novamente, o autor na Ref. [26], Eq. (31) coloca um fator 2 no denominador da Eq. (1.87).

encontradas no caso (**I**). Portanto, dadas as devidas manipulações matemáticas, chegamos ao mesmo resultado da Eq.(1.68). O perfil gráfico neste regime revela certa semelhança com a forma geométrica da fenda, com a função (1.87) oscilando rapidamente no intervalo [-a, +a] (com grande amplitude especialmente próximo as bordas) em torno de um valor constante $N_F(a)\gamma/2 a^2 \beta = 1/(\lambda (L + D))$ (ver Eq.(1.44) e figuras (4)-(a) e (5)), enquanto que, para $|x| \gg \beta a$, a função (1.68) cai rapidamente a zero.

1.2.2 Aproximações para a fenda dupla

Em seguida, estendemos a sequência de aproximações ao sistema de fenda dupla. Para tanto, foi necessário estabelecer outras definições para mais alguns números de Fresnel, com o primeiro deles associado ao comprimento característico da parede entre as fendas e o segundo, uma combinação entre este e a Eq.(1.30a):

$$N_F(b) \equiv \frac{2 b^2}{\lambda L} \,, \tag{1.91a}$$

$$N_F \equiv \sqrt{N_F(a) N_F(b)} = \frac{2 a b}{\lambda L}.$$
 (1.91b)

No experimento hipotético considerado em [26] é suposto que $b \gg a$ (fixos, assim como β), isto é, a distância entre fendas é grande quando comparado ao próprio tamanho das mesmas (ver Fig.(6)-(a, b, c, d)). Isso implica em dizer que $N_F \gg 1$, porém, não necessariamente que $N_F(a) \gg 1$. Logo, ficará claro que ambos os parâmetros desempenham papéis distintos.

Para tanto, estabelecemos a forma assintótica da Eq.(1.58) para diferentes valores de $N_F(a)$. Na condição de $N_F(a) \ll 1$ à grandes escalas $|x - \beta b| \gg \beta a$ e $|x + \beta b| \gg \beta a$, teremos:

FENDA DIREITA (+):

Capítulo 1. Aplicação da representação das integrais de trajetória ao problema de difração de elétrons por sistemas de uma e duas fendas 44

• Limite superior $\rightarrow \zeta_2^{(+)} \ll -1$ (x positivo)

$$\sqrt{N_F(a)\beta} \left(\left(\frac{b}{a} + 1\right) - \frac{x}{\beta a} \right) \ll -1,$$

$$\underbrace{\left(\frac{(x - \beta b)}{\beta a} - 1\right)}_{positivo} \gg 1/\sqrt{N_F(a)\beta}.$$
(1.92)

• Limite inferior
$$\rightarrow \zeta_1^{(+)} \ll -1$$
 (x positivo)

$$\sqrt{N_F(a)\beta} \left(\left(\frac{b}{a} - 1 \right) - \frac{x}{\beta a} \right) \ll -1, \\
\underbrace{\left(\frac{(x - \beta b)}{\beta a} + 1 \right)}_{positivo} \gg 1/\sqrt{N_F(a)\beta}.$$
(1.93)

•
$$\mathscr{C}(\zeta_{(2)}^{(+)})$$

 $\mathscr{C}(\zeta_{2}^{(+)}) \approx \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi \zeta_{2}^{(+)}} \sin\left(\frac{\pi \left(\zeta_{2}^{(+)}\right)^{2}}{2}\right),$
 $= \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi \sqrt{N_{F}(a)\beta}\left(\frac{x}{\beta a} - \left(\frac{b}{a} + 1\right)\right)} \sin\left(\frac{\pi N_{F}(a)\beta\left(\frac{x}{\beta a} - \left(\frac{b}{a} + 1\right)\right)^{2}}{2}\right).$ (1.94)
 $\mathscr{C}(\zeta_{1}^{(+)}) \approx \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi \zeta_{1}^{(+)}} \sin\left(\frac{\pi \left(\zeta_{1}^{(+)}\right)^{2}}{2}\right),$
 $= \frac{1}{2} + \frac{(-1)}{\pi \sqrt{N_{F}(a)\beta}\left(\frac{x}{\beta a} - \left(\frac{b}{a} - 1\right)\right)} \sin\left(\frac{\pi N_{F}(a)\beta\left(\frac{x}{\beta a} - \left(\frac{b}{a} - 1\right)\right)^{2}}{2}\right).$ (1.95)
 $\Delta \mathscr{C}(\zeta^{(+)})^{2} = \left(\mathscr{C}(\zeta_{2}^{(+)}) - \mathscr{C}(\zeta_{1}^{(+)})\right)^{2},$
 $= \left[\frac{1}{\pi \sqrt{N_{F}(a)\beta}}\left(\frac{1}{\left(\frac{x}{\beta a} - \left(\frac{b}{a} - 1\right)\right)} \sin\left(\frac{\pi N_{F}(a)\beta\left(\frac{x}{\beta a} - \left(\frac{b}{a} - 1\right)\right)^{2}}{2}\right) - \frac{1}{\left(\frac{x}{\beta a} - \left(\frac{b}{a} + 1\right)\right)^{2}} \times \sin\left(\frac{\pi N_{F}(a)\beta\left(\frac{x}{\beta a} - \left(\frac{b}{a} + 1\right)\right)^{2}}{2}\right)\right)\right]^{2}.$ (1.96)

Capítulo 1. Aplicação da representação das integrais de trajetória ao problema de difração de elétrons por sistemas de uma e duas fendas 45

•
$$\mathscr{S}(\xi_{(2/1)}^{(+)})$$

 $\mathscr{S}(\xi_{2}^{(+)}) \approx \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi \, \xi_{2}^{(+)}} \cos\left(\frac{\pi \, \left(\xi_{2}^{(+)}\right)^{2}}{2}\right),$
 $= \frac{1}{2} - \frac{(-1)}{\pi \, \sqrt{N_{F}(a) \beta\left(\frac{x}{\beta a} - \left(\frac{b}{a} + 1\right)\right)}} \cos\left(\frac{\pi \, N_{F}(a) \beta\left(\frac{x}{\beta a} - \left(\frac{b}{a} + 1\right)\right)^{2}}{2}\right).$ (1.97)
 $\mathscr{S}(\xi_{1}^{(+)}) \approx \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi \, \xi_{1}^{(+)}} \sin\left(\frac{\pi \, \left(\xi_{1}^{(+)}\right)^{2}}{2}\right),$
 $= \frac{1}{2} - \frac{(-1)}{\pi \, \sqrt{N_{F}(a) \beta\left(\frac{x}{\beta a} - \left(\frac{b}{a} - 1\right)\right)}} \cos\left(\frac{\pi \, N_{F}(a) \beta\left(\frac{x}{\beta a} - \left(\frac{b}{a} - 1\right)\right)^{2}}{2}\right).$ (1.98)
 $\Delta \mathscr{S}(\zeta^{(+)})^{2} = \left(\mathscr{S}(\xi_{2}^{(+)}) - \mathscr{S}(\xi_{1}^{(+)})\right)^{2},$
 $= \left[\frac{1}{\pi \, \sqrt{N_{F}(a) \beta\left(\frac{1}{\left(\frac{x}{\beta a} - \left(\frac{b}{a} + 1\right)\right)}\right)} \cos\left(\frac{\pi \, N_{F}(a) \beta\left(\frac{x}{\beta a} - \left(\frac{b}{a} + 1\right)\right)^{2}}{2}\right) - \frac{1}{\left(\frac{x}{\beta a} - \left(\frac{b}{a} - 1\right)\right)} \times \cos\left(\frac{\pi \, N_{F}(a) \beta\left(\frac{x}{\beta a} - \left(\frac{b}{a} - 1\right)\right)^{2}}{2}\right)\right)\right]^{2}.$

$\underline{\textbf{FENDA ESQUERDA}} (-):$

Limite superior $\rightarrow \zeta_2^{(-)} \gg 1$ (x negativo) •

$$\sqrt{N_F(a)\beta} \left(\left(1 - \frac{b}{a} \right) - \frac{x}{\beta a} \right) \gg 1, \\
\underbrace{\left(\frac{(x+\beta b)}{\beta a} - 1 \right)}_{negativo} \ll -1/\sqrt{N_F(a)\beta}.$$
(1.100)

Capítulo 1. Aplicação da representação das integrais de trajetória ao problema de difração de elétrons por sistemas de uma e duas fendas 46

 $\frac{s \text{ de uma e duas fendas}}{\text{Limite inferior} \rightarrow \zeta_1^{(-)} \gg 1 \text{ (x negativo)}}$ •

$$\sqrt{N_F(a)\beta} \left(\left(-\frac{b}{a} - 1 \right) - \frac{x}{\beta a} \right) \gg 1,$$

$$\underbrace{\left(\frac{(x+\beta b)}{\beta a} + 1 \right)}_{negativo} \ll -1/\sqrt{N_F(a)\beta}. \quad (1.101)$$

•
$$\mathscr{C}(\zeta_{(2/1)}^{(-)})$$

 $\mathscr{C}(\zeta_{2}^{(-)}) \approx -\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi \zeta_{2}^{(-)}} \sin\left(\frac{\pi \left(\zeta_{2}^{(-)}\right)^{2}}{2}\right),$
 $= -\frac{1}{2} + \frac{(-1)}{\pi \sqrt{N_{F}(a)\beta} \left(\frac{x}{\beta a} - (1 - \frac{b}{a})\right)} \sin\left(\frac{\pi N_{F}(a)\beta \left(\frac{x}{\beta a} - (1 - \frac{b}{a})\right)^{2}}{2}\right).$
(1.102)

$$\begin{aligned} \mathscr{C}(\zeta_{1}^{(-)}) &\approx -\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi \, \zeta_{1}^{(-)}} \, \sin\!\left(\!\frac{\pi \, \left(\zeta_{1}^{(-)}\right)^{2}}{2}\right)\!, \\ &= -\frac{1}{2} + \frac{(-1)}{\pi \, \sqrt{N_{F}(a) \, \beta} \left(\frac{x}{\beta \, a} - \left(-\frac{b}{a} - 1\right)\right)} \, \sin\!\left(\!\frac{\pi \, N_{F}(a) \, \beta \left(\frac{x}{\beta \, a} - \left(-\frac{b}{a} - 1\right)\right)^{2}}{2}\right)\!, \end{aligned}$$
(1.103)

$$\Delta \mathscr{C}(\zeta^{(-)})^2 = \left(\mathscr{C}(\zeta_2^{(-)}) - \mathscr{C}(\zeta_1^{(-)})\right)^2,$$

$$= \left[\frac{1}{\pi \sqrt{N_F(a)\beta}} \left(\frac{1}{\left(\frac{x}{\beta a} - \left(-\frac{b}{a} - 1\right)\right)} \sin\left(\frac{\pi N_F(a)\beta\left(\frac{x}{\beta a} - \left(-\frac{b}{a} - 1\right)\right)^2}{2}\right) - \frac{1}{\left(\frac{x}{\beta a} - \left(1 - \frac{b}{a}\right)\right)} \times \sin\left(\frac{\pi N_F(a)\beta\left(\frac{x}{\beta a} - \left(1 - \frac{b}{a}\right)\right)^2}{2}\right)\right)\right]^2.$$

$$\times \sin\left(\frac{\pi N_F(a)\beta\left(\frac{x}{\beta a} - \left(1 - \frac{b}{a}\right)\right)^2}{2}\right)\right)\right]^2.$$
(1.104)

Capítulo 1. Aplicação da representação das integrais de trajetória ao problema de difração de elétrons por sistemas de uma e duas fendas 47

•
$$\mathscr{S}(\zeta_{(2/1)}^{(-)})$$

 $\mathscr{S}(\zeta_{2}^{(-)}) \approx -\frac{1}{2} - \frac{1}{\pi \zeta_{2}^{(-)}} \cos\left(\frac{\pi \left(\zeta_{2}^{(-)}\right)^{2}}{2}\right),$
 $= -\frac{1}{2} - \frac{(-1)}{\pi \sqrt{N_{F}(a)\beta} \left(\frac{x}{\beta a} - (1 - \frac{b}{a})\right)} \cos\left(\frac{\pi N_{F}(a)\beta \left(\frac{x}{\beta a} - (1 - \frac{b}{a})\right)^{2}}{2}\right).$
(1.105)

$$\mathscr{S}(\zeta_{1}^{(-)}) \approx -\frac{1}{2} - \frac{1}{\pi \zeta_{1}^{(-)}} \cos\left(\frac{\pi \left(\zeta_{1}^{(-)}\right)^{2}}{2}\right),$$

$$= -\frac{1}{2} - \frac{(-1)}{\pi \sqrt{N_{F}(a)\beta} \left(\frac{x}{\beta a} - \left(-\frac{b}{a} - 1\right)\right)} \cos\left(\frac{\pi N_{F}(a)\beta \left(\frac{x}{\beta a} - \left(-\frac{b}{a} - 1\right)\right)^{2}}{2}\right).$$
(1.106)

$$\Delta \mathscr{S}(\zeta^{(-)})^2 = \left(\mathscr{S}(\zeta_2^{(-)}) - \mathscr{S}(\zeta_1^{(-)})\right)^2,$$

$$= \left[\frac{1}{\pi\sqrt{N_F(a)\beta}} \left(\frac{1}{\left(\frac{x}{\beta a} - \left(1 - \frac{b}{a}\right)\right)} \cos\left(\frac{\pi N_F(a)\beta\left(\frac{x}{\beta a} - \left(1 - \frac{b}{a}\right)\right)^2}{2}\right) - \frac{1}{\left(\frac{x}{\beta a} - \left(-\frac{b}{a} - 1\right)\right)} \times \cos\left(\frac{\pi N_F(a)\beta\left(\frac{x}{\beta a} - \left(-\frac{b}{a} - 1\right)\right)^2}{2}\right)\right)\right]^2.$$

$$\times \cos\left(\frac{\pi N_F(a)\beta\left(\frac{x}{\beta a} - \left(-\frac{b}{a} - 1\right)\right)^2}{2}\right)\right)^2.$$
(1.107)

Empregando os resultados ((1.96), (1.99)) e ((1.104), (1.107)) para as fendas (+) e (-) (ver Fig.(1)), respectivamente, ficamos com a expressão 8 ,

$$\mathscr{P}^{(\pm)}(x) \approx \frac{\gamma}{\pi^2 (x \mp \beta b)^2} \sin^2 \left(\pi N_F \beta \left(1 \mp \frac{x}{\beta b}\right)\right), \qquad (1.108)$$

que é posta em uma forma ainda mais elementar quando $|x| \gg \beta b$ (se $|x| > \lambda L/2 a$),

$$\mathscr{P}^{(\pm)}(x) \approx \frac{\gamma}{\pi^2 x^2} \sin^2\left(\frac{2\pi a}{\lambda L}x\right).$$
 (1.109)

⁸ Ao comparar a Eq.(1.68) com as duas primeiras parcelas da Eq.(46) da Ref.[26], notara-se um fator multiplicativo 2 em seu numerador. Em seguida, o autor o mantém na expressão subsequente, corrigida por nós na Eq.(1.109)

Capítulo 1. Aplicação da representação das integrais de trajetória ao problema de difração de elétrons por sistemas de uma e duas fendas 48

PARCELA DE INTERFERÊNCIA: $(\mathscr{I}_{(+,-)}(x))$

$$\begin{split} \Delta \mathscr{C}(\zeta^{(+)}) \Delta \mathscr{C}(\zeta^{(-)}) &= \frac{(\beta \, a)^2}{\pi^2 \, N_F(a) \, \beta \, (x^2 - (\beta \, b)^2) \left(1 + \frac{\beta \, a}{(x - \beta \, b)}\right) \left(1 - \frac{\beta \, a}{(x + \beta \, b)}\right)}{\times} \\ &\times \left[\sin \left(\frac{\pi \, N_F(a) \, \beta \left(\frac{x}{\beta \, a} - (-\frac{b}{a} - 1)\right)^2}{2} \right) \sin \left(\frac{\pi \, N_F(a) \, \beta \left(\frac{x}{\beta \, a} - (\frac{b}{a} - 1)\right)^2}{2} \right) - \right. \\ &- \left. \sin \left(\frac{\pi \, N_F(a) \, \beta \left(\frac{x}{\beta \, a} - (-\frac{b}{a} - 1)\right)^2}{2} \right) \sin \left(\frac{\pi \, N_F(a) \, \beta \left(\frac{x}{\beta \, a} - (\frac{b}{a} + 1)\right)^2}{2} \right) - \right. \\ &- \left. \sin \left(\frac{\pi \, N_F(a) \, \beta \left(\frac{x}{\beta \, a} - (1 - \frac{b}{a})\right)^2}{2} \right) \sin \left(\frac{\pi \, N_F(a) \, \beta \left(\frac{x}{\beta \, a} - (\frac{b}{a} - 1)\right)^2}{2} \right) + \right. \\ &+ \left. \sin \left(\frac{\pi \, N_F(a) \, \beta \left(\frac{x}{\beta \, a} - (1 - \frac{b}{a})\right)^2}{2} \right) \sin \left(\frac{\pi \, N_F(a) \, \beta \left(\frac{x}{\beta \, a} - (\frac{b}{a} + 1)\right)^2}{2} \right) \right] \right]$$
(1.110)

$$\begin{split} \Delta \mathscr{S}(\zeta^{(+)}) \Delta \mathscr{S}(\zeta^{(-)}) &= \frac{(\beta \, a)^2}{\pi^2 \, N_F(a) \, \beta \, (x^2 - (\beta \, b)^2) \left(1 + \frac{\beta \, a}{(x - \beta \, b)}\right) \left(1 - \frac{\beta \, a}{(x + \beta \, b)}\right)}{\times} \\ &\times \left[\cos\left(\frac{\pi \, N_F(a) \, \beta \left(\frac{x}{\beta \, a} - \left(\frac{b}{a} + 1\right)\right)^2}{2}\right) \cos\left(\frac{\pi \, N_F(a) \, \beta \left(\frac{x}{\beta \, a} - \left(1 - \frac{b}{a}\right)\right)^2}{2}\right) - \right. \\ &\left. - \cos\left(\frac{\pi \, N_F(a) \, \beta \left(\frac{x}{\beta \, a} - \left(1 - \frac{b}{a}\right)\right)^2}{2}\right) \cos\left(\frac{\pi \, N_F(a) \, \beta \left(\frac{x}{\beta \, a} - \left(\frac{b}{a} - 1\right)\right)^2}{2}\right) - \right. \\ &\left. - \cos\left(\frac{\pi \, N_F(a) \, \beta \left(\frac{x}{\beta \, a} - \left(-1 - \frac{b}{a}\right)\right)^2}{2}\right) \cos\left(\frac{\pi \, N_F(a) \, \beta \left(\frac{x}{\beta \, a} - \left(\frac{b}{a} + 1\right)\right)^2}{2}\right) + \right. \\ &\left. + \cos\left(\frac{\pi \, N_F(a) \, \beta \left(\frac{x}{\beta \, a} - \left(-1 - \frac{b}{a}\right)\right)^2}{2}\right) \cos\left(\frac{\pi \, N_F(a) \, \beta \left(\frac{x}{\beta \, a} - \left(\frac{b}{a} - 1\right)\right)^2}{2}\right) \right] \right]$$
(1.111)

Capítulo 1. Aplicação da representação das integrais de trajetória ao problema de difração de elétrons por sistemas de uma e duas fendas 49

Somando as Eq.(1.110) e Eq.(1.111) e substituindo essa soma na Eq.(1.55), temos que⁹

$$\begin{aligned} \mathscr{I}_{(+,-)}(x) &= \frac{\gamma}{\lambda D \beta} \left(\Delta C(\zeta^{(-)}) \Delta C(\zeta^{(+)}) + \Delta S(\zeta^{(+)}) \Delta S(\zeta^{(-)}) \right), \\ &\approx -\frac{\gamma}{2 \pi^2 (x^2 - (\beta b)^2)} \left[\left(\cos \left(2 \pi \left(N_F(a) + N_F \right) \frac{x}{a} \right) - \cos \left(2 \pi N_F \beta \left(1 + \frac{x}{\beta a} \right) \right) \right) + \left(\cos \left(2 \pi \left(N_F(a) - N_F \right) \frac{x}{a} \right) - \cos \left(2 \pi N_F \beta \left(1 - \frac{x}{\beta a} \right) \right) \right) \right]. \end{aligned}$$
(1.112)

Ao observarmos a Fig.(6), notadamente distinguimos duas fases, a fase separada $(N_F \gg 1)$ e a fase mista $(N_F \ll 1)$. Com ambas, podendo se manifestar nos diferentes regimes de Fresnel (Fig.(6)-c e Fig.(6)-e) e Fraunhofer (Fig.(6)-d e Fig.(6)-(b, f)), dependendo do valor de $N_F(a)$. Então, para se observar as duas curvas de difração separadamente, a modulação de franja $(\lambda L/2 a)$ deve ser menor que a distância entre as origens das duas curvas (centradas em $\pm \beta b$), caso contrário, elas estariam misturadas. Assim, essa condição é satisfeita quando $(\lambda L/2 a) < \pm \beta b$, e portanto, $N_F \beta > 1$. Esse panorama se distancia do caso em que $N_F \ll 1$, onde as duas curvas se combinam entre si (*overlap*), acompanhada de uma modulação das interferências (ver Fig.(6)-b).

Neste caso, quando $N_F \ll 1$, se $|x| > \lambda L/2 a$, então $|x| \gg \beta b$, o que nos permite obter uma forma ainda mais aproximada da Eq.(1.112)¹⁰,

$$\mathscr{I}_{(+,-)}(x) \approx \frac{2\gamma}{\pi^2 x^2} \left[2\cos^2\left(\pi N_F(b)\frac{x}{b}\right) - 1 \right] \sin^2\left(\pi N_F(a)\frac{x}{a}\right), \qquad (1.113)$$

com $\cos(\pi N_F \beta) \approx 1$ (já que $N_F \ll 1$). Logo, com a soma das Eq.(1.113) e Eq.(1.109), estando esta precedida por um fator multiplicativo 2 (pois ambas as fendas contribuem com a mesma parcela), ficamos

$$\mathcal{P}_{D}(x) \approx \frac{\gamma}{\pi^{2} x^{2}} \sin^{2} \left(\frac{2\pi a}{\lambda L} x\right) \left[2 + 2\left(2\cos^{2} \left(\frac{2\pi b}{\lambda L} x\right) - 1\right)\right],$$

$$= \frac{4\gamma}{\pi^{2} x^{2}} \sin^{2} \left(\pi N_{F}(a)\frac{x}{a}\right) \cos^{2} \left(\pi N_{F}(b)\frac{x}{b}\right). \qquad (1.114)$$

A Eq.(1.114) é uma expressão típica da Óptica no contexto da difração de luz (ver Ref.[53]. Eq.(10) do Cap. VIII-6). É fácil ver que, ao compararmos as Eq.(1.109) e Eq.(1.114),

⁹ O leitor perceberá que a Eq.(1.112) se apresenta com um fator 1/2, diferente daquela, $3^a e 4^a$ parcelas da Eq.(46), com esta, ainda, com um sinal incorreto precedendo a função cosseno $(- \rightarrow +)$.

¹⁰ Por consequência dos equívocos apontados anteriormente, M.Beau engana-se com a forma da parcela de interferência nesta etapa da aproximação. Logo, arrasta o erro também na Eq.(47) de [26], surgindo com com um fator multiplicativo 2 a mais em relação a Eq.(1.114).

Capítulo 1. Aplicação da representação das integrais de trajetória ao problema de difração de elétrons por sistemas de uma e duas fendas 50

está última exibe uma intensidade quatro vezes maior em relação a fenda simples, já que as fendas irradiam em fase e as amplitudes das ondas difratadas por cada fenda isoladamente se somam, fazendo com que a amplitude dobre num dado ponto e sua intensidade, quadruplique. Além disso, o fator cosseno (curvas de interferência) é modulado pelo fator seno (envelope de difração por fenda simples). Com isso, podemos dizer que a distância entre duas franjas de interferência é da ordem de $(\lambda L/2b)$ enquanto que o mínimo da curva de difração ocorre na ordem de $(\lambda L/2a) \gg (\lambda L/2b)$ (ver Fig.(6)-(a, b), para o primeiro máximo, e Fig.(6)-d). Com relação ao máximo central, seu valor é:

$$\lim_{x \to 0} \mathscr{P}_D(x) = \frac{4\gamma}{\pi^2} \lim_{x \to 0} \left(\frac{\sin^2 \left(\frac{2\pi a}{\lambda L} x \right) \cos^2 \left(\frac{2\pi b}{\lambda L} x \right)}{x^2} \right),$$
$$= \frac{2\gamma N_F(a)^2}{a^2}.$$
(1.115)

Em seguida, consideramos o caso: $\beta N_F \gg 1$ (ainda com $N_F(a) \ll 1$). Se $x - b \beta > -\lambda L/2 a$ (ou $x+b\,\beta<\lambda\,L/2\,a),$ então $(x-b\,\beta)^{-2}\gg(x+b\,\beta)^{-2}$ (e respectivamente, $(x-b\,\beta)^{-2}\ll$ $(x + b\beta)^{-2})$ e então, um dos dois termos torna-se insignificante no domínio. Além disso, em ambos os casos, a parcela de interferência é pequena quando comparada ao termo de difração, desde que $(x - b\beta)^{-2} \gg (x^2 - (b\beta)^2)^{-1}$. A probabilidade total é, portanto, a soma das duas curvas de difração centradas em $\pm b\beta$ moduladas por uma parcela de interferência que oscila rapidamente com uma amplitude relativamente pequena (ver $\operatorname{Fig.}(6)$ -d):

$$\mathscr{P}_{D}(x) \approx \frac{2\gamma}{\pi^{2} (x \mp \beta b)^{2}} \sin^{2} \left(\pi N_{F} \beta \left(1 \mp \frac{x}{\beta b} \right) \right) + \mathscr{O} \left(\frac{1}{(x^{2} - (\beta b)^{2})} \right), \quad |x \pm b \beta| > \frac{\lambda L}{2a}.$$
(1.116)

Em seguida, admitimos o caso em que $N_F(a) \gg 1$. Diferente das situações anteriores, o autor em [26] alega, neste caso, não precisar de condições especiais para a posição x sobre a tela. Dito isto, é possível encontrar expressões semelhantes as Eq.(1.87) e Eq.(1.68) para os termos de $\mathscr{P}^{(\pm)}(x),$ acompanhados das substituições $x\to (x-b\,\beta)$ para a fenda com centro em $b \in x \rightarrow (x + b\beta)$ para a fenda centrada em -b.

Já para aparcela de interferência, aplicadas as Eq.(1.59a) e Eq.(1.59b) na Eq.(1.55), chegamos a duas parcelas, com uma delas sendo um produto de diferenças de funções

cosseno e a outra, um produto de diferenças de funções senoidais. Devido a simetria do problema em relação x = 0, considera-se apenas a parte de x > 0. E novamente, surgem os casos: (i) |x - b| > a e (ii) |x - b| < a.

No primeiro caso, ambas as parcelas decaem com $1/(x^2 - b^2)$ com vários fatores flutuantes como na Eq.(1.112). No segundo caso, $\mathscr{P}^{(+)}(x)$ comporta-se como a Eq.(1.87), porém, com centro em x = b, e com os demais termos desprezíveis. Não há razões, portanto, para escrever explicitamente essas expressões assintóticas, pois essencialmente temos como resultado a soma de duas curvas de difração separadas no regime de Fresnel, isto é, curvas que esboçam as formas geométricas das fendas (ver Fig.(6)-c).

Um comportamento interessante (discutido anteriormente) está no perfil da Fig.(6)d)), onde é fácil perceber que as amplitudes das franjas de interferência são muito pequenas, em comparação a amplitude de difração dentro da faixa $25 \leq |x/a| \leq 75$, ou mesmo ausentes. Isso também é perceptível na Fig.(4-b) de [13]. No entanto, esse fenômeno não é visível na imagem experimental correspondente. Isso se deve, muito provavelmente, à diferenças na desfocagem entre as imagens calculadas e construídas experimentalmente. Vendo as Fig.(3-b) e Fig.(4-b) de [13], pode-se dizer que a existência de tal faixa é bastante sensível ao valor assumido pelo parâmetro $N_F(a)$.

1.2.3 Considerações

Apresentamos brevemente a abordagem de Feynman a MQ, baseada na formulação lagrangiana da mecânica clássica. Observa-se que, nessa abordagem, a transição da mecânica clássica para a MQ ocorre naturalmente, pois se baseia essencialmente em conceitos bem conhecidos dos estudantes do curso de mecânica analítica, não confundindo o comportamento das partículas e ondas. Isso nos poupa questionamentos de natureza metafísica, conduzindo-nos diretamente à solução dos problemas de difração e interferência acima, e, portanto, a uma melhor compreensão da MQ de tais fenômenos singulares.

Encontramos e revisamos explicitamente as expressões para o problema de difração e interferência por fendas, recuperando e discutindo os resultados com base em certos parâmetros, como os números de Fresnel e escalas de distância. Contudo, como as propriedades dos padrões associados a elas não são evidentes a partir das expressões exatas (ver Eq.(1.34) e Eq.(1.58)), o autor em [26] julgou necessário estabelecer as formas assintóticas que descrevessem em detalhes, os sistemas de fendas simples (ver Eqs.(1.68), (1.69) e (1.87)) e dupla (ver Eqs.(1.112), (1.113), (1.114) e (1.116)). Em resumo, teremos:

- Fenda simples:
 - − Se $N_F(a) \ll 1$, tem-se o regime de Fraunhofer, cuja curva de distribuição se assemelha ao caso de difração de ondas planas (ver Eqs.(1.68) e (1.69)), vista na Fig.(4)-d.
 - Se $N_F(a) \gg 1$, tem-se o regime de Fresnel, para o qual a forma da curva de difração se aproxima da forma geométrica da fenda (ver Eq.(1.87)), como visto na Fig.(4-a).
 - Se $N_F(a) \sim 1$, tem -se o regime intermediário, para o qual a distribuição eletrônica se espalha na região central (ver Eq.(1.34) e Figs.(4)-(b, c)) e cujo comportamento, para grandes distâncias, se aproxima daquela exibida no regime de Fraunhofer.
- Fenda dupla:

No aparato de duas fendas de largura 2a, e separadas por uma distância 2b com $b \gg a$, a Ref.[26] aponta o surgimento de distinções similares ao caso anterior, mas há também uma transição entre duas fases que dependem da resolução óptica:

- Se $N_F \ll 1$ temos uma fase mista, isto é, observa-se franjas de interferência moduladas por uma curva de difração por fenda simples (2*a*). Para $N_F(a) \ll 1$, neste caso, no regime de Fraunhofer (ver Eqs.(1.112), (1.113) e (1.114)) visto na Fig.(6)-b.
- − Se $N_F \gg 1$ teremos as fases separadas, havendo formação de franjas de interferência (com pequenas amplitudes) moduladas pelas curvas de difração

correspondentes a ambas as fendas, com cada uma delas centradas, respectivamente em $\pm \beta b$. O aspecto destas curvas dependerá de $N_F(a)$, assemelhando-se ao caso de fenda simples (com três regimes: Fresnel, Fraunhofer e intermediário), ver Eq.(1.116), Fig.(6)-d para $N_F(a) \ll 1$ e Fig.(6)-c para $N_F(a) \gg 1$.

- Se $N_F \sim 1$, observa-se uma separação entre as franjas de interferência, moduladas pela curva de difração por fenda simples correspondente ao regime intermediário, ver Eq.(1.112) e Fig.(6)-a.

As franjas correspondentes à difração distam, uma da outra, de $\lambda L/2 a$ e aquelas para interferência em torno de $\lambda L/2 b$. As propriedades analíticas das expressões assintóticas para fenda dupla não permitem estimar essas distâncias com maior precisão, porém, por analogia com a óptica (luz), elas podem ser consideradas adequadas.

2 Análise da difração de elétrons por um fio delgado

2.1 Introdução

Em um trabalho recente publicado na RBEF [172], os autores afirmam que um feixe luminoso (ondas eletromagnéticas) ao adentrar-se por uma fenda (cujas dimensões são comparáveis com a ordem de grandeza do comprimento de onda do feixe de partículas em questão) em um anteparo, veremos um alargamento desse feixe e sua penetração na região de sombra geométrica, acompanhado do surgimento de franjas de interferência, claras e escuras nas proximidades do limite da sombra, típicas da difração. Este fenômeno, que se estende para um feixe de elétrons, também se manifesta quando a onda incide sobre um obstáculo com dimensões comparáveis ao seu comprimento de onda.

Na referência [173], o leitor encontrará uma interessante discussão sobre a natureza do elétron, assim como em [174], onde são discutidos dois experimentos que lidam, didaticamente, com a natureza ondulatória da luz e da matéria. E por isso, neste ponto, é preciso nos atentarmos, com objetividade matemática, a seguinte questão: o que ocorre quando a dimensão do objeto e muito maior, muito menor ou aproximadamente da mesma ordem de grandeza do comprimento de onda do feixe de partículas ?

Nos propomos a encontrar, ainda com o auxílio da representação das integrais de trajetória [175, 176], os padrões de interferência gerados pela incidência de elétrons (ondas de matéria) sobre um obstáculo delgado não interagente, com e sem efeito de fase Aharonov-Bohm (AB) (Cap.(4)) [4, 25–31, 177]. Isso nos permitirá avaliar as curvas de interferência com base na relação direta entre o comprimento de onda do elétron e o tamanho característico do obstáculo, que ao variar, denunciam os diferentes domínios da Óptica, isto é, ondulatória e geométrica.



Figura 10 – Representação gráfica do aparato com a fonte $\{\mathcal{O}\}$ e os respectivos eixos $\{x, z\}$, do obstáculo (um fio delgado) e da tela de observação. Os segmentos ($\{\mathcal{O}, F^{\pm}\}$ e $\{F^{\pm}, \mathscr{X}\}$) denotam os chamados caminhos clássicos, isto é, aqueles que extremizam a ação, assumidos pelas partículas, sendo $\Psi^{(+)}$ e $\Psi^{(-)}$ as funções de onda emergentes de cada uma dessas regiões $\{F^+, F^-\}$ [177].

Os propagadores livres, para cada etapa do movimento, são os mesmos dados pelas Eq.(1.3) e Eq.(1.4). E para a realidade física deste problema, basta apenas redefinir a função (1.5), recondicionando os limites das funções de onda (1.7) assim como os argumentos das funções de Fresnel, que agora passam a ser:

$$\zeta_1^{(+)} = \sqrt{N_F(b)\beta} \left(1 - \frac{x}{b\beta}\right), \qquad (2.1a)$$

$$\zeta_2^{(-)} = \sqrt{N_F(b)\beta} \left(-1 - \frac{x}{b\beta} \right).$$
(2.1b)

Logo, a função de onda combinada sobre a tela será,

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \, v \, \mathcal{N} \, e^{i\left(\xi+\vartheta\right)} \left[\left(\mathscr{C}\left(\zeta_2^{(-)}\right) - \mathscr{C}\left(\zeta_1^{(+)}\right) + 1 \right) + i \left(\mathscr{S}\left(\zeta_2^{(-)}\right) - \mathscr{S}\left(\zeta_1^{(+)}\right) + 1 \right) \right] \,. \tag{2.2}$$

Com o módulo ao quadrado da Eq.(2.2), temos as intensidades sobre a tela [55], dada pela

soma das contribuições de cada semi fenda isoladamente,

$$\mathcal{P}^{(\pm)}(x) = \Psi^{(\pm)^{*}}(x)\Psi^{(\pm)}(x),$$

$$= \frac{1}{2\lambda(D+L)} \left[\left(\mathscr{C}^{2}\left(\zeta_{\{1^{(+)};2^{(-)}\}}\right) + \mathscr{S}^{2}\left(\zeta_{\{1^{(+)};2^{(-)}\}}\right) \right) \\ \mp \mathscr{C}\left(\zeta_{\{1^{(+)};2^{(-)}\}}\right) \mp \mathscr{S}\left(\zeta_{\{1^{(+)};2^{(-)}\}}\right) + \frac{1}{2} \right], \qquad (2.3)$$

e da parcela de interferência dada por,

$$\mathscr{I}_{(+,-)}(x) = \frac{\rho}{\lambda D \beta} \left[\left(\mathscr{C} \left(\zeta_{2}^{(-)} \right) - \mathscr{C} \left(\zeta_{1}^{(+)} \right) + \frac{1}{2} \right) + \left(\mathscr{S} \left(\zeta_{2}^{(-)} \right) - \mathscr{S} \left(\zeta_{1}^{(+)} \right) + \frac{1}{2} \right) - 2 \left(\mathscr{C} \left(\zeta_{2}^{(-)} \right) \mathscr{C} \left(\zeta_{1}^{(+)} \right) + \mathscr{S} \left(\zeta_{2}^{(-)} \right) \mathscr{C} \left(\zeta_{1}^{(+)} \right) \right) \right].$$

$$(2.4)$$

Com a soma das Eq.(2.3) e Eq.(2.4) na Eq.(1.54), traçamos graficamente os padrões de difração frente ao obstáculo rígido e delgado, fixando valores para alguns parâmetros (como β , por motivos já discutidos na seção(1.1.2), Fig.(5)) e flutuando outros:



Figura 11 – Curvas de interferência geradas pela obstrução parcial da frente de onda de matéria por um fio delgado de tamanho variável. As abscissas são as distâncias dadas em unidades de b, com as ordenadas representando as intensidades [177].

Do princípio de Huygens, todos os pontos pertencentes as regiões abertas (\pm) tornam-se fontes de ondas secundárias (incluindo os pontos que fazem parte dos extremos do obstáculo), emissoras de novas ondas coerentes, cuja amplitude resultante é dada pela Eq.(1.31), quando consideradas cada uma delas isoladamente (ver Fig.(12)).



Figura 12 – Representação gráfica do aparato com a fonte emissora de ondas esféricas (seções circulares no plano xOz). Sobre o eixo do obstáculo, nas regiões de semi fendas, são representados alguns pontos que pelo princípio de Huygens, agem como fontes secundárias [177].

As ondas provenientes desses pontos, ao se propagarem, combinam-se entre si gerando um padrão de interferência sobre a tela cuja forma dependerá da relação entre as dimensões do obstáculo 2b e do comprimento de onda λ do feixe, apenas. Esta relação se traduz matematicamente através do chamado número de Fresnel, definido na Eq.(1.91a)

Quando discutidos os padrões de difração em [25-31] é suposto implicitamente que os objetos interpostos no caminho da onda desempenhavam um papel passivo, isto é, apenas interrompiam uma parte da frente de onda, sem adicionarem por si mesmos nenhuma nova onda. Com tal hipótese, os efeitos de difração observados são devidos, exclusivamente à distorção do movimento ondulatório incidente. Como já discutido na Fig.(12), cada ponto da frente de onda que chega as semi fendas (±) funciona como uma fonte secundária coerente. Dessa forma, a diferença mínima de caminho óptico entre elas (com relação a um ponto \mathscr{X} sobre a tela), está associada as fontes secundárias mais próximas, situadas nas extremidades do obstáculo (A', B'), como pode ser visto na Fig.(13). Logo, se o comprimento de onda incidente é maior que 2b, será também maior que $\Delta r^{(\pm)}$. Considerando que as ondas, nas aberturas, estão inicialmente em fase, para além do anteparo elas vão todas interferir construtivamente (em diferentes níveis, mas só interferem construtivamente porque a diferença de caminho óptico (ou diferença de fase) vai ser sempre bem menor que um comprimento de onda), qualquer que seja o ponto \mathscr{X} .



Figura 13 – Esboço do aparato evidenciando a menor diferença de caminho óptico [177].

Percebe-se claramente nos casos em que $N_F(b) \ll 1$ e $N_F(b) \leq 1$, que as intensidades, apesar de pequenas em alguns trechos, não são nulas. O que significa dizer também que essas regiões são iluminadas, pois a onda foi capaz de contornar todo o objeto e, portanto, adentrando-se por completo para além dos limites geométricos do obstáculo. Neste cenário, dizemos que ocorreu difração total da onda prevalecendo a óptica ondulatória. Porém, a medida que *b* aumenta o aspecto de onda estacionária (nas regiões abertas) se perde, ao mesmo tempo em que há a formação de uma região escura por de trás do objeto, denunciando que a probabilidade de encontrar elétrons ali é nula ou quase nula nas regiões próximas as bordas (ver Fig.(5) e Eq.(1.51)). Assim sendo, a zona de interferência destrutiva vai adquirindo os contornos do objeto denunciando o que chamamos de difração parcial da onda, com predominância da sombra geométrica (no domínio da óptica geométrica) na região imediatamente anterior ao obstáculo, a medida que nos aproximamos do limite $\frac{1}{2b} \rightarrow 0.$

No Cap.(33), seção (6) da Ref.[178], são comparados, qualitativamente, os padrões

de difração (por luz) no regime de Fresnel de um disco opaco com o de uma abertura circular, dizendo que ambos são complementos um do outro. Isto se torna bem evidente ao compararmos a Fig.((11)-{(e),(f)}) com as Figs.({(5),(6)}) da Ref.[179] e, especialmente, a Fig.(3-c) da Ref.[26]. Este fato nos remete ao chamado princípio de Babinet, e para maiores detalhes sobre o assunto indicamos a Ref.[180], onde o autor aborda, teórica e experimentalmente, a difração de ondas gaussianas por um fio delgado sob o ponto de vista da aplicabilidade deste princípio.

3 Estimando a contribuição probabilística associada aos caminhos exóticos

3.1 Introdução

Conforme mencionado no Cap.(1), H. Yabuki em [54], auxiliado pela representação de Feynman, trata o problema experimental de Young em sua versão bidimensional simplificada dependente do tempo, para em seguida, discutir uma generalização direta ao caso 3D. Logo de início, deixa claro que a abordagem empregada (representação de Feynman) é capaz de extrair informações dos mais diversos tipos de trajetórias possíveis (caminhos clássicos e exóticos), como aquela vista na Fig.(14). Porém, é muito improvável que trajetórias dessa natureza se manifestem em funções de onda como na Eq.(1.53). Desse modo, com uma técnica de cálculo peculiar, ele encontra funções de onda que representam verdadeiramente o sistema (salvo algumas aproximações), que o ajudam a estimar a contribuição probabilística desses caminhos na ordem de \hbar^n com $n \ge 1$, o que corrobora de certo modo, em dizer que a Eq.(1.53) é uma boa aproximação da realidade.

A lagrangeana do sistema em questão pode ser escrita como,

$$\mathscr{L} = \frac{m}{2} \left(\dot{x}^2 + \dot{z}^2 \right) - V_{\aleph_{[(-),(+)]}} \,. \tag{3.1}$$

Para estimar a contribuição proveniente de caminhos exóticos, como ilustrado na Fig.(14), faz-se necessário aplicar um método para calcular a amplitude de transição para uma composição de caminhos. Com este propósito, faz-se o uso da seguinte identidade¹:

$$\mathscr{K}(b,a) = \int \mathscr{K}(b,c) \,\mathscr{K}(c,a) \, dx_c \, dz_c \,, \qquad (3.2)$$

 $\operatorname{com} t_c$ fixo no intervalo,

$$t_b > t_c > t_a \,. \tag{3.3}$$

Com a inserção do fator unitário

$$\frac{1}{t_b - t_a} \int_{t_a}^{t_b} dt_c , \qquad (3.4)$$

¹ Vale lembrar que as letras {a, b, c, ···} denotam um conjunto de pontos contidos em regiões onde ocorrem as interações ou mais simplesmente, regiões que consistem nos domínios de integração.

na Eq.(3.2), tem-se

$$\mathscr{K}(b,a) = \frac{1}{t_b - t_a} \int_{t_a}^{t_b} dt_c \int \mathscr{K}(b,c) \mathscr{K}(c,a) dx_c dz_c.$$
(3.5)

Ao calcularmos as contribuições de caminhos que vão de A para B, passando por uma dada região (de pequenas dimensões) C (Fig.(15)-(a)), obtemos a amplitude de transição correspondente restringindo a integral no espaço, Eq.(3.5), ao domínio de C:

•
$$\mathscr{K}(b,a)_{\mathrm{C}} = \frac{1}{t_b - t_a} \int_{t_a}^{t_b} dt_c \int_{(x_c, z_c) \in \mathrm{C}} \mathscr{K}(b,c) \mathscr{K}(c,a) dx_c dz_c.$$
 (3.6)



Figura 14 – Um típico caminho exótico em loop circulando as fendas. $\mathscr{O}=(x_0,0,z_0); F^+ = \{(x_{(+)},0,z_{(+)}) \mid 0 \le z \le D + \delta, b + a \le x \le a - b\}; F^- = \{(x_{(-)},0,z_{(-)}) \mid 0 \le z \le D + \delta, a - b \le x \le b - a\}; \mathscr{X}' = (x_{\mathscr{X}'},0,z_{\mathscr{X}'}), l \text{ comprimento do segmento entre } \mathscr{O} \in F^+ \text{ (ou } F^-); 2 b \text{ distância entre as fendas; } l_1 = \text{ comprimento do segmento entre } F^+ \in \mathscr{X}'; l_2 = \text{ comprimento do segmento entre } F^- \in \mathscr{X}'; L_1 = l + l_1; L_2 = l + l_2.$



Figura 15 – Sucessões de eventos computados em diferentes combinações de caminhos.

Mudando a ordem de integração, a integral sobre t_c pode ser estimada em,

$$I_{1} = \frac{1}{(t_{b} - t_{a})} \int_{t_{a}}^{t_{b}} \mathscr{K}(b,c) \mathscr{K}(c,a) dt_{c},$$

$$= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar}\right)^{2} \frac{1}{T} \int_{0}^{T} \frac{1}{t (T - t)} \exp\left[i \frac{m}{2\hbar} \left(\frac{l_{ca}^{2}}{t} + \frac{l_{bc}^{2}}{T - t}\right)\right] dt, \qquad (3.7)$$

com,

$$T = t_b - t_a, \quad t = t_c - t_a, \quad l_{ca}^2 = (x_c - x_a)^2 + (z_c - z_a)^2, \quad l_{bc}^2 = (x_b - x_c)^2 + (z_b - z_c)^2.$$
(3.8)

Nota-se que a integral (3.7) não é bem definida para $l_{ca} = 0$ ou $l_{bc} = 0$. Quando $l_{ca} \neq 0$ e $l_{bc} \neq 0$, espera-se que a fase do integrando produza oscilações rápidas para t = 0 e T = t levando-nos a uma expressão convergente. Com as mudanças de variáveis,

$$\varrho = 1 - \frac{2t}{T}, \quad \varepsilon = \frac{m \left(l_{ca} + l_{bc} \right)^2}{2 \, \hbar \, T}, \quad \varrho_0 = \frac{l_{bc} - l_{ca}}{l_{bc} + l_{ca}},$$
(3.9)

a Eq.(3.7), passa a ser,

$$I_{1} = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar}\right)^{2} \frac{2}{T^{2}} e^{i\varepsilon} \int_{-1}^{1} \left(1 - \varrho^{2}\right)^{-1} \exp\left[i\varepsilon \frac{(\varrho - \varrho_{0})^{2}}{1 - \varrho^{2}}\right] d\varrho.$$
(3.10)

Como a integral é dominada pela contribuição de seu argumento em torno de $\rho \approx \rho_0$, nos aproximamos da seguinte forma,

$$\begin{split} I_{1} &\approx \left(\frac{m}{2\pi i \hbar}\right)^{2} \frac{2}{T^{2}} e^{i\varepsilon} \int_{-1}^{1} \left(1 - \varrho_{0}^{2}\right)^{-1} \exp\left[i\varepsilon \frac{(\varrho - \varrho_{0})^{2}}{1 - \varrho_{0}^{2}}\right] d\varrho, \\ &\approx \left(\frac{m}{2\pi i \hbar}\right)^{2} \frac{2}{T^{2}} e^{i\varepsilon} \left(1 - \varrho_{0}^{2}\right)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[i\varepsilon \frac{(\varrho - \varrho_{0})^{2}}{1 - \varrho_{0}^{2}}\right] d\varrho, \\ &= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar}\right)^{2} \frac{2}{T^{2}} e^{i\varepsilon} \left(1 - \varrho_{0}^{2}\right)^{-1} \left[\frac{i\pi (1 - \varrho_{0}^{2})}{\varepsilon}\right]^{1/2}, \\ &= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar}\right)^{3/2} T^{-3/2} l_{ca}^{-1/2} l_{bc}^{-1/2} \exp\left[\frac{im (l_{ca} + l_{bc})^{2}}{T}\right]. \end{split}$$
(3.11)

Essa estimativa estará correta até um fator da ordem da unidade para ε não muito pequeno, e a variação da fase de I₁ se manifesta principalmente por $e^{i\varepsilon}$ na Eq.(3.11).

Como é considerado apenas o caso em que a região C é pequena, a Eq.(3.6) pode ser escrita como,

$$\mathscr{K}(b,a)_{\mathcal{C}} \approx |\mathcal{C}| \cdot \mathbf{I}_{1}, \qquad (3.12)$$

onde |C| é a área do domínio de C. Para que a aproximação (3.12) seja válida é necessário que a fase da Eq.(3.11) não varie muito no domínio de C. Veja que ao considerarmos dois pontos c e c', não coincidentes em C, a diferença de fase entre os mesmos é dada por,

$$\Delta \varepsilon = \frac{m}{2\hbar (t_b - t_a)} \left[\left(l'_{bc} + l'_{ca} \right)^2 - \left(l_{bc} + l_{ca} \right)^2 \right], \\ = \frac{m}{2\hbar (t_b - t_a)} \left(l'_{bc} + l'_{ca} + l_{bc} + l_{ca} \right) \left(l'_{bc} - l_{bc} + l'_{ca} - l_{ca} \right), \\ \approx \frac{m}{2\hbar (t_b - t_a)} \left(l_{bc} + l_{ca} \right) \left(\Delta l_{bc} + \Delta l_{ca} \right).$$
(3.13)

Portanto, em (3.6) exige-se que a variação de uma das variáveis de integração bidimensionais (espaciais), que é responsável pelo alongamento ou contração do caminho, seja restringida por,

$$\frac{\hbar \left(t_b - t_a\right)}{m \left(l_{bc} + l_{ca}\right)}.$$
(3.14)

Logo, para que os cálculos sejam consistentes, somos conduzidos a seguinte restrição,

$$|C| \lesssim \mathcal{O}(\hbar). \tag{3.15}$$

Analogamente, o tratamento concedido aos casos pertinentes as Fig.(15)-b e Fig.(15)-c, são:

•
$$\mathscr{K}(b,a)_{\mathrm{DC}} = \frac{1}{t_b - t_a} \int_{t_a}^{t_b} dt_d \int_{(x_d, z_d) \in \mathrm{D}} \mathscr{K}(b,d) \,\mathscr{K}(d,a)_{\mathrm{C}} \, dx_d \, dz_d \,,$$

 $\approx \left(\frac{m}{2\pi \, i \, \hbar}\right)^2 |\mathrm{C}| \, |\mathrm{D}| \, (t_a - t_b)^{-2} \, l_{bd}^{-1/2} \, l_{dc}^{-1/2} \, l_{ca}^{-1/2} \, (l_{bd} + l_{dc} + l_{ca})^{-1/2} \times \exp\left[i \, \frac{m}{2 \, \hbar} \frac{(l_{bd} + l_{dc} + l_{ca})^2}{(t_b - t_a)}\right], \qquad (3.16)$

para,

$$\begin{split} I_{2} &= \frac{1}{t_{b} - t_{a}} \int_{t_{a}}^{t_{b}} \mathscr{K}(b,d) \,\mathscr{K}(d,a)_{C} \, dt_{d} \,, \\ &= \left(\frac{m}{2\pi \, i \, \hbar}\right)^{5/2} \, |\, C \,|\, l_{dc}^{-1/2} \, l_{ca}^{-1/2} \, \frac{1}{T} \, \int_{0}^{T} t^{-3/2} \, (T - t)^{-1} \, \exp\left[i \frac{m}{2 \, \hbar} \left(\frac{(l_{dc} + l_{ca})^{2}}{t} + \frac{l_{bd}^{2}}{T - t}\right)\right] dt \,, \\ &= \left(\frac{m}{2\pi \, i \, \hbar}\right)^{5/2} \, |\, C \,|\, T^{-5/2} \, l_{dc}^{-1/2} \, l_{ca}^{-1/2} \, 2^{3/2} \, e^{i \, \wp} \, \int_{-1}^{1} \, (1 - \varrho)^{-3/2} \, (1 + \varrho)^{-1} \, \exp\left[i \, \wp \, \frac{(\varrho - \varrho_{0})^{2}}{1 - \varrho^{2}}\right] d\varrho. \end{split}$$

$$(3.17)$$

em que

$$T = t_b - t_a, \quad t = t_d - t_a, \quad \varrho_0 = \frac{l_{bd} - l_{dc} - l_{ca}}{l_{dc} + l_{ca} + l_{bd}}, \quad \wp = \frac{m \left(l_{dc} + l_{ca} + l_{bd}\right)^2}{2 \hbar T}, \quad (3.18)$$

que aproximadamente fica,

$$I_{2} \approx \left(\frac{m}{2\pi i \hbar}\right)^{5/2} |C| T^{-5/2} l_{dc}^{-1/2} l_{ca}^{-1/2} 2^{3/2} e^{i \wp} (1-\varrho_{0})^{-3/2} (1+\varrho_{0})^{-1} \left[\frac{i\pi (1-\varrho_{0}^{2})}{\wp}\right]^{1/2},$$

$$\approx \left(\frac{m}{2\pi i \hbar}\right)^{2} |C| T^{-2} l_{dc}^{-1/2} l_{ca}^{-1/2} l_{bd}^{-1/2} (l_{bd} + l_{dc} + l_{ca})^{-1/2} \exp\left[\frac{im (l_{dc} + l_{ca} + l_{bd})^{2}}{2\hbar T}\right],$$
(3.19)

com o fator $\frac{(l_{bd}+l_{dc}+l_{ca})}{(l_{dc}+l_{ca})}$ sendo substituído por 1, uma vez que, na melhor das hipóteses, esta aproximação é consideravelmente boa até um fator de ordem 1.

•
$$\mathscr{K}(b,a)_{\text{EDC}} = \frac{1}{t_b - t_a} \int_{t_a}^{t_b} dt_e \int_{(x_e, z_e) \in \mathbf{E}} \mathscr{K}(b,e) \,\mathscr{K}(e,a)_{\text{DC}} \, dx_e \, dz_e \,,$$

 $\approx \left(\frac{m}{2 \pi \, i \, \hbar}\right)^{5/2} |\,\mathbf{C}\,|\,|\mathbf{D}\,|\,|\mathbf{E}\,|\,(t_a - t_b\,)^{-5/2} \, l_{be}^{-1/2} \, l_{ed}^{-1/2} \, l_{dc}^{-1/2} \, l_{ca}^{-1/2} \, \times$
 $\times (\,l_{be} + l_{ed} + l_{dc} + l_{ca}\,)^{-1} \exp\left[i \, \frac{m}{2 \, \hbar} \frac{(\,l_{be} + l_{ed} + l_{dc} + l_{ca}\,)^2}{(\,t_b - t_a\,)}\right], (3.20)$

para,

$$\begin{split} \mathbf{I}_{3} &= \frac{1}{t_{b} - t_{a}} \int_{t_{a}}^{t_{b}} \mathscr{K}(b,e) \,\mathscr{K}(e,a)_{\mathrm{DC}} \, dt_{e} \,, \\ &= \left(\frac{m}{2\pi \, i \, \hbar}\right)^{3} |\,\mathbf{D}\,|\,\,|\,\mathbf{C}\,|\,\, l_{ed}^{-1/2} \, l_{ca}^{-1/2} \, (l_{ed} + l_{dc} + l_{ca})^{-1/2} \, \frac{1}{T} \times \\ &\times \int_{0}^{T} t^{-2} \, (T - t)^{-1} \, \exp\left[i \frac{m}{2\hbar} \left(\frac{(l_{ed} + l_{dc} + l_{ca})^{2}}{t} + \frac{l_{be}^{2}}{T - t}\right)\right] dt \,, \\ &= \left(\frac{m}{2\pi \, i \, \hbar}\right)^{3} |\,\mathbf{D}\,|\,\,|\,\mathbf{C}\,|\,\,T^{-3} \, l_{ed}^{-1/2} \, l_{dc}^{-1/2} \, l_{ca}^{-1/2} \, (l_{ed} + l_{dc} + l_{ca})^{-1/2} \, 2^{2} \, e^{i\,\mu} \times \\ &\times \int_{-1}^{1} (1 - \varrho)^{-2} \, (1 + \varrho)^{-1} \, \exp\left[i \, \mu \, \frac{(\varrho - \varrho_{0})^{2}}{1 - \varrho^{2}}\right] d\varrho \,, \\ &\approx \left(\frac{m}{2\pi \, i \, \hbar}\right)^{5/2} |\,\mathbf{C}\,|\,\,|\,\mathbf{D}\,|\,\,T^{-5/2} \, l_{be}^{-1/2} \, l_{ed}^{-1/2} \, l_{ca}^{-1/2} \, (l_{be} + l_{ed} + l_{dc} + l_{ca})^{-1} \, e^{i\,\mu} \,, \end{aligned}$$

e tal como em Eq.(3.19), $\frac{(l_{be}+l_{ed}+l_{dc}+l_{ca})}{(l_{ed}+l_{dc}+l_{ca})}=1,$ com

$$T = t_b - t_a, \quad t = t_e - t_a, \quad \varrho_0 = \frac{l_{be} - l_{ed} - l_{dc} - l_{ca}}{l_{be} + l_{ed} + l_{dc} + l_{ca}}, \quad \mu = \frac{m \left(l_{be} + l_{ed} + l_{dc} + l_{ca}\right)^2}{2 \hbar T}.$$
(3.22)

Portanto, o mesmo tipo de restrição encontrado para C (ver Eq.(3.14) e Eq.(3.15)) recai sobre D e E.

3.1.0.1 O termo de interferência não linear

O cálculo do termo de interferência não linear em duas dimensões será obtido com base nos resultados da seção anterior. Inicialmente, vamos considerar a função de onda relativa a passagem do elétron por F^+ e atingindo a tela em X',

$$\Psi_1(T,X') = \mathcal{N} \mathscr{K}'(t = T,X'; t = 0,\mathscr{O})_{F^+}.$$
(3.23)

Note que o prime sobre \mathscr{K} indica que o propagador para a Fig.(14), denotado por $\mathscr{K}'(b,a)$ (que carrega as interações), que por sua vez é uma generalização da Eq.(3.6), deve ser usado em seu cálculo. No entanto, para caminhos que vão de \mathscr{O} à X' via F^+ vale a substituição, em boa aproximação, de $\mathscr{K}'(b,a)$ pelo propagador livre $\mathscr{K}(b,a)$. Fazendo das Eqs.{(3.11),(3.12)} obtemos,

$$\Psi_1(T,X') \approx \left| F^+ \right| \cdot N \left(\frac{m}{2\pi i \hbar} \right)^{3/2} T^{-3/2} l^{-1/2} l_1^{-1/2} \exp\left[\frac{i m L_1^2}{2\hbar T} \right].$$
(3.24)

Já para a função de onda pertinente aos caminhos tipo laço mostrado na Fig.(14) teremos,

$$\Psi'_{1}(T,X') = \mathcal{N} \mathscr{K}'(t = T,X'; t = 0, \mathscr{O})_{\{F^{+}F^{-}F^{+}\}}.$$
(3.25)

Neste caso, como é evidente, não é correto tomar a aproximação de $\mathscr{K}'(b,a)$ por $\mathscr{K}(b,a)$. Na Fig.(16) existem três tipos de caminhos para o propagador livre $\mathscr{K}(b,a)$: os tipos $\{(i),(iii)\}$ representam caminhos que estão complemtamente em um dos lados da linha AB, enquanto o tipo (ii) representa os caminhos que cruzam a linha AB ao menos uma vez. As contribuições de caminhos dos tipos $\{(i),(iii)\}$ são claramente iguais e denotadas por $\mathscr{K}_0(b,a)$ enquanto que as do tipo (ii), chamadas de $\mathscr{K}_1(b,a)$.



Figura 16 – Três tipos de caminhos para o propagador livre. O caminho (a) pertencente ao tipo (i) fornece a mesma contribuição que a dada pelo caminho mostrado em (ii) [54].

Portanto, teremos

$$\mathscr{K}(b,a) = 2 \mathscr{K}_0(b,a) + \mathscr{K}_1(b,a).$$
(3.26)

É suposto que a espessura do plano das fendas seja extremamente pequena (δ é desprezível), então $A \in F^+$ e $B \in F^-$, isto é, AB na Fig.(16) representam este plano delgado. Disso, vem que

$$\mathscr{K}'(b,a) \approx 2\,\mathscr{K}_0(b,a)\,. \tag{3.27}$$

Por consequência, caminhos do tipo (ii) são proibidos. Neste caso, o propagador a ser empregado na Eq.(3.25), para caminhos entre F^+ e F^- é $\mathcal{K}_0(b,a)$. Pois, se usarmos a Eq.(3.27) ao invés desse último, a expressão final de (3.25) também incluirá contribuições provenientes de caminhos mostrados na Fig.(17).



Figura 17 – Três diferentes tipos de caminhos daquele da Fig.(14), passando duas vezes por F^+ ({(b),(c)}) e apenas uma vez por F^- (a) [54].

Contudo, não há meios de se obter $\mathscr{K}_0(b,a)$ de maneira exata. Com certo otimismo, é suposto que no propagador livre (3.26) a contribuição de $\mathscr{K}_1(b,a)$ seja pequena quando comparado com a de $\mathscr{K}_0(b,a)$ e que $\mathscr{K}'(b,a) \sim \mathscr{K}(b,a)$ por (3.26) e (3.27) (a contribuição de caminho tipo (ii)-Fig.(16) é a mesma do caminho (a) do tipo (i), havendo sempre a possibilidade de caminhos mais curtos dessa categoria (i), logo para o espaço-tempo Euclidiano, pode-se dizer ao menos que $\mathscr{K}_0(b,a)$ é razoavelmente maior que $\mathscr{K}_1(b,a)$). Nessas circunstâncias, o propagador cabível em (3.25) é $\mathscr{K}(b,a)$. Assumi-se também que essa aproximação preserve as características essenciais da função de onda $\Psi'_1(T,X')$.

Isto posto, a função de onda $\Psi'_1(T,X')$ que contém caminhos mostrados nas Fig.{(14),(17)}, correção de $\Psi_1(T,X')$, é dada, com o uso da Eq.(3.20), por

$$\Psi_{1}'(T,X') \approx N\left(\frac{m}{2\pi i\hbar}\right)^{5/2} \left|F^{+}\right|^{2} |F^{-}| T^{-5/2} l^{-1/2} l_{1}^{-1/2} (2b)^{-1} L_{1}^{-1} \exp\left[i\frac{m}{2\hbar}\frac{(L_{1}+2(2b))^{2}}{T}\right].$$
(3.28)
Tem-se, portanto, de (3.24) e (3.28),

$$\begin{aligned} \Psi_{1}(T,X') + \Psi_{1}'(T,X') &= \Psi_{1}(T,X') \left(1 + \Delta_{1}(T,X')\right), \\ &\approx \Psi_{1}(T,X') \left\{ 1 + \left(\frac{m}{2\pi i \hbar}\right) \left|F^{+}\right| |F^{-}| T^{-1} L_{1}^{-1} (2b)^{-1} \times \right. \\ &\times \exp\left[i \frac{m}{2\hbar} \frac{(L_{1} + 2(2b))^{2} - L_{1}^{2}}{T}\right] \right\}, \end{aligned}$$
(3.29)

em que

$$\Delta_1(T,X') \approx \left(\frac{m}{2\pi i \hbar}\right) \left|F^+\right| \left|F^-\right| T^{-1} L_1^{-1} (2b)^{-1} \exp\left[i \frac{m}{2\hbar} \frac{2b L_1}{T}\right].$$
(3.30)

Apesar do surgimento de \hbar^{-1} na Eq.(3.30), o termo de correção Δ_1 é da ordem de \hbar , levando em conta a premissa apresentada na Eq.(3.15).

Da mesma forma, obtém-se para a função de onda $\Psi_2(T,X')$ (apenas a fenda F^- aberta) e sua respectiva correção $\Psi'_2(T,X')$,

$$\Psi_2(T,X') + \Psi_2'(T,X') = \Psi_2(T,X') (1 + \Delta_2(T,X')), \qquad (3.31)$$

em que

$$\Delta_2(T,X') \approx \left(\frac{m}{2\pi i \hbar}\right) \left|F^+\right| \left|F^-\right| T^{-1} L_2^{-1} (2b)^{-1} \exp\left[i \frac{m}{2\hbar} \frac{2b L_2}{T}\right].$$
(3.32)

Por conseguinte, a probabilidade total de encontrarmos uma partícula no ponto X' sobre a tela de interferência (Fig.(14)) será de

com

$$\begin{split} \Psi_{1}^{*}(T,X') \,\Psi_{2}(T,X') &\approx \left(\frac{m}{2 \pi \, i \, \hbar}\right)^{3} \left|F^{+}\right| \,|F^{-}| \,|N|^{2} \,T^{-3} \,l_{1}^{-1/2} \,l^{-1} \,l_{2}^{-1/2} \,\exp\left[i \,\frac{m}{2 \, \hbar} \frac{L_{2}^{2} - L_{1}^{2}}{T}\right],\\ &\approx \left(\frac{m}{2 \pi \, i \, \hbar}\right)^{3} \left|F^{+}\right| \,|F^{-}| \,|N|^{2} \,T^{-3} \,l_{1}^{-1/2} \,l^{-1} \,l_{2}^{-1/2} \,\exp\left[i \,\frac{m}{2 \, \hbar} \frac{\Delta L}{T}\right], (3.34) \end{split}$$

е

$$\Delta_{1}^{*}(T,X') + \Delta_{2}(T,X') \approx \left(\frac{m}{2\pi i \hbar}\right) \left|F^{+}\right| |F^{-}| T^{-1} L^{-1} (2b)^{-1} \left[\exp\left[i\frac{2m}{\hbar}\frac{2b L_{2}}{T}\right] - \exp\left[i\frac{2m}{\hbar}\frac{2b L_{1}}{T}\right]\right],$$

$$(3.35)$$

para $L = (L_1 + L_2)/2$, $\Delta L = L_2 - L_1$.

A parcela de interferência principal, Eq.(3.33)-(I), é proporcional a $\cos(m L \Delta L/\hbar T)$ com seu respectivo termo de correção, Eq.(3.33)-(II), proporcional a $\cos(m L \Delta L/\hbar T) \sin(2 m (2 b)L/\hbar T)$ Sendo factível a realização desse experimento bidimensional, a existência desta coreção pode ser detectada em virtude de sua dependência caraterística sobre (2 b) L/T.

3.1.0.2 Considerações

Uma extensão direta de toda análise feita até o momento é o caso 3D, com o propagador livre sendo

$$\mathscr{K}(b,a) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t_b - t_a)}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{i m}{2\hbar} \frac{((x_b - x_a)^2 + (y_b - y_a)^2 + (z_b - z_a)^2)}{(t_b - t_a)}\right).$$
(3.36)

Neste contexto, a correção para a função de onda $\Psi_1(T,X')$ é, aproximadamente

$$\Delta_1(T,X') \approx \left(\frac{m}{2\pi i \hbar}\right)^2 \left|F^+\right| |F^-| T^{-2} (2b)^{-2} \exp\left[i \frac{2m}{\hbar} \frac{2b L_1}{T}\right].$$
(3.37)

com $|F^i|$ sendo o volume da i-ésima fenda e a condição (3.15) sendo também respeitada aqui. Esta restrição vem principalmente do limite de variações ao longo da separação entre as duas fendas, isto é, sobre a integral em x. Contudo, é suposto também que o plano seja bem delgado, fato que limita os domínios de integração sobre o eixo z. Disso, surge outra potência de \hbar na Eq.(3.15) e assim, espera-se que a Eq.(3.37) seja da ordem de \hbar^2 . O termo de interferência surge com uma correção que será proporcional a cos ($2m(2b)L/\hbar T$).

Em [181], os autores materializam a hipótese de Yabuki ao realizarem um experimento que lhes permitia ter pleno domínio sobre as contribuições oriundas de caminhos não clássicos. Para isso, eles contavam com um parâmetro ajustável que regulava, aumentando ou diminuindo, a parcela devida a esses termos.

4.1 Introdução

O trabalho que inaugurou as discussões sobre os efeitos locais dos potenciais eletromagnéticos surgiu em 1948, em uma atividade conjunta de Ehrenberg e Siday [182]. Aproximadamente uma década depois, em 1959, Y. Aharonov e D. Bohm [183], em coautoria no *Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory*, causaram grande surpresa e controvérsia ao demonstrarem que, no cenário da MQ, os potenciais eletromagnéticos poderiam ter consequências observáveis sobre partículas carregadas (como por exemplo, o elétron), ao atravessarem regiões em que os campos elétrico e magnéticos fossem nulos. Observaram assim que, na teoria quântica os potenciais eletromagnéticos possuiam um significado maior do que aquele que lhes eram atribuídos no domínio clássico da Física, já que a função de onda dessas partículas adquiriam uma fase topológica quântica diretamente associada ao potencial vetor. Um tratamento com maior riqueza de detalhes sobre o assunto é dada por estes autores em *Further Considerations on Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory* [184], respondendo a uma série de questionamentos contrários as conclusões mencionadas até então em [183].

No eletromagnetismo clássico, os campos são quantidades mensuráveis e o conceito de força é fundamental, enquanto que seus potenciais são meras construções matemáticas sujeitas a transformações de calibre. Porém, ao tratar a dinâmica de sistemas quânticos, a equação de Schrödinger não envolve forças e campos e é necessariamente expressa em termos dos potenciais vetor e/ou escalar, o que os eleva ao status de quantidades fundamentais. Em [185] os autores introduzem, de maneira descomplicada, os conceitos de alguns eventos de natureza puramente quânticas, como o efeito Aharonov-Bohm (AB).

Geralmente investigado em termos de teorias de calibre abelianas [182–184] com campos eletromagnéticos estacionários, M.Bright e D.Singleton [186] estudam o efeito ABdependente do tempo para campos de calibre não-abelianos [187]. Eles fizeram uso de soluções dependentes do tempo bem conhecidos para as equações de campo de Yang-Mills e investigaram a mudança de fase AB.

A partir de 1960, com o trabalho de Chambers [188] dá-se início a uma série de verificações experimentais do Efeito AB [189–191]. O caso em que é empregado um solenóide, suposto infinito, tem sido largamente explorado em estudos teóricos [27,90,192–194], fato que nos motiva também ao uso desse conceito neste trabalho [177,207]. No entanto, não deixamos de aludir sobre as dificuldades práticas em reproduzir um solenóide infinito, e por consequência disso, o difícil confinamento total do campo magnético em seu interior. A fim de evitar esse impasse, Tonomura *et al.* [195–197], em seus estudos experimentais, empregaram magnetos toroidais que encerraram por completo o campo magnético. Uma análise matemática rigorosa do efeito AB com magnetos toroidais dadas as condições experimentais de Tonomura *et al.* [195–197] é feita por Miguel Ballesteros e Ricardo Weder [198].

Em 1984, Aharonov e Casher [63] investigaram a dinâmica quântica de um dipolo magnético na presença de uma densidade linear de cargas elétricas e verificaram o surgimento de uma segunda fase topológica quântica nesta dinâmica. A esse fenômeno deu-se o nome de Efeito Aharonov-Casher (AC) e reproduções experimentais que o comprovassem foram realizadas com interferômetro de nêutrons [64], interferômetros Ramsey ou Ramsey-Bordé com átomos e moléculas [65–69] e recentemente com interferômetros usando átomos de lítio [70].

He e Mckellar [71] em 1993 e Wilkens [72] de forma independente em 1994, previram a existência de uma terceira fase topológica quântica, adquirida por um dipolo elétrico, quando circulado em torno e em paralelo, a uma densidade linear de cargas (monopolos) magnéticos. Na literatura, essa fase é conhecida por fase He-Mckellar-Wilkens (HMW), que por sua vez é essencialmente a transformação (de Maxwell) dual da fase AC. Uma configuração experimental prática foi proposta por Wei, Han e Wei [73] para verificar essa fase.

Medidas recentes da fase *HMW* também foram realizadas [74,75]. Nos últimos anos, He e Meckellar estudaram uma série de efeitos duais em MQ e Teoria de Campo [76,77]. Ericsson e Sjosqvist [78] estudaram, do ponto de vista da dualidade Aharonov-Casher, um efeito dual dos níveis de Landau e discutiram uma possível aplicação em condensados de Bose-Einstein. Observações de fases topológicas também aparecem quando Anandan [79] fornece um tratamento unificado e totalmente relativístico da interação entre momentos de dipolo elétrico e mgnético de uma partícula e um campo eletromagnético.

Dowling, Williams e Franson [80] propuseram uma descrição unificada de todos os três fenômenos $(AB, AC \in HMW)$ discutindo a relação de dualidade eletromagnética de Maxwell entre as três fases quânticas. Eles estudaram o efeio AB usando as transformações de dualidade de Maxwell e propuseram um quarto fenômeno, o efeito Aharonov-Bohm dual (ABd) e obtendo assim, a fase quântica ABd. Neste cenário, surgem os monopolos magnéticos ou monopolos de Dirac, partículas que se comportam como polos isolados, norte ou sul, que foram objetos de especulação desde os primeiros estudos detalhados sobre campos magnéticos nas primeiras décadas do século XX [81]. C. Furtado e G. Duarte [89], discorrem também o experimento de interferência por fenda dupla para um monopolo magnético na presença de um potencial vetor elétrico, além de demonstrarem o surgimento da fase quântica de Berry nessa dinâmica. Nesse contexto, o problema de espalhamento por uma linha de fluxo também foi discutido resultando na amplitude de espalhamento e seu deslocamento de fase. A ocorrência de cargas magnéticas pontuais na natureza poderia elucidar um do maiores mistérios da Física contemporânea no que diz respeito a quantização da carga elétrica, conforme demonstrou P.A.M.Dirac [33] em 1931. Nesse trabalho, Dirac combina argumentos da MQ e da eletrodinâmica clássica e identifica os potenciais eletromagnéticos consistentes com a existência desses monopolos.

Apesar de nenhuma observação experimental direta até então, análogos de monopolos magnéticos foram encontrados em gelos de spin exóticos [82,83] e em outros sistemas [84–86]. Porém, em 2014, com o trabalho *Observation of Dirac monopoles in a synthetic* magnetic field, M.W.Ray et al. [87] demostraram a criação controlada [88] de monopolos de Dirac por um campo magnético sintético produzido por um condensado spinorial de Bose-Einstein. De acordo com os próprios autores, os resultados obtidos na Ref.[87]

oferecem uma oportunidade sem precedentes para observar e manipular essas entidades quânticas em um ambiente controlado. Desse modo, é importante frisar as manifestações de efeitos topológicos quânticos nas mais diversas áreas da Física [199–205].

Neste capítulo, revisitamos o clássico experimento de fenda dupla e sua versão simplificada (fio delgado) com efeito de fase AB padrão e superposto (fio delgado). Por meio dos parâmetros discutidos em [26], estabelecemos, com maior precisão, as diferentes formas gráficas com deslocamento AB dos padrões de difração para os regimes ópticos de Fresnel, intermediário e Fraunhofer do Cap.(1) e dos padrões nos domínios da óptica, ondulatória e geométrica encontrados no Cap.(2).

Estudamos o comportamento da expressão que leva a distribuição eletrônica sob sucessivas aproximações baseadas no comportamentos assintótico das funções de Fresnel. Neste cenário, ao longo das diferentes etapas aproximativas, descobrimos uma expressão com sentido físico (ver Eq.(4.13)), e a existência de outras expressões matemáticas (Eqs.{(4.15), (4.16)}) que carregavam divergências em seus domínios, corroborando a inexistência de uma expressão (como a Eq.(1.114)), no regime de Fraunhoffer com fase mista, que manifeste as assimetrias AB. Por fim, demonstra-se o surgimento da fase de Berry e sua relação com a fase AB.

4.1.1 O efeito *AB* padrão

Como esboçado na Fig.(18) no interior do cilindro existe campo magnético **B**, constante, paralelo ao eixo do solenóide e perpendicular ao plano da página. Em um primeiro momento, o feixe subdivide-se, recombinando-se num instante posterior em uma região sobre a tela. A função de onda recombinada, associada ao estado final das partículas carregadas, acumula uma fase quântica extra, responsável pelo deslocamento das curvas de interferências observadas no padrão de distribuição das intensidades (Fig. $\{(20),(19)\}$), consequência da presença do potencial vetor.



Figura 18 – Efeito Aharonov-Bohm: o feixe de elétrons se divide e suas metades acumulam uma diferença de fase ao passarem por ambos os lados de um obstáculo que oculta um solenóide suposto infinito de raio desprezível (para efeito representativo, seu esboço é exagerado), com fluxo de campo \mathbf{B} em seu interior.

A lagrangiana do elétron pode ser dada em função do potencial vetor e da lagrangiana na ausência do campo magnético, nomeada por $\mathscr{L}^{(0)}$, tal como [206],

$$\mathscr{L}^{(0)} = \frac{1}{2}m\,\dot{\mathbf{x}}^2 \longrightarrow \mathscr{L}^{(0)} + \frac{q}{c}\dot{\mathbf{x}}\cdot\mathbf{A}\,. \tag{4.1}$$

A correspondente mudança na ação, para qualquer segmento definido do caminho que conecta os pontos de coordenadas espaço-temporal $(\mathbf{x}_{n-1}, t_{n-1})$ a (\mathbf{x}_n, t_n) é dada por,

$$\mathscr{S}^{(0)}(n,n-1) \longrightarrow \mathscr{S}^{(0)}(n,n-1) + \frac{q}{c} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \mathbf{A} \cdot \dot{\mathbf{x}} dt , \qquad (4.2)$$

com esta última integral reparametrizada, sendo escrita como,

$$\int_{t_{n-1}}^{t_n} \mathbf{A} \cdot \left(\frac{d\mathbf{x}}{dt}\right) dt = \int_{\mathbf{x}_{n-1}}^{\mathbf{x}_n} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}, \qquad (4.3)$$

em que $d\mathbf{x}$ é o elemento diferencial de linha por toda a extensão da trajetória, de maneira que, quando considerada a contribuição total entre \mathcal{O} (onde se localiza a fonte emissora) a

Capítulo 4. Efeitos da fase AB sobre os padrões de difração e interferênia de elétrons com a divergência em sua forma assintótica e sua relação com a fase de Berry 77

 \mathscr{X}' (região de interferência), tem-se a seguinte alteração:

$$\prod_{n} \exp\left[\frac{i\mathscr{S}^{(0)}(n,n-1)}{\hbar}\right] \longrightarrow \left\{\prod_{n} \exp\left[\frac{i\mathscr{S}^{(0)}(n,n-1)}{\hbar}\right]\right\} \exp\left(\frac{i\,q}{\hbar c} \int_{\mathscr{O}}^{\mathscr{X}'} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}\right). \quad (4.4)$$

Isso é verdadeiro para um caminho em particular, passando acima ou abaixo do aparato, obstáculo+solenóide. Portanto, ao considerar a contribuição de todos os caminhos possíveis temos o propagador da partícula ao deixar a fonte no ponto \mathcal{O} e atingir a tela de interferência no ponto \mathscr{X}' , representada por,

$$\mathscr{K}(\mathscr{X}';\mathscr{O}) = \int \exp\left[\frac{i\mathscr{S}^{(0)}(\mathscr{O};\mathscr{X}')}{\hbar}\right] \left\{ \exp\left(\frac{i\,q}{\hbar\,c}\int_{\mathscr{O}}^{\mathscr{X}'}\mathbf{A}\cdot d\mathbf{x}\right) \right\} D\left[\mathbf{x}(t)\right].$$
(4.5)

A amplitude de transição ou função de onda total é dada pela soma (superposição) das funções $\Psi_{AB}^{(+)}$ e $\Psi_{AB}^{(-)}$, associados, respectivamente, as contribuições das trajetórias que passam por cima e por baixo do aparato, como na Fig.(18), e assume a forma,

$$\Psi_{AB}(x) = \Psi_{AB}^{(+)}(x) + \Psi_{AB}^{(-)}(x).$$
(4.6)

Em cada parcela que compõe função de onda na tela, há um fator de fase do tipo $\left(\frac{q}{\hbar c} \int_{\mathscr{O}}^{\mathscr{X}'} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}\right)$ que expressa a dependência com o fluxo de campo magnético ϕ_m no interior do solenóide. Na região em que a carga se encontra, o campo, dado por $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ é nulo, e as integrais de linha de \mathbf{A} , acima e abaixo do solenóide, dependem apenas dos pontos terminais $\mathscr{O} \in \mathscr{X}'$ e não de trajetórias específicas quando formado um laço por caminhos diferentes. Assim, as exponenciais que contém \mathbf{A} são independentes das trajetórias sob as quais se está integrando. Com isso, escrevemos as funções de onda provenientes de cada ramo como,

$$\Psi_{AB}^{(\pm)}(x) = \exp\left(\frac{i\,q}{\hbar\,c}\int_{\mathscr{O}}^{\mathscr{X}'}\mathbf{A}\cdot d\mathbf{x}\right)^{(\pm)}\Psi^{(\pm)}(x),$$

$$= e^{i\,\Omega^{(\pm)}}\Psi^{(\pm)}(x). \qquad (4.7)$$

As distribuições eletrônicas, sobre a tela de interferência são dadas pelo quadrado do módulo da amplitude de transição total (Eq.(4.6)),

$$\mathcal{P}_{AB}(x) = \left| \Psi^{(+)}(x) \right|^2 + \left| \Psi^{(-)}(x) \right|^2 + \left(\Psi^{(-)^*} \Psi^{(+)} + \Psi^{(+)^*} \Psi^{(-)} \right) \cos(\Phi_{AB}) + i \left(\Psi^{(-)^*} \Psi^{(+)} - \Psi^{(+)^*} \Psi^{(-)} \right) \sin(\Phi_{AB}) .$$
(4.8)

Em relação a Eq.(1.54), percebe-se que existem duas parcelas de interferência ponderadas por funções trigonométricas que guardam informações acerca do fluxo. A primeira delas, já é conhecida (ver Eq.(1.55)), com a segunda ficando,

$$\mathcal{H}_{(+,-)}(x) = i \left(\Psi^{(-)^*} \Psi^{(+)} - \Psi^{(+)^*} \Psi^{(-)} \right),$$

$$= \frac{\gamma}{\lambda D \beta} \left[\left(\mathscr{S} \left(\zeta_2^{(-)} \right) - \mathscr{C} \left(\zeta_2^{(-)} \right) \right) + \left(\mathscr{S} \left(\zeta_1^{(+)} \right) - \mathscr{C} \left(\zeta_1^{(+)} \right) \right) \right] - 2 \left(\mathscr{C} \left(\zeta_1^{(+)} \right) \mathscr{S} \left(\zeta_2^{(-)} \right) - \mathscr{S} \left(\zeta_1^{(+)} \right) \mathscr{C} \left(\zeta_2^{(-)} \right) \right) \right].$$

$$(4.9)$$

Essas funções emergem da combinação das exponenciais presentes na Eq.(4.7), gerando uma integral de linha fechada do potencial vetor em torno do obstáculo + solenóide (feita no sentido anti horário ou trigonométrico de giro), a qual pode ser identificada como a diferença de fase entre as contribuições dos caminhos acima e abaixo desse sistema chamado de parâmetro de fluxo,

$$\Phi_{AB} = \frac{q}{\hbar c} \left(\int_{\mathscr{O}}^{\mathscr{X}'} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x} + \int_{\mathscr{X}'}^{\mathscr{O}} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x} \right),$$

$$= \left(\frac{q}{\hbar c} \right) \oint_{\mathscr{C}} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x},$$

$$= \frac{q}{\hbar c} \phi_{m}. \qquad (4.10)$$

Em [27] D. Shapiro e W. Henneberger introduzem o efeito de fase AB (padrão) no experimento de fenda dupla (com função de fenda definida por uma função porta, apesar de não coloca-la explicitamente, numa clara melhoria do modelo abordado em [25], onde foi usado funções gaussianas para representar as regiões de fenda) com elétrons na presença de um *whisker*¹. Seus resultados foram obtidos empregando a linguagem *FORTRAN* via método numérico de Romberg na avaliação das funções de Fresnel. Considerações relacionadas ao efeito AB e deslocamentos no padrão de interferência (por fenda dupla) via equação de Schrödinger, também podem ser encontrados em [218].

A partir da Eq.(4.8), traçamos diferentes perfis gráficos de difração, com efeito de fase AB, preservando as sequências dadas nas Fig.(6) e Fig.(11), com o parâmetro de fluxo fixo, para efeito de comparação:

¹ Em inglês significa cerda ou fio de bigode; no presente contexto toma-se por um filamento delgado de ferro magnetizado.



Figura 19 – Padrões de difração e interferência para fenda dupla com efeitos de fase AB em diferentes regimes ópticos. As abscissas são as distâncias dadas em unidades de a (semi comprimento característico da fenda), com as ordenadas representando as populações relativas normalizadas.



Figura 20 – Padrões de difração e interferência por fio delgado com efeitos de fase AB em cenários de predominância das ópticas ondulatória e geométrica. As abscissas são as distâncias dadas em unidades de b (semi comprimento característico do fio), com as ordenadas representando as populações relativas normalizadas [177].

4.1.2 O comportamento assintótico das funções de Fresnel sobre a parcela de interferência $\mathscr{H}_{(+,-)}(x)$.

Neste momento, estendemos os resultados e análises de [26], ao sistema de fenda dupla com efeitos de fase AB, ao examinarmos o comportamento da parcela de interferência $\mathscr{H}_{(+,-)}(x)$ (ver Eq.(4.9)) sob sucessivas aproximações baseadas no comportamento assintótico das funções de Fresnel com $N_F \ll 1$ e $N_F(a) \ll 1$, ou seja, no regime de Frauhoffer com fase mista. Tudo isso para demonstrar que a última etapa aproximativa é incapaz de recuperar uma expressão física com as assimetrias decorrentes da fase AB(sem divergências). Vale ressaltar que, tanto este resultado quanto as formas aproximadas encontradas para esta parcela são desconhecidas até então.

Dito isto, o aspecto inicial da Eq.(4.9) deriva da composição de suas parcelas, dadas em sequência como,

$$\begin{split} \Delta \mathscr{C}(\zeta^{(+)}) \Delta \mathscr{S}(\zeta^{(-)}) &= \frac{1}{\pi^2 N_F(a) \beta} \Biggl[\frac{1}{\left(\frac{x}{\beta a} + (1 - \frac{b}{a})\right) \left(\frac{x}{\beta a} - (1 - \frac{b}{a})\right)} \times \\ &\times \sin \Biggl[\frac{\pi N_F(a) \beta \left(\frac{x}{\beta a} - (\frac{b}{a} - 1)\right)^2}{2} \Biggr] \cos \Biggl[\frac{\pi N_F(a) \beta \left(\frac{x}{\beta a} - (1 - \frac{b}{a})\right)^2}{2} \Biggr] - \\ &- \frac{1}{\left(\frac{x}{\beta a} - (1 - \frac{b}{a})\right) \left(\frac{x}{\beta a} - (1 + \frac{b}{a})\right)} \sin \Biggl[\frac{\pi N_F(a) \beta \left(\frac{x}{\beta a} - (\frac{b}{a} + 1)\right)^2}{2} \Biggr] \times \\ &\times \cos \Biggl[\frac{\pi N_F(a) \beta \left(\frac{x}{\beta a} - (1 - \frac{b}{a})\right)^2}{2} \Biggr] - \frac{1}{\left(\frac{x}{\beta a} + (1 + \frac{b}{a})\right) \left(\frac{x}{\beta a} - (\frac{b}{a} - 1)\right)} \times \\ &\times \sin \Biggl[\frac{\pi N_F(a) \beta \left(\frac{x}{\beta a} - (\frac{b}{a} - 1)\right)^2}{2} \Biggr] \cos \Biggl[\frac{\pi N_F(a) \beta \left(\frac{x}{\beta a} - (-1 - \frac{b}{a})\right)^2}{2} \Biggr] + \\ &+ \frac{1}{\left(\frac{x}{\beta a} + (1 + \frac{b}{a})\right) \left(\frac{x}{\beta a} - (\frac{b}{a} + 1)\right)} \sin \Biggl[\frac{\pi N_F(a) \beta \left(\frac{x}{\beta a} - (\frac{b}{a} + 1)\right)^2}{2} \Biggr] \times \\ &\times \cos \Biggl[\frac{\pi N_F(a) \beta \left(\frac{x}{\beta a} - (-1 - \frac{b}{a})\right)^2}{2} \Biggr] \Biggr]$$
(4.11)

е

$$\begin{split} \Delta \mathscr{S}(\zeta^{(+)}) \Delta \mathscr{C}(\zeta^{(-)}) &= \frac{1}{\pi^2 N_F(a) \beta} \Biggl[\frac{1}{\left(\frac{x}{\beta a} - (1 + \frac{b}{a})\right) \left(\frac{x}{\beta a} + (1 + \frac{b}{a})\right)} \times \\ &\times \sin \Biggl(\frac{\pi N_F(a) \beta \left(\frac{x}{\beta a} - (-\frac{b}{a} - 1)\right)^2}{2} \Biggr) \cos \Biggl(\frac{\pi N_F(a) \beta \left((1 + \frac{b}{a}) - \frac{x}{\beta a}\right)^2}{2} \Biggr) - \\ &- \frac{1}{\left(\frac{x}{\beta a} + (1 + \frac{b}{a})\right) \left(\frac{x}{\beta a} - (\frac{b}{a} - 1)\right)} \sin \Biggl(\frac{\pi N_F(a) \beta \left(\frac{x}{\beta a} - (-\frac{b}{a} - 1)\right)^2}{2} \Biggr) \times \\ &\times \cos \Biggl(\frac{\pi N_F(a) \beta \left(\frac{x}{\beta a} - (\frac{b}{a} - 1)\right)^2}{2} \Biggr) - \frac{1}{\left(\frac{x}{\beta a} - (1 - \frac{b}{a})\right) \left(\frac{x}{\beta a} - (\frac{b}{a} + 1)\right)} \times \\ &\times \sin \Biggl(\frac{\pi N_F(a) \beta \left(\frac{x}{\beta a} - (1 - \frac{b}{a})\right)^2}{2} \Biggr) \cos \Biggl(\frac{\pi N_F(a) \beta \left((1 + \frac{b}{a}) - \frac{x}{\beta a}\right)^2}{2} \Biggr) + \\ &+ \frac{1}{\left(\frac{x}{\beta a} - (1 - \frac{b}{a})\right) \left(\frac{x}{\beta a} - (\frac{b}{a} - 1)\right)} \sin \Biggl(\frac{\pi N_F(a) \beta \left(\frac{x}{\beta a} - (1 - \frac{b}{a})\right)^2}{2} \Biggr) \times \\ &\times \cos \Biggl(\frac{\pi N_F(a) \beta \left(\frac{x}{\beta a} - (\frac{b}{a} - 1)\right)}{2} \Biggr) \Biggr]$$
(4.12)

que somadas, produz

$$\mathcal{H}_{(+,-)}(x) \approx \frac{\gamma}{2\pi^2 \left(x^2 - (\beta b)^2\right)} \left[\sin\left(2\pi N_F(a)\beta\left(1 + \frac{b}{a}\right)\frac{x}{a}\right) + \sin\left(2\pi N_F(a)\beta\left(1 + \frac{b}{a}\right)\frac{b}{a}\right) + \sin\left(2\pi N_F(a)\beta\left(1 - \frac{b}{a}\right)\frac{x}{a}\right) + \sin\left(2\pi N_F(a)\beta\left(1 - \frac{b}{a}\right)\frac{b}{a}\right) \right].$$
(4.13)

Usando $(a \left| x \right|) \gg (\beta \, b)$ e $N_F \, \beta \ll 1$ na equação anterior, ficamos

$$\mathscr{H}_{(+,-)}(x) \approx \frac{2\gamma}{\pi^2 x^2} \left(\sin\left(2\pi N_F \beta\right) \cos\left(2\pi N_F \frac{x}{a}\right) + \sin\left(2\pi N_F \frac{x}{a}\right) \cos\left(2\pi N_F \beta\right) \right) . \tag{4.14}$$

Quando $N_F \ll 1$, $\cos(2\pi N_F \beta) \approx 1$, prontamente, $\sin(2\pi N_F \beta) \approx 0$, que leva a Eq.(4.14) à,

$$\mathscr{H}_{(+,-)}(x) \approx \frac{2\gamma}{\pi^2 x^2} \sin\left(\pi N_F(b)\frac{x}{b}\right) \cos\left(\pi N_F(b)\frac{x}{b}\right) \,. \tag{4.15}$$

Por fim, somamos as Eqs. (4.15), (1.113) e (2(1.69)) na Eq.(4.8),

$$\mathcal{P}_{AB}(x) \approx \frac{2\gamma}{\pi^2 x^2} \sin^2\left(\left(\pi N_F(a)\frac{x}{a}\right) + \frac{2\gamma}{\pi^2 x^2} \sin^2\left(\left(\pi N_F(a)\frac{x}{a}\right) \left(2\cos^2\left(\left(\pi N_F(b)\frac{x}{b}\right) - 1\right)\cos\left(\Phi_{AB}\right)\right) + \frac{2\gamma}{\pi^2 x^2} \sin\left(\left(\pi N_F(b)\frac{x}{b}\right)\cos\left(\left(\pi N_F(b)\frac{x}{b}\right)\sin\left(\Phi_{AB}\right)\right)\right)$$
(4.16)

Capítulo 4. Efeitos da fase AB sobre os padrões de difração e interferênia de elétrons com a divergência em sua forma assintótica e sua relação com a fase de Berry 83

Se $\Phi_{AB} = 0$ (ver Eq.(1.114)) ou $\Phi_{AB} = \pi$, recuperamos o comportamento clássico relacionado aos possíveis padrões de difração no regime de campo distante, como pode ser visto na Fig.(21)-{(a),(b)}. Todavia, quando $x \to 0$, $\lim_{x\to 0} \mathscr{H}_{(+,-)}(x)$ não existe, produzindo um comportamento peculiar na Eq.(4.16) no intervalo $\Phi_{AB} \in [(0,\pi) \cup (\pi,2\pi)]$, como é visto na Fig.(22)-{(a),(b)}:

a) $0 < \Phi_{AB} < \pi$:

$$\lim_{x \to 0^{\pm}} \mathscr{P}_{AB}(x) \to \pm \infty , \qquad (4.17)$$

b) $\pi < \Phi_{AB} < 2\pi$:

$$\lim_{x \to 0^{\pm}} \mathscr{P}_{AB}(x) \to \mp \infty , \qquad (4.18)$$

Capítulo 4. Efeitos da fase AB sobre os padrões de difração e interferênia de elétrons com a divergência em sua forma assintótica e sua relação com a fase de Berry 84



Figura 21 – Curva de difração previstas classicamente no regime de Fraunhoffer para fenda dupla $(\lambda = \gamma = a = 1; b = 5 a e L = 10 a)$ em (a), com a diferença de caminho óptico igual a um múltiplo inteiro par de $\lambda/2$. Em (b), o efeito *AB* promove uma inversão de fase por modificar a dinâmica do elétron e a diferença de caminho óptico passa a ser igual a um múltiplo inteiro ímpar de $\lambda/2$.



Figura 22 – Curvas com divergências geradas a partir da Eq.(4.16) usando os parâmetros: $\lambda = \gamma = a = 1$; b = 5 a e L = 10 a.

4.1.3 O efeito *AB* com fluxos magnéticos superpostos.

Do que foi discutido, Aharonov e Bohm demonstraram que a informação a cerca do fluxo de campo magnético (de módulo constante) através do solenóide podia ser mensurada, bastando para isso conhecer os padrões assimétricos de interferência (observáveis) gerados por um experimento de fenda dupla com elétrons ou alternativamente, por meio do aparato concebido em [177] (como ilustrado na Fig.(18)). No efeito AB padrão, o campo confinado dispõe-se na direção y e pode orientar-se em dois sentidos, ascendente ou descendente, caracterizando um fluxo positivo ou negativo. Kaća Bradonjić e John D. Swain em [31], vão além, assumindo que o solenóide está em uma superposição de dois estados macroscópicos correspondentes a correntes opostas de igual magnitude e que por consequência, geram

campos magnéticos superpostos (com orientações positiva ou negativa) em seu interior. Constataram que a natureza da superposição, isto é, a configuração do estado de fluxo, pode ser aferida através do padrão de interferência sem lhe causar perturbações. Esclarecem ainda que seus esforços foram motivados pelas realizações experimentais das referências [210,211] onde os respectivos autores tratam sobre o assunto empregando anéis supercondutores. Além de sugerirem aplicações na computação quântica [212] para determinar informações sobre os estados de qubits [208–210,213–216] armazenados como superposições de fluxos magnéticos. Situações mais complicadas como superposições de fluxos com diferentes magnitudes (variáveis no tempo), que expressam diferentes quantidades de energia presentes nesses campos, são ignorados, uma vez que cada estado (de fluxo) evoluiria de forma arbitrária.

Nesta perspectiva aplicamos o efeito AB superposto descrito em [31] ao modelo simplificado do Cap.(2), e recorrendo ao número de Fresnel $N_F(b)$, fomos capazes de construir graficamente a configuração das populações relativas em diferentes regimes e combinações de fluxo.

A concepção do sistema parte da elaboração de dois estados de base, um para cada configuração de fluxo com seus respetivos autovalores, do operador Hermitiano (Hamiltoniano). A amplitude de probabilidade de um elétron ser encontrado na posição xsobre a tela de observação, para os estados de fluxo up e down, são:

•
$$Up (\mathbf{A}_{\uparrow})$$
:

$$\Psi_{(\uparrow)}(x) = \exp\left(\frac{i q}{\hbar c} \int_{\mathscr{C}^{+}} \mathbf{A}_{\uparrow} \cdot d\mathbf{x}\right) \Psi^{(+)}(x) + \exp\left(\frac{i q}{\hbar c} \int_{\mathscr{C}^{-}} \mathbf{A}_{\uparrow} \cdot d\mathbf{x}\right) \Psi^{(-)}(x)$$

$$= \exp\left(\frac{i q}{\hbar c} \int_{\mathscr{C}^{+}} \mathbf{A}_{\uparrow} \cdot d\mathbf{x}\right) \left\{ \Psi^{(+)}(x) + \Psi^{(-)}(x) \exp\left[\frac{i q}{\hbar c} \left(\int_{\mathscr{C}^{-}} \mathbf{A}_{\uparrow} \cdot d\mathbf{x} - \int_{\mathscr{C}^{+}} \mathbf{A}_{\uparrow} \cdot d\mathbf{x}\right)\right] \right\}$$

$$= \exp\left(\frac{i q}{\hbar c} \int_{\mathscr{C}^{+}} \mathbf{A}_{\uparrow} \cdot d\mathbf{x}\right) \left(\Psi^{(+)}(x) + \Psi^{(-)}(x) e^{i |\Phi_{AB}|}\right)$$

$$(4.19)$$

• Down
$$(\mathbf{A}_{\downarrow})$$
:

$$\Psi_{(\downarrow)}(x) = \exp\left(\frac{i\,q}{\hbar\,c}\int_{\mathscr{C}^{+}}\mathbf{A}_{\downarrow}\cdot d\mathbf{x}\right)\left(\Psi^{(+)}(x) + \Psi^{(-)}(x)\,e^{-i\,|\Phi_{AB}|}\right)$$
(4.20)

O vetor de estado que descreve comportamento da partícula sujeita ao fluxo superposto é escrito como combinação linear de (4.19) e (4.20), cujas amplitudes, coeficientes que

acompanham cada estado de base, são dados por $\cos(\theta/2)$ (up) e $\sin(\theta/2)$ (down),

$$|\Psi(x)\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |\Psi_{(\uparrow)}(x)\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |\Psi_{(\downarrow)}(x)\rangle \ e^{i\,\omega} , \qquad (4.21)$$

com $0 \le \theta \le \pi$ e $0 \le \omega \le 2\pi$. Prontamente, Kaća e John encontram a distribuição de probabilidades sobre a tela,

$$\begin{split} \langle \Psi(x) | \Psi(x) \rangle &= \cos^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \langle \Psi_{(\uparrow)}(x) | \Psi_{(\uparrow)}(x) \rangle + \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \langle \Psi_{(\downarrow)}(x) | \Psi_{(\downarrow)}(x) \rangle + \cos \left(\frac{\theta}{2} \right) \sin \left(\frac{\theta}{2} \right) \times \\ &\times \left(e^{i\,\omega} \left\langle \Psi_{(\uparrow)}(x) | \Psi_{(\downarrow)}(x) \right\rangle + e^{-i\,\omega} \left\langle \Psi_{(\downarrow)}(x) | \Psi_{(\uparrow)}(x) \right\rangle \right) , \\ &= \left| \Psi^{(+)}(x) \right|^2 + \left| \Psi^{(-)}(x) \right|^2 + \cos \left(\Phi_{AB} \right) \left(\Psi^{(+)*}(x) \Psi^{(-)}(x) + \Psi^{(+)}(x) \Psi^{(-)*}(x) \right) + \\ &+ i \, \sin \left(\Phi_{AB} \right) \left(\cos^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) - \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \right) \left(\Psi^{(+)*}(x) \Psi^{(-)}(x) - \Psi^{(+)}(x) \Psi^{(-)*}(x) \right) (4.22) \end{split}$$

Sendo o estados (4.19) e (4.20) ortogonais, os termos cruzados na Eq.(4.22) se anulam, eliminando a dependência sobre o potencial vetor e permanecendo invariante por transformações de calibre [217]. Kaća e John comentam que o padrão de interferência na tela não é capaz de revelar nada sobre ω , a fase relativa entre os estados up e down do campo magnético. No entanto, ressaltam que notavelmente, algumas informações ainda estão disponíveis, escrevendo a Eq.(4.22) em função dos parâmetros (Φ_{AB}, θ) e dos termos de interferência definidos em (1.55) e (4.9),

$$\mathcal{P}_{AB_{(A/D)}}(x,\Phi_{AB},\theta) = \left|\Psi^{(+)}(x)\right|^2 + \left|\Psi^{(-)}(x)\right|^2 + \cos\left(\Phi_{AB}\right)\mathscr{I}_{(+,-)}(x) - \sin\left(\Phi_{AB}\right)\mathscr{H}_{(+,-)}(x) \times \left(\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) - \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\right).$$

$$(4.23)$$

Tal como em [27], Kaća e John caracterizam a Eq.(4.23) como uma densidade de probabilidade, pois do que foi discutido anteriormente, há uma inconsistência dimensional que desqualifica esta nomeação (a distribuição fica dividida por unidade de comprimento ao quadrado, em desacordo com sua representação gráfica, aqui adimensional, ver Fig.(23) e Fig.(24)), como é exposto em [26] por Beau, porém, isso não acarreta nenhum prejuízo em suas conclusões.

Quando $\Phi_{AB} = 0$, ambas as Eq.(4.8) e Eq.(4.23) se reduzem a Eq.(1.58), como era de se esperar. No entanto, o que de fato chama a atenção para a Eq.(4.23) são os casos pertinentes a certos valores de θ :

Capítulo 4. Efeitos da fase AB sobre os padrões de difração e interferênia de elétrons com a divergência em sua forma assintótica e sua relação com a fase de Berry 87

- I Efeito AB padrão (ver Fig.(23)- $\{(a),(b)\}$ e Fig.(24)- $\{(a),(b)\}$)
 - a) Para $\theta = 0$, o fluxo orienta-se o sentido positivo (up) do eixo y.
 - b) Para $\theta = \pi$, o fluxo orienta-se o sentido negativo (down) do eixo y.
- II Para $\theta = \pi/2$, tem-se um estado superposto, up e down, de fluxo (ver Fig.(23)-{(c)} e Fig.(24)-{(c)})

Selecionamos dois casos, $N_F(b) = 0.01$ (predominância da óptica ondulatória) e $N_F(b) = 10$ (predominância da óptica geométrica), e construímos os respectivos gráficos das distribuições eletrônicas em função dos parâmetros livres (Φ_{AB}, θ):



Figura 23 – Distribuição eletrônica geradas por interferência com efeitos de fase AB no domínio da óptica ondulatória na região imediatamente atrás do obstáculo com $N_F(b) = 0.01$. As abscissas são as distâncias dadas em unidades de b, com as ordenadas dadas por: $0 \le \Phi_{AB} \le 2\pi$ para {(a),(b),(c)} e $0 \le \theta \le \pi$ para {(d),(e),(f)}.



Figura 24 – Distribuição eletrônica geradas por interferência com efeitos de fase AB no domínio da óptica geométrica na região imediatamente anterior ao obstáculo com $N_F(b) = 10$. As abscissas são as distâncias dadas em unidades de b, com as ordenadas dadas por: $0 \le \Phi_{AB} \le 2\pi$ para $\{(a), (b), (c)\} \in 0 \le \theta \le \pi$ para $\{(d), (e), (f)\}$.

Os autores da Ref.[31] salientam que a informação sobre o estado do fluxo superposto é aferida do padrão de interferência sem colapsa-lo (a princípio, em um dos estados up ou down), uma vez que este é formado pelas contribuições coletivas das dispersões eletrônicas repetidas em grande número. Os padrões da Fig.(24) se assemelham enormemente com as Fig.(3) e Fig.(4) de [31], uma vez que os autores lidam com o problema de fenda dupla com valores dos parâmetros físicos no regime de Fraunhofer com fases separadas, isto é, $N_F \gg 1$, que leva a formação de uma região onde a óptica ondulatória pouco se destaca. Nota-se a diferença pronunciada entre os estados superpostos nas Fig.(23)-{(c)} da Fig.(24)-{(c)}.

4.2 A Fase de Berry e sua Relação com o efeito AB

4.2.1 Introdução

A fase de Berry, ou fase geométrica de Berry, foi inicialmente proposta por Michel V. Berry em seu trabalho *Quantal phase factors accompanying adiabatic changes* [90]. Ele mostrou, por meio da equação de Schrödinger que, se o sistema é preparado em um autoestado não degenerado do hamiltoniano após uma evolução adiabática cíclica, ele retornará ao seu estado original acompanhado por um fator de fase formado por duas parcelas: uma contribuição dinâmica associada a energia do sistema e uma contribuição geométrica associada ao caminho traçado no espaço de parâmetros.

Barry Simon publica, em 1983, o artigo intitulado *"Holonomy, the Quantum Adia*batic Theorem, and Berry's Phase" [91], onde fornece uma interpretação geométrica mais abrangente da fase de Berry. No ano seguinte, Frank Wilczek e A. Zee [92] generalizaram a construção de Berry e Simon ao aplicarem a teoria a sistemas quânticos com espectro de energia degenerado. Partindo dessa abordagem, eles demonstraram o surgimento de uma estrutura de calibre não-abeliana. Na Ref. [93] A. Zee analisa a estrutura de calibre não-abeliana em ressonância nuclear quadrupolar.

Y. Aharonov e J. Anandan [94] propuseram uma forma mais geral para a fase geométrica de Berry chamada de fase Aharonov-Anandan, removendo a condição adiabática de qualquer evolução cíclica de um sistema quântico. Joseph Samuel e Rajendra

Bhandari [95] deram outro passo importante na teoria aplicando a fase geométrica de Berry a evoluções não cíclicas e não unitárias de sistemas quânticos, baseados no trabalho de Pancharatman [96] sobre interferência de luz polarizada. Na Ref. [97] J. Anandan estende a teoria à fases geométricas não-adiabáticas e não-abelianas.

Uma interessante abordagem pedagógica da fase de Berry é feita por Barry R. Holstein [98]. Nesta referência Holstein trata o clássico exemplo de uma partícula de spin 1/2 sujeita a um campo magnético externo. Ele também faz um comentário a respeito dos efeitos de interferência produzidos pela diferença entre fases geométricas bem como a interessante consequência da fase de Berry permitir de forma simples a compreensão do argumento de P.A.M. Dirac [33] sobre a quantização da carga elétrica em função da carga do monopolo magnético. Estudos das fases geométricas em sistemas quânticos dados como uma mistura estatística de estados quando abordados via matriz densidade, podem ser encontradas nas Ref. [99–104].

De acordo com os autores L.G. Yang *et al.* [105], *"fases geométricas foram propostas como mecanismos típicos de sistemas quânticos para preservar a memória de suas evoluções no espaço de Hilbert"*. A proposta deste capítulo é fazer uma breve revisão da teoria usualmente empregada no tratamento da fase geométrica de Berry, expondo algumas de suas propriedades tal como fez M.V. Berry, usando o formalismo diferencial por meio da representação de Schrödinger.

4.2.2 Rudimentos matemáticos

Considere inicialmente dois subsistemas que interagem entre si de forma fenomenológica via um conjunto de parâmetros chamados de *campos clássicos* $\mathbf{R}(t)$. Esses parâmetros são funções reais, vistos como coordenadas tridimensionais do espaço de parâmetros \mathcal{M} , que traduzem uma espécie de acoplamento entre o subsistema em estudo e, nas palavras do próprio M.V.Berry, o resto do universo [90] (o outro subsistema). Dessa forma, ao sujeitar o sistema estudado a uma evolução adiabática cíclica, o operador hamiltoniano $\mathbf{H}(\mathbf{R}(t))$, que depende parametricamente dos campos clássicos, se modificará em uma escala de tempo com período característico T. Fenômenos quânticos associados a transições

eletrônicas ocorrerão num intervalo de tempo comparativamente muito menor, com um período característico τ , isto é, $\tau \ll T$. Em sistemas verdadeiramente isolados, a fase de Berry não se manifesta e, portanto, efeitos observáveis surgirão apenas na forma familiar, como valores próprios de algum operador hermitiano.

Dessa forma, supondo que o espectro de $\mathbf{H}(\mathbf{R}(t))$ seja discreto para todo $\mathbf{R}(t) \in \mathcal{M}$, com autovalores de energia $E_n(\mathbf{R}(t))$ não degenerados, a dinâmica do sistema quântico é dada pela equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \mathbf{H}(\mathbf{R}(t)) |\psi(t)\rangle ,$$
 (4.24)

em que o vetor $|\psi(t)\rangle$ representa o estado do sistema. Devido à dependência temporal do operador hamiltoniano $\mathbf{H}(\mathbf{R}(t))$, para cada instante existirá um conjunto completo de autoestados { $|\varphi_n; \mathbf{R}(t)\rangle$ }, sendo válidas as seguintes relações,

• Relação de completeza

$$\sum_{n} |\varphi_{n}; \mathbf{R}(t)\rangle \langle \varphi_{n}; \mathbf{R}(t)| = \mathbf{1}, \qquad (4.25)$$

sendo 1 o operador unitário, e o operador de projeção sobre cada autosubespaço-n sendo definido por:

$$\mathbf{P}_{n}(\mathbf{R}(t)) \equiv |\varphi_{n}; \mathbf{R}(t)\rangle \langle \varphi_{n}; \mathbf{R}(t)| . \qquad (4.26)$$

• Relação de ortonormalidade

$$\langle \varphi_n; \mathbf{R}(t) | \varphi_m; \mathbf{R}(t) \rangle = \delta_{n,m},$$
 (4.27)

onde a delta de Kroneker $\delta_{n,m}$ é definida por,

$$\delta_{n,m} \equiv \begin{cases} 1 & \text{se } n = m \\ 0 & \text{se } n \neq m \,. \end{cases}$$

$$(4.28)$$

Para cada instante, o operador hamiltoniano revela um espectro de energia (não degenerado), tal como pode ser verificado por meio da equação de autovalor

$$\mathbf{H}(\mathbf{R}(t)) |\varphi_n; \mathbf{R}(t)\rangle = E_n(\mathbf{R}(t)) |\varphi_n; \mathbf{R}(t)\rangle .$$
(4.29)

A solução geral da Eq. (4.24), em um instante qualquer, pode ser expressa por

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n} a_n(t) e^{i\theta_n(t)} |\varphi_n; \mathbf{R}(t)\rangle$$
, (4.30)

com a condição de normalização dada por: $\sum_n |a_n(t)|^2 = 1,$ para n > 1. O fator de fase dinâmica é definido por

$$\theta_n(t) \equiv -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(\mathbf{R}(t')) \,\mathrm{d}t' \,, \tag{4.31}$$

usualmente conhecido por acompanhar a evolução temporal de qualquer estado estacionário e claramente dependente do intervalo de tempo necessário a esta evolução. Durante o processo de demonstração da fase geométrica, alguns autores [22, 106, 107], por questões didáticas, preferem explicitar o fator de fase dinâmica na solução geral. Porém, isso não afeta sua dedução, de tal modo que a solução geral também pode ser dada sob uma forma condensada, omitindo a dependência com o fator de fase dinâmica no próprio coeficiente, isto é

$$b_n(t) = a_n(t)e^{i\theta_n(t)}, \qquad (4.32)$$

em que $b_n(0) = a_n(0)$ e assim, a Eq. (4.30) fica

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n} b_{n}(t) |\varphi_{n}; \mathbf{R}(t)\rangle$$
 (4.33)

Neste trabalho, empregaremos ambas as representações. Ao tomar a forma (4.33), encontraremos a representação matricial dada na Ref. [108], usada no tratamento das fases dinâmica, adiabática e não-adiabática de um sistema expresso como uma superposição de autoestados. Com a forma (4.30), seguiremos incrementando de maneira sequencial os passos dados nas Refs. [22, 106, 107]. Partindo dessa condição, substitui-se a Eq. (4.30) na Eq. (4.24) obtendo

$$i\hbar \sum_{n} \left[\dot{a}_{n}(t) |\varphi_{n}; \mathbf{R}(t)\rangle + i\dot{\theta}_{n}(t)a_{n}(t) |\varphi_{n}; \mathbf{R}(t)\rangle + a_{n}(t)\frac{d}{dt} |\varphi_{n}; \mathbf{R}(t)\rangle \right] e^{i\theta_{n}(t)} = \sum_{n} E_{n}(\mathbf{R}(t))a_{n}(t)e^{i\theta_{n}(t)} |\varphi_{n}; \mathbf{R}(t)\rangle , \qquad (4.34)$$

identificando o valor da derivada temporal do fator de fase dinâmica $\theta_n(t)$ por

$$\dot{\theta}_n(t) = -\frac{1}{\hbar} E_n(\mathbf{R}(t)), \qquad (4.35)$$

e empregando-o na Eq. (4.34), com as devidas simplificações matemáticas, encontra-se

$$\sum_{n} \dot{a}_{n}(t) e^{i\theta_{n}(t)} \left| \varphi_{n}; \mathbf{R}(t) \right\rangle = -\sum_{n} a_{n}(t) e^{i\theta_{n}(t)} \frac{d}{dt} \left| \varphi_{n}; \mathbf{R}(t) \right\rangle .$$
(4.36)

Fazendo o produto interno dos dois lados da Eq. (4.36) com o vetor $\langle \varphi_m; \mathbf{R}(t) |$,

$$\sum_{n} \dot{a}_{n}(t) e^{i\theta_{n}(t)} \langle \varphi_{m}; \mathbf{R}(t) | \varphi_{n}; \mathbf{R}(t) \rangle = -\sum_{n} a_{n}(t) \langle \varphi_{m}; \mathbf{R}(t) | (\frac{d}{dt} | \varphi_{n}; \mathbf{R}(t) \rangle), \qquad (4.37)$$

observa-se no somatório que existem termos para os quais m = n e também $m \neq n$, dessa forma, com o auxílio da definição (4.28), a equação que rege a dinâmica dos coeficientes $a_n(t)$ fica,

$$\dot{a}_m(t) = -a_m(t) \langle \varphi_m; \mathbf{R}(t) | (\frac{d}{dt} | \varphi_m; \mathbf{R}(t) \rangle) - \sum_{\substack{n, \\ n \neq m}} a_n(t) \langle \varphi_m; \mathbf{R}(t) | (\frac{d}{dt} | \varphi_n; \mathbf{R}(t) \rangle) \ e^{i(\theta_n(t) - \theta_m(t))} .$$

$$(4.38)$$

As variações no tempo dos autoestados de energia estão associados à mudanças adiabáticas do operador hamiltoniano, que é governada pelo conjunto de campos clássicos $\mathbf{R}(t)$. Portanto, os coeficientes $\langle \varphi_m; \mathbf{R}(t) | (\frac{d}{dt} | \varphi_n; \mathbf{R}(t) \rangle$) do lado direito da equação (4.38) serão reescritos em termos da taxa de variação temporal do operador hamiltoniano. Essa relação é encontrada tomando a derivada temporal da equação de autovalor (4.29),

$$\frac{d}{dt} \left(\mathbf{H}(\mathbf{R}(t)) \left| \varphi_n; \mathbf{R}(t) \right\rangle \right) = \frac{d}{dt} \left(E_n(\mathbf{R}(t)) \left| \varphi_n; \mathbf{R}(t) \right\rangle \right) , \qquad (4.39)$$

levando a

$$\left(\dot{\mathbf{H}}(\mathbf{R}(t))|\varphi_{n};\mathbf{R}(t)\rangle+\mathbf{H}(\mathbf{R}(t))\left(\frac{d}{dt}|\varphi_{n};\mathbf{R}(t)\rangle\right)\right)=\left(\dot{E}_{n}(\mathbf{R}(t))|\varphi_{n};\mathbf{R}\rangle\left(t\right)+E_{n}(\mathbf{R}(t))\left(\frac{d}{dt}|\varphi_{n};\mathbf{R}(t)\rangle\right)\right).$$
(4.40)

Projetando ambos os lados da equação (4.40) sobre o vetor $\langle \varphi_m; \mathbf{R}(t) |$, como também, utilizando a definição (4.28) e explorando a condição de hermiticidade do operador hamiltoniano, $\mathbf{H}^{\dagger}(\mathbf{R}(t)) = \mathbf{H}(\mathbf{R}(t))$, verificamos que

$$\langle \varphi_m; \mathbf{R}(t) | (\frac{d}{dt} | \varphi_n; \mathbf{R}(t) \rangle) = \frac{\langle \varphi_m; \mathbf{R}(t) | \dot{\mathbf{H}}(\mathbf{R}(t)) | \varphi_n; \mathbf{R}(t) \rangle}{(E_n(\mathbf{R}(t)) - E_m(\mathbf{R}(t)))} \quad (m \neq n).$$
(4.41)

Capítulo 4. Efeitos da fase AB sobre os padrões de difração e interferênia de elétrons com a divergência em sua forma assintótica e sua relação com a fase de Berry 95

Reescrevendo a equação (4.38) em função desse resultado, encontra-se um conjunto de equações diferenciais acopladas para os coeficientes $a_m(t)$,

$$\dot{a}_{m}(t) = -a_{m}(t)\langle\varphi_{m}; \mathbf{R}(t)|(\frac{d}{dt}|\varphi_{m}; \mathbf{R}(t)\rangle) - \\ -\sum_{\substack{n, \\ n \neq m}} a_{n}(t) \frac{\langle\varphi_{m}; \mathbf{R}(t)|\dot{\mathbf{H}}(\mathbf{R}(t))|\varphi_{n}; \mathbf{R}(t)\rangle}{(E_{n}(\mathbf{R}(t) - E_{m}(\mathbf{R}(t)))} e^{-i(\theta_{m}(t) - \theta_{n}(t))}.$$
(4.42)

A segunda parcela da Eq. (4.42) demonstra que, com o passar do tempo, estados com $m \neq n$ se acoplarão devido a dependência temporal de $\mathbf{H}(\mathbf{R}(t))$. De acordo com o Teorema Adiabático (ver capítulo (A), seção (A.0.0.1)), no limite $T \rightarrow \infty$ os termos do somatório para os quais $(n \neq m)$, podem ser desprezados em relação aos termos $\langle \varphi_m; \mathbf{R}(t) | (\frac{d}{dt} | \varphi_m; \mathbf{R}(t) \rangle)$, reduzindo a Eq. (4.42) a uma equação diferencial desacoplada:

$$\dot{a}_m(t) = -a_m(t)\langle\varphi_m; \mathbf{R}(t)|(\frac{d}{dt}|\varphi_m; \mathbf{R}(t)\rangle), \qquad (4.43)$$

cuja solução geral é

$$a_m(t) = a_m(0)e^{i\gamma_m(t)},$$
 (4.44)

com os coeficientes $a_m(0)$ sendo determinados por condições iniciais. O fator de fase $\gamma_m(t)$ é então definido por

$$\gamma_m(t) \equiv i \int_0^t \langle \varphi_m; \mathbf{R}(t') | (\frac{d}{dt'} | \varphi_m; \mathbf{R}(t') \rangle) dt', \qquad (4.45)$$

e designado por fase geométrica adiabática. Dessa forma, o vetor de estado que descreve o sistema em (4.30) pode agora ser reescrito de forma mais conveniente (para m = n),

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n} a_{n}(0) \ e^{i(\gamma_{n}(t) + \theta_{n}(t))} \ |\varphi_{n}; \mathbf{R}(t)\rangle \ . \tag{4.46}$$

Ao projetar o vetor de estado $|\psi(t)\rangle$ sobre o vetor $\langle \mathbf{x}|$ do espaço das coordenadas de posição, o sistema será representado por uma função de onda,

$$\psi(\mathbf{x},t) = \sum_{n} a_n(0) \ e^{i(\gamma_n(t) + \theta_n(t))} \ \varphi_n(\mathbf{x},t) \,. \tag{4.47}$$

Em 1988, Samuel e Bhandari [95] generalizaram o conceito de fases geométricas a evoluções não-cíclicas, despertando o interesse de muitos autores teóricos [109–114] e experimentais [115] na investigação dessa nova abordagem.

Na Ref. [114], os autores mostram que a diferença entre fases geométricas adiabáticas deve ser levada em consideração uma vez que, efeitos de interferências são produzidos quando calculados os valores médios de certas quantidades físicas em estados que são uma superposição de autoestados instantâneos de energia. A linearidade da equação de Schrödinger permite escrever a evolução de um estado arbitrário como uma superposição linear dos autoestados com amplitudes cujas magnitudes e fases são como prescritas até o momento. Em geral, diferentes autoestados de energia adquirem diferentes fases geométricas e durante o cálculo dessas quantidades físicas, efeitos de interferência podem ser experimentalmente medidos, demonstrando uma importante forma de checar a linearidade de sistemas quânticos [116]. Uma dessas quantidades físicas é a densidade de probabilidade de encontrar uma partícula entre as posições $\mathbf{x} \in \mathbf{x} + d\mathbf{x}$ em um instante qualquer:

$$|\psi(\mathbf{x};t)|^{2} = \sum_{n} |a_{n}|^{2} |\varphi_{n}(\mathbf{x};t)|^{2} + \sum_{\substack{n,l\\n\neq l}} a_{n} a_{l}^{*} e^{i[\gamma_{n}(t) - \gamma_{l}(t)]} e^{it[\langle E_{n}(t) \rangle - \langle E_{l}(t) \rangle]} \varphi_{n}(\mathbf{x};t) \varphi_{l}^{*}(\mathbf{x};t),$$
(4.48)

em que $\psi(\mathbf{x}; t) = \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle$ e $\varphi_n(\mathbf{x}; t) = \langle \mathbf{x} | \varphi_n(t) \rangle$, e sendo $\langle E_n(t) \rangle$ a energia média durante o intervalo de tempo t definida por:

$$\langle E_n(t) \rangle \equiv -\frac{1}{t\hbar} \int_0^t E_n(t') dt'. \qquad (4.49)$$

Outra quantidade física relevante é o valor esperado de um operador hermitiano \mathcal{O} associado a um observável o,

$$\langle \mathcal{O} \rangle_{t} = \langle \psi(t) | \mathcal{O} | \psi(t) \rangle$$

$$= \sum_{n} |a_{n}|^{2} \langle \varphi_{n}; t | \mathcal{O} | \varphi_{n}; t \rangle + \sum_{\substack{n,l \\ n \neq l}} a_{n} a_{l}^{*} e^{i[\gamma_{n}(t) - \gamma_{l}(t)]} e^{it[\langle E_{n}(t) \rangle - \langle E_{l}(t) \rangle]} \langle \varphi_{n}; t | \mathcal{O} | \varphi_{l}; t \rangle .$$

$$(4.50)$$

Os efeitos de interferência são produzidos entre os termos da segunda parcela do lado direito de ambas equações, (4.48) e (4.50), e claramente dependem da diferença entre as fases geométricas.

Na Ref. [114] os autores também comentam que esses efeitos de interferência se mostram como uma característica fundamental da linearidade da mecânica quântica. No instante inicial, t = 0, o vetor de estado fica

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{n} a_{n}(0) |\varphi_{n}; \mathbf{R}(0)\rangle ; \qquad (4.51)$$

ao impor a condição $a_n(0) = \delta_{n,m}$, este mesmo vetor de estado passa a ser

$$|\psi(0)\rangle = |\varphi_m; \mathbf{R}(0)\rangle , \qquad (4.52)$$

e sua respectiva evolução temporal, dadas as condições adiabáticas, torna-se

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\gamma_m(t)}e^{i\theta_m(t)} |\varphi_m; \mathbf{R}(t)\rangle . \qquad (4.53)$$

O vetor de estado $|\psi(t)\rangle$, na Eq. (4.53), é um dos resutados encontrados por Berry na Ref.[90]. Isso vem do fato de que quando um sistema quântico é preparado inicialmente no *m*-ésimo autoestado do hamiltoniano $\mathbf{H}(0)$, isto é, $|\varphi_m; \mathbf{R}(0)\rangle$, após evoluir adiabaticamente, o sistema será encontrado no *m*-ésimo autoestado do hamiltoniano $\mathbf{H}(t)$, $|\varphi_m; \mathbf{R}(t)\rangle$, acompanhado por um fator de fase extra, um registro de sua evolução no espaço de parâmetros.

A natureza do integrando da fase de Berry pode ser investigada, uma vez considerada a condição de norma unitária dos autoestados instantâneos,

$$\langle \varphi_n; \mathbf{R}(t) | \varphi_n; \mathbf{R}(t) \rangle = 1.$$

De sua derivada total em relação ao tempo,

$$\frac{d}{dt}\left(\langle\varphi_n;\mathbf{R}(t)|\varphi_n;\mathbf{R}(t)\rangle\right) = 0,$$

fica,

$$\left(\frac{d}{dt}\left\langle\varphi_{n};\mathbf{R}(t)\right|\right)\left|\varphi_{n};\mathbf{R}(t)\right\rangle = -\left\langle\varphi_{n};\mathbf{R}(t)\right|\left(\frac{d}{dt}\left|\varphi_{n};\mathbf{R}(t)\right\rangle\right).$$
(4.54)

Observando que

$$\left(\left(\frac{d}{dt}\left\langle\varphi_{n};\mathbf{R}(t)\right|\right)|\varphi_{n};\mathbf{R}(t)\right\rangle\right) = \left(\left\langle\varphi_{n};\mathbf{R}(t)\left(\frac{d}{dt}|\varphi_{n};\mathbf{R}(t)\right\rangle\right)^{*},$$
(4.55)

nota-se que,

$$\Re e \left(\langle \varphi_n; \mathbf{R} | (\frac{d}{dt} | \varphi_n; \mathbf{R} \rangle) \right) = 0.$$
(4.56)

Verifica-se desse modo que o integrando da Eq.(4.45) é um número imaginário puro, e assim, conclui-se que $\gamma_m(t)$ é uma função real.

Como a dependência temporal dos autoestados instantâneos $|\varphi_n; \mathbf{R}(t)\rangle$ se faz através dos campos clássicos, isso nos permite fazer

$$\frac{d}{dt} |\varphi_m; \mathbf{R}(t)\rangle = \sum_i \frac{\partial}{\partial R_i} |\varphi_m; \mathbf{R}\rangle \frac{dR_i}{dt}, \qquad (4.57)$$

$$= (\nabla_{\mathbf{R}} | \varphi_m; \mathbf{R} \rangle) \cdot \frac{d\mathbf{R}}{dt}, \qquad (4.58)$$

e o integrando da fase $\gamma_m(t)$, na equação (4.45), pode agora ser expresso como:

$$\langle \varphi_m; \mathbf{R}(t') | (\frac{d}{dt'} | \varphi_m; \mathbf{R}(t') \rangle) dt' = \langle \varphi_m; \mathbf{R} | (\mathbf{\nabla}_{\mathbf{R}} | \varphi_m; \mathbf{R} \rangle) \cdot d\mathbf{R} , \qquad (4.59)$$

e assim, $\gamma_m(t)$ pode ser escrita como uma integral de linha ao longo de uma curva suave C no espaço \mathcal{M} ,

$$\gamma_m(C) = i \int_C \langle \varphi_m; \mathbf{R} | (\nabla_{\mathbf{R}} | \varphi_m; \mathbf{R} \rangle) \cdot d\mathbf{R} , \qquad (4.60)$$

com C representando o caminho percorrido pelos campos clássicos desde o instante $t_0 = 0$ até o instante t qualquer. Para $\mathbf{R}(t) \in \mathcal{M}$, tem-se para o operador diferencial nabla $\nabla_{\mathbf{R}}$ a seguinte definição:

$$\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{R}} \equiv \left[\frac{\partial}{\partial X} \ \hat{e}_i + \frac{\partial}{\partial Y} \ \hat{e}_j + \frac{\partial}{\partial Z} \ \hat{e}_k\right], \qquad (4.61)$$

onde foi empregada a convenção: $\mathbf{R}(t) = X(t) \ \hat{e}_i + Y(t) \ \hat{e}_j + Z(t) \ \hat{e}_k.$

No caso particular de uma evolução cíclica $C \to \mathscr{C}$, em que $\mathbf{R}(0) = \mathbf{R}(T)$ e que no domínio ao qual $\mathbf{R}(t)$ pertence não exista nenhuma singularidade, a fase (4.45) passa a ser chamada de fase geométrica de Berry ou fase de Berry² manifestando-se tanto em sistemas fermiônicos quanto bosônicos [90], assumindo a forma

$$\gamma_m(\mathscr{C}) = i \oint_{\mathscr{C}} \langle \varphi_m; \mathbf{R} | (\nabla_{\mathbf{R}} | \varphi_m; \mathbf{R} \rangle) \cdot d\mathbf{R} \,. \tag{4.62}$$

Apesar de retornar ao ponto de partida, ao longo de um circuito fechado \mathscr{C} no espaço \mathscr{M} , geralmente a fase de Berry é diferente de zero $(\gamma_m(0) \neq \gamma_m(T))$ [22].

Desde a publicação da Ref. [90], o estudo da fase de Berry tem sido abordada em

² Apesar da fase acumulada por sistemas quânticos que viajam adiabaticamente ao longo de uma trajetória fechada ser chamada de fase de Berry, o próprio Berry se referia a ela simplesmente por fase geométrica [106].

muitos campos da física [117–126]. Numerosas verificações experimentais também foram realizadas [127–130] logo após a descoberta de sua importância. Em estudos recentes, foi proposta como um protótipo para o bit quântico (qubit) [131–135]. Na Ref.[136], os autores Gu Zhi-Yu e QIAN Shang-Wu discutem a definição e a relação entre a fase de Berry e outros tipos de fase como a Aharonov-Anandan.

Como feito anteriormente na Eq.(4.55), a normalização de $|\varphi_m; \mathbf{R}\rangle$ implica que $\langle \varphi_m; \mathbf{R} | (\nabla_{\mathbf{R}} | \varphi_m; \mathbf{R} \rangle)$ seja imaginário puro garantindo que $\gamma_m(\mathscr{C})$ permaneça uma função real. Como o vetor de estado descreve um circuito fechado \mathscr{C} no espaço de parâmetros \mathscr{M} , a integral de linha pode ser escrita como uma integral de superfície \mathscr{S} com o uso do Teorema de Stokes,³

$$\gamma_m(\mathscr{C}) = \iint_{\mathscr{S}} \nabla_{\mathbf{R}} \times [i \langle \varphi_m; \mathbf{R} | (\nabla_{\mathbf{R}} | \varphi_m; \mathbf{R} \rangle)] \cdot \hat{e}_n(\mathbf{R}(t)) \, ds \,, \qquad (4.63)$$

sendo \mathscr{S} uma superfície aberta com elemento de área $d\mathbf{S}(\mathbf{R}(t)) = \hat{e}_{n}(\mathbf{R}(t))$ ds , delimitada pela curva \mathscr{C} , com vetor unitário $\hat{e}_{n}(\mathbf{R}(t))$ perpendicular a \mathscr{S} com sentido dado pela regra da mão direita [137].

Definimos agora a chamada conexão de Berry como⁴

$$\mathbf{A}_{m}(\mathbf{R}) \equiv i \langle \varphi_{m}; \mathbf{R} | (\nabla_{\mathbf{R}} | \varphi_{m}; \mathbf{R} \rangle), \qquad (4.64)$$

uma grandeza real que por sua vez, surge para descrever como relacionar ou conectar os estados $|\varphi_m; \mathbf{R}\rangle \in |\varphi_m; \mathbf{R} + d\mathbf{R}\rangle$ associados a dois pontos próximos no espaço de parâmetros [138]. Utilizando a definição (4.64) juntamente com o Teorema de Stokes, a fase $\gamma_m(\mathscr{C})$ fica

$$\gamma_m(\mathscr{C}) = \oint_{\mathscr{C}} \mathbf{A}_m(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R} = \iint_{\mathscr{S}} (\nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{A}_m(\mathbf{R})) \cdot \hat{e}_n(\mathbf{R}) \, d\mathbf{s} \,. \tag{4.65}$$

A fase de Berry depende da geometria do circuito \mathscr{C} traçado no espaço \mathscr{M} - daí o nome fase geométrica, mas não da velocidade para percorrê-lo (uma vez considerada a aproximação adiabática).

A fase $\gamma_m(\mathscr{C})$ é vista como uma não-holônomia associada a conexão $\mathbf{A}_m(\mathbf{R})$. Ao fazer uma analogia com a geometria esférica, o transporte paralelo de um vetor ao longo

³ Na Ref. [106] o autor utiliza o teorema de Stokes, porém faz uma ressalva afirmando que o mesmo não é trivial quando aplicado a dimensões mais altas. Um breve comentário também é feito no artigo de M.V.Berry [90].

⁴ A quantidade $\mathbf{A}_m(\mathbf{R})$ também é conhecida por outras denominações como: potencial vetor de Berry, potencial vetor geométrico, e potencial molecular Aharonov-Bohm [138].

de um triângulo geodésico sobre a superfície da Terra, não devolve sua forma original. O deslocamento ângular entre as direções inicial e final, é a não-holonomia associada a conexão definida pelo transporte paralelo [138].



Figura 25 – Transporte paralelo de um vetor ao longo de uma curva geodésica fechada sobre a superfície esférica [139].

Como representado na figura (25), embora o sistema retorne a sua posição inicial ele adquire uma fase geométrica caracterizada pela mudança entre as direções do vetor, antes e após o transporte paralelo.

Na Ref. [140], os autores Jens von Bergmann e HsingChi von Bergmann fornecem uma explicação completa sobre o pêndulo de Foucault e o processo de transporte paralelo sobre superfícies curvas, se utilizando para isto de argumentos geométricos básicos. Além disso, explicam também como o pêndulo de Foucault pode ser visto como um protótipo de uma ampla gama de fenômenos em vários ramos da física.

A descrição local das propriedades geométricas do espaço de parâmetros é dada pela chamada curvatura de Berry, uma grandeza real definida como [107]:

$$\mathbf{V}_m(\mathbf{R}) \equiv \mathbf{\nabla}_{\mathbf{R}} \times \mathbf{A}_m(\mathbf{R}), \qquad (4.66)$$

ou ainda, na forma tensorial [107]

$$\mathbf{V}_{\mu\nu}^{m}(\mathbf{R}) = \frac{\partial}{\partial R^{\mu}} \mathbf{A}_{\nu}^{m}(\mathbf{R}) - \frac{\partial}{\partial R_{\nu}} \mathbf{A}_{\mu}^{m}(\mathbf{R}) \,. \tag{4.67}$$

Podemos então, escrever $\gamma_m(\mathcal{C})$ como

$$\gamma_m(\mathscr{C}) = \iint_{\mathscr{S}} \mathbf{V}_m(\mathbf{R}) \cdot \hat{e}_n(\mathbf{R}) \, ds \,, \qquad (4.68)$$

Capítulo 4. Efeitos da fase AB sobre os padrões de difração e interferênia de elétrons com a divergência em sua forma assintótica e sua relação com a fase de Berry 101

e assim, interpretá-la como o fluxo de $\mathbf{V}_m(\mathbf{R})$ sobre a superfície \mathscr{S} delimitada pela curva \mathscr{C} . Isso nos permite notar que a dimensão de $\mathbf{V}_m(\mathbf{R})$ é $[R]^{-2}$, onde $[\mathbf{R}]$ é a dimenssão de \mathbf{R} . Escrevendo $\mathbf{V}_m(\mathbf{R})$ como,

$$\mathbf{V}_{m}(\mathbf{R}) = i\left(\left(\nabla_{\mathbf{R}} \left\langle \varphi_{m}; \mathbf{R} \right|\right) \times \left(\nabla_{\mathbf{R}} \left| \varphi_{m}; \mathbf{R} \right\rangle\right)\right), \qquad (4.69)$$

tem-se a primeira forma de $\mathbf{V}_m(\mathbf{R})$ [138].

Inserindo nessa expressão, um conjunto completo de auto
estados instantâneos $\{|\varphi_n; \mathbf{R}\rangle\}$, encontramos

$$\mathbf{V}_{m}(\mathbf{R}) = i \sum_{\substack{n, \\ n \neq m}} \left((\nabla_{\mathbf{R}} \langle \varphi_{m}; \mathbf{R} |) | \varphi_{n}; \mathbf{R} \rangle \times \langle \varphi_{n}; \mathbf{R} | (\nabla_{\mathbf{R}} | \varphi_{m}; \mathbf{R} \rangle) \right) \,. \tag{4.70}$$

O produto vetorial em (4.70) envolvendo os termos n = m, são nulos [106], pois $\langle \varphi_m; \mathbf{R} | \varphi_m; \mathbf{R} \rangle =$ 1, o que implica em $(\nabla_{\mathbf{R}} \langle \varphi_m; \mathbf{R} |) | \varphi_m; \mathbf{R} \rangle = - \langle \varphi_m; \mathbf{R} | (\nabla | \varphi_m; \mathbf{R} \rangle).$

De forma análoga ao que foi feito em (4.39), aplica-se o operador $\nabla_{\mathbf{R}}$ na equação de autovalor (4.29),

$$\nabla_{\mathbf{R}} \left(\mathbf{H}(\mathbf{R}(t)) | \varphi_m; \mathbf{R}(t) \right) = \nabla_{\mathbf{R}} \left(E_m(\mathbf{R}(t)) | \varphi_m; \mathbf{R}(t) \right), \qquad (4.71)$$

a fim de encontrar o termo,

$$\langle \varphi_n; \mathbf{R} | (\nabla_{\mathbf{R}} | \varphi_m; \mathbf{R} \rangle) = \frac{\langle \varphi_n; \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} \mathbf{H}(\mathbf{R}) | \varphi_m; \mathbf{R} \rangle)}{(E_m(\mathbf{R}) - E_n(\mathbf{R}))}, \qquad (4.72)$$

substituindo-o nos termos entre parênteses da Eq. (4.70) e assim, obtendo

$$\langle \varphi_m; \mathbf{R} | (\nabla_{\mathbf{R}} | \varphi_n; \mathbf{R} \rangle) \times \langle \varphi_n; \mathbf{R} | (\nabla_{\mathbf{R}} | \varphi_m; \mathbf{R} \rangle) = \left(\frac{\langle \varphi_m; \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} \mathbf{H} | \varphi_n; \mathbf{R} \rangle \times \langle \varphi_n; \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} \mathbf{H} | \varphi_m; \mathbf{R} \rangle}{(E_n(\mathbf{R}) - E_m(\mathbf{R}))^2} \right)$$

$$(4.73)$$

Com isso, $\mathbf{V}_m(\mathbf{R})$ assume a sua segunda forma [138]:

$$\mathbf{V}_{m}(\mathbf{R}) = i \sum_{\substack{n, \\ n \neq m}} \left(\frac{\langle \varphi_{m}; \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} \mathbf{H} | \varphi_{n}; \mathbf{R} \rangle \times \langle \varphi_{n}; \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} \mathbf{H} | \varphi_{m}; \mathbf{R} \rangle}{(E_{n}(\mathbf{R}) - E_{m}(\mathbf{R}))^{2}} \right).$$
(4.74)

Na Ref. [138], o autor faz o seguinte questionamento: "Se pensarmos em \mathbf{V}_m como um campo magnético, quais são as fontes desse campo?". Ele ainda ressalta que uma vez considerada a Eq. (4.66), tem-se que $\nabla \cdot \mathbf{V}_m(\mathbf{R}) = 0$, tal como um verdadeiro campo magnético, de modo que as fontes que o produzem devem ter um significado físico.

Capítulo 4. Efeitos da fase AB sobre os padrões de difração e interferênia de elétrons com a divergência em sua forma assintótica e sua relação com a fase de Berry 102

A Eq. (4.74), mostra que $\mathbf{V}_m(\mathbf{R})$ é singular em pontos de degenerescência no espaço de parâmetros onde os denominadores de energia são nulos, mesmo os elementos de matriz não-diagonais de $\nabla \mathbf{H}(\mathbf{R})$ geralmente não sendo nulos nesses mesmos pontos [138]. Esses pontos, comportam-se como cargas⁵ (monopolos) magnéticas, fontes de campo magnético **B**. Uma vez que $\nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{B} \neq 0$, essas cargas podem não ser as únicas fontes de campo, podendo haver correntes que fluem através do espaço de parâmetros [138]. As equações (4.68) e (4.74) expressam os resultados centrais do artigo de M.V. Berry [90].

Uma vez que, a aproximação adiabática é essencialmente uma operação de projeção, a dinâmica do sistema estará restrita ao *m*-ésimo nível de energia. Dessa forma, os autores da Ref. [107] argumentam que a Eq. (4.74) pode ser interpretada como o resultado da interação residual entre os níveis de energia associados as projeções sobre seus respectivos autosubespaços. A lei da conservação local da curvatura de Berry diz que :

$$\sum_{m} \mathbf{V}_{m}(\mathbf{R}) = 0. \qquad (4.75)$$

Essa igualdade pode ser verificada ao considerarmos o clássico modelo do sistema de dois níveis, proposto inicialmente por Berry [90], em que uma partícula de spin semiinteiro está sujeita a um campo magnético externo dependente do tempo. Nas várias Rfs. [98,106,107,138] que abordam esse sistema, os autores encontram ao menos um dos termos de curvatura associados a cada autoestado, up e/ou down (projeções de momento de dipolo magnético de spin na direção do eixo z) que, quando somados, nos fornecem o resultado da Eq. (4.75).

4.2.3 Conexão com a fase AB

Na Ref. [90], M. V. Berry demostra que o efeito AB pode ser interpretado como um exemplo de fase geométrica. Seguindo seus passos, vamos agora considerar o cálculo da fase de Berry associada a dinâmica do elétron na presença do solenóide como indicado na Fig.(26).

Para isso, consideramos a carga q confinada no interior de uma caixa cúbica por um

⁵ Se uma sucessão de pontos de degenerescência se dispuserem como uma corda no espaço de parâmetros, então, tem-se a chamada Corda de Dirac [138].

Capítulo 4. Efeitos da fase AB sobre os padrões de difração e interferênia de elétrons com a divergência em sua forma assintótica e sua relação com a fase de Berry 103

potencial $V(\mathbf{x} - \mathbf{R})$ (Fig.(26)). Sendo \mathbf{R} o vetor cuja origem está sobre o eixo do solenóide (direção do fluxo), origem do sistema coordenado, e extremidade centrada na caixa cúbica. O vetor \mathbf{x} representa a posição de q no interior da caixa cúbica em relação a origem do sistema.



Figura 26 – Carga q confinada numa caixa cúbica sendo transportada ao longo de uma curva \mathscr{C} em torno do solenóide - adaptado da Ref. [22].

As autofunções do operador hamiltoniano podem ser encontradas por

$$\left[\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\boldsymbol{\nabla}-\frac{q}{c}\mathbf{A}\right)^{2}+V(\mathbf{x}-\mathbf{R})\right]\psi_{n}=E_{n}\psi_{n}\,.$$
(4.76)

As soluções de Eq. (4.76) são encontradas com o uso do fator de fase de Dirac (ver Eq.(4.7)),

$$\psi_n = e^{i\Omega} \psi'_n \,, \tag{4.77}$$

com ψ'_n , uma função do deslocamento $(\mathbf{x} - \mathbf{R})$, satisfazendo a mesma equação de autovalor, porém com $\mathbf{A} \to 0$:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{x} - \mathbf{R})\right)\psi'_n = E_n\psi'_n, \qquad (4.78)$$

em que, por definição

$$\Omega \equiv \frac{q}{\hbar c} \int_{\mathbf{R}}^{\mathbf{x}} \mathbf{A}(\mathbf{x}') \cdot d\mathbf{x}' \,. \tag{4.79}$$

Nesse ponto, o autor da Ref. [22] ressalta a importância de se estabelecer um ponto de referência \mathcal{O} no centro da caixa. Uma vez que isso assegura a recuperação da fase, inicialmente convencionada, ao fim de um trajeto em torno do solenóide.

Na Ref. [90], Berry representa esse cenário (ao tratar o efeito Aharonov-Bohm) com a Fig.(27),



Figura 27 – O efeito Aharonov-Bohm como manifestação da fase de Berry. Uma carga q no interior de uma caixa cúbica sendo transportada ao longo de uma curva \mathscr{C} em torno de uma linha de fluxo - adaptado da Ref. [90].

onde considera o solenóide da Fig.(26) extremamente delgado e admitindo-o como uma simples linha de fluxo. A caixa cúbica é então transportada em torno da linha de fluxo sobre a cuva \mathscr{C} (ou em torno do solenóide, Fig.(26)) e neste caso em particular, Berry ainda argumenta que o processo não precisa ser necessariamente adiabático (na verdade, é indiferente). Vale mencionar que para o efeito *AB* superposto fortemente dependente do tempo (caso mais geral que aquele tratado em (4.1.3)) é conveniente ponderar sobre as escalas temporais de cada campo magnético. Apesar da figura (27) indicar que a extremidade do vetor **R** encontra-se sobre um dos vértices do cubo, o autor da Ref. [206], ao tratar sobre o assunto, deixa claro que o ponto de referência que denota a extremidade do vetor **R** deve estar dentro da caixa cúbica. Para calcular a fase de Berry, devemos determinar a priori a quantidade $\langle \psi_n; \mathbf{R} | (\nabla_{\mathbf{R}} | \psi_n; \mathbf{R} \rangle$). Observando que [22]

$$\nabla_{\mathbf{R}}\psi_{n} = \nabla_{\mathbf{R}} \left[e^{i\Omega}\psi_{n}'(\mathbf{x}-\mathbf{R}) \right] ,$$

$$= \left(-i\frac{q}{c\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{R})\psi_{n}'(\mathbf{x}-\mathbf{R}) + \nabla_{\mathbf{R}}\psi_{n}'(\mathbf{x}-\mathbf{R}) \right) e^{i\Omega} , \qquad (4.80)$$

encontramos que,

$$\begin{aligned} \langle \psi_n; \mathbf{R} | (\nabla_{\mathbf{R}} | \psi_n; \mathbf{R} \rangle) &= \int e^{-i\Omega} \left[\psi'_n(\mathbf{x} - \mathbf{R}) \right]^* e^{i\Omega} \left[-i \frac{q}{c\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \psi'_n(\mathbf{x} - \mathbf{R}) + \left(\nabla_{\mathbf{R}} \psi'_n(\mathbf{x} - \mathbf{R}) \right) \right] d^3 \mathbf{x} , \\ &= -i \frac{q}{c\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{R}) - \int \left\{ \left[\psi'_n(\mathbf{x} - \mathbf{R}) \right]^* \left(\nabla_{\mathbf{x}} \psi'_n(\mathbf{x} - \mathbf{R}) \right) \right\} d^3 \mathbf{x} . \end{aligned}$$
(4.81)

O gradiente $\nabla_{\mathbf{x}}$, quando age sobre uma função de $(\mathbf{x} - \mathbf{R})$, exibe a propriedade $\nabla_{\mathbf{R}} = -\nabla_{\mathbf{x}}$. A integral da Eq. (4.81) é basicamente i/\hbar vezes o valor esperado do momento em um autoestado do hamiltoniano $(-(\hbar^2/2m)\nabla^2 + V)$ e de acordo com a a Ref. [22], é identicamente nulo. Portanto,

$$\langle \psi_n; \mathbf{R} | (\nabla_{\mathbf{R}} | \psi_n; \mathbf{R} \rangle) = -i \frac{q}{c\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{R}).$$
 (4.82)

Empregando este resultado na forma da fase de Berry (ver Eq. (4.62)), encontramos

$$\begin{aligned} \gamma_n(\mathscr{C}) &= i \oint_{\mathscr{C}} \langle \psi_n; \mathbf{R} | (\nabla_{\mathbf{R}} | \psi_n; \mathbf{R} \rangle) \cdot d\mathbf{R} , \\ &= \frac{q}{c\hbar} \oint_{\mathscr{C}} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R} , \\ &= \frac{q \phi_m}{c\hbar} , \end{aligned}$$
(4.83)

reavendo o resultado da Ref.[90] e endossando o argumento de que o efeito AB é um caso particular de fase geométrica. Pois, quando o espaço de parâmetros é tridimensional, $\mathbf{R} = (R_1, R_2, R_3)$, a Eq. (4.62) (fase de Berry) nos remete a expressão para o fluxo magnético em termos do potencial vetor \mathbf{A} .

O fluxo, Φ_{flux} , através de uma superfície S delimitada por uma curva \mathcal{C} , como visto na Fig.(28), é


Figura 28 – Fluxo de campo magnético através da superfície ${\mathscr S}$ definida pela curva fechada ${\mathscr C}$ - adaptado da Ref. [22].

$$\Phi_{flux} = \iint_{\mathscr{S}} \mathbf{B} \cdot \hat{e}_{n} \, ds \,, \tag{4.84}$$

e sendo o campo magnético dado em função do potencial vetor $(\nabla \times \mathbf{A})$, com a ajuda do Teorema de Stokes, obtemos a seguinte expressão

$$\Phi_{flux} = \iint_{\mathscr{S}} (\mathbf{\nabla} \times \mathbf{A}) \cdot \hat{e}_{n} \, ds \tag{4.85}$$

$$= \oint_{\mathscr{C}} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x} \,. \tag{4.86}$$

Assim, a fase de Berry pode ser entendida como o fluxo de um campo magnético

$$B = i \nabla_{\mathbf{R}} \times \langle \psi_n; \mathbf{R} | (\nabla_{\mathbf{R}} | \psi_n; \mathbf{R} \rangle)$$

$$= \frac{q}{c\hbar} (\nabla \times \mathbf{A})$$

$$= \frac{q}{c\hbar} \mathbf{B}, \qquad (4.87)$$

por meio da trajetória de circuito fechado (\mathscr{C}) no espaço de parâmetros,

$$\gamma_{n}(\mathscr{C}) = \iint_{\mathscr{S}} \mathbf{B} \cdot \hat{e}_{n} \, ds$$
$$= \frac{q}{c \, \hbar} \iint_{\mathscr{S}} \mathbf{B} \cdot \hat{e}_{n} \, ds \, . \tag{4.88}$$

E nesse caso, podemos observar por meio das Eqs. $\{(4.84), (4.88)\}$, que a equivalência entre a fase de Berry e o fluxo de campo magnético é quase uma identidade [22].

5 Considerações finais e Conclusões

Motivados por um argumento dado por D.H.Kobe em [25], abordamos o problema de difração de ondas de matéria (elétrons) por um obstáculo (fio) rígido, não interagente e delgado via integrais de caminho de Feynman, isto é, alternativamente a teoria escalar da difração via equação de Schrödinger e o teorema integral de Kirchhoff. A definição da função (1.5), nos permitiu, de forma natural, eliminar as paredes que se estendiam para as regiões além fendas na Ref.[27], restando apenas uma das paredes (centrada), que se prestou muito bem como um fio delgado interposto no caminho da onda de matéria. Recuperamos os perfis gráficos (Fig.(11)), com mais detalhes que os apresentados na Fig.(6) da Ref.[219], onde o autor apresentou um método novo, para a época, de diagnóstico para medidas de estruturas de alta densidade em pequenas escalas com plasmas quentes. Tudo isso a partir de expressões analíticas, com base na relação entre o comprimento de onda e o tamanho característico do obstáculo via número de Fresnel $N_F(b)$, deixando claro o predomínio, em cada caso, da óptica geométrica e ondulatória na região imediatamente anterior a este obstáculo.

Com respeito ao conteúdo pertinente a teoria tratada aqui, subdividimos a literatura tradicionalmente adotada em cursos de graduação de ciências exatas (Física, Engenharia e Matemática), acerca de sua complexidade, em dois grupos: (I) ministradas ao ciclo básico [50, 51, 178]; (II) destinadas à disciplinas mais avançadas, como o Eletromagnetismo [52], Óptica [53] e Mecânica Quântica [206]. Em ambos os grupos os autores apresentam, de uma maneira ou outra, o fenômeno da difração e interferência de luz (e elétrons) por fendas simples e dupla, incluindo a difração por uma borda ou parede semi infinita, recuperado em ((1.1.2)-Fig.(5)), porém, nada dizem sobre o comportamento deste último mediante variação do parâmetro β , isto é, não há qualquer comentário sobre o efeito produzido sobre este padrão mediante variação das distâncias relativas entre os eixos da borda e da tela de difração, evitando assim, qualquer conclusão equivocada que o estudante venha a ter. O mesmo pode ser dito em relação ao esboço dos gráficos de difração por um obstáculo delgado (Fig.(11)), comparativamente a λ , o que tornaria visualmente claro a eles, que

fenômenos ondulatórios e de interferência não se limitam apenas a fenda simples ou dupla, reiterando assim, o argumento dado na introdução do trabalho de Daniel *et al.* [172]. É válido dizer também, que a representação das integrais de caminho é perfeitamente cabível ao problema de difração por fenda retangular (ou genérica) feito em [172], bastando para isso que o leitor reescreva adequadamente a função (1.5) e construa corretamente os propagadores associados a cada etapa do movimento (como nas Eq.(1.3) e Eq.(1.4)).

Ao longo do tempo, uma série de trabalhos envolvendo interferometria em sistemas de fenda dupla empregavam, figurativamente, um solenóide na região entre fendas (atrás de um obstáculo) [25, 27, 28, 30, 31]. O mesmo ocorre no Cap.(4), ao posicionarmos um solenóide na região imediatamente anterior ao fio, de modo que seu raio sempre obedecerá a condição $r_{sol} \ll 2b$, não nos causando assim, nenhum prejuízo conceitual. Isto nos permitiu, a partir da Eq.(4.8), extrair os perfis gráficos de interferência somados aos efeitos de fase AB com diferentes níveis de assimetria, conforme variava-se o comprimento do fio (ver Fig.(20)), inéditos até então [177], que por sua vez, podem ser usados como recurso complementar no estudo do Cap.(2), seção (2.6), da Ref. [206] (grupo (II)). No entanto, ficou claro que a partir de $N_F(b) > 1$ torna-se difícil a tarefa de distinguir as assimetrias do efeito AB (devido a formação de sombra e a predominância das parcelas associadas as regiões abertas (\pm) na Eq. (4.8)), e portanto, neste regime o modelo deixa de ser o mais indicado para este tipo de análise. Algo semelhante ocorrerá em relação aos padrões de difração e interferência por fenda dupla, discutidos na Ref. [26], nos regimes de Fresnel e Fraunhofer com fases separadas quando adicionados os efeitos de fase AB (ver Fig. (19)- $\{(c),(d)\}$ respectivamente). Nestes casos, em particular no primeiro (admitindo que o tamanho das fendas seja muito maior que λ , com a parede entre elas muito maior que as próprias fendas), surgirá uma região de sombra (semelhante a Fig.(20)-f) entre as porções iluminadas, com quase imperceptíveis assimetrias nos limites geométricos das fendas em virtude da insignificância dos valores assumidos pelas parcelas de interferências. Logo, assim como na Fig. (20)-(f), este regime é igualmente não recomendável às observações do efeito AB, e sobre isto, curiosamente, nada foi dito nas Refs. [25, 27]. Nesta perspectiva, o leitor poderá se certificar também que ao aplicar o efeito AB superposto descrito por Kaća Bradonjić e John D. Swain ao modelo proposto na Fig. (18), e recorrendo ao número

de Fresnel $N_F(b)$, será capaz de construir graficamente as configurações das intensidades em diferentes regimes e combinações de fluxo, semelhantes as Fig.(3) e Fig.(4) da Ref.[31] para $N_F(b) \gg 1$ (ver Fig.(24)), porém, bem diferentes quando $N_F(b) \ll 1$ (ver Fig.(23)).

Nesses últimos anos, com o avanço crescente da tecnologia, trabalhos teóricos e experimentais que tratam mecanismos em escalas micro e nanométricas são cada vez mais factíveis [220–222]. Em [223] os autores lidam com experimentos envolvendo a manipulação e transmissão de luz por fendas de mesma ordem ou de ordem menor que o comprimento de onda do feixe incidente. Em [224], são investigadas o comportamento de ondas plasmônicas superficiais por fenda dupla, e como elas podem ser afetadas pela variação do tamanho da parede entre essas fendas (isso se torna nítido em nossas imagens, Fig.(11) e Fig.(20), para efeitos decorrentes da difração por essa parede isoladamente). Contudo, num dado momento, a confecção de nano fendas ou mecanismos similares torna-se difícil ou impraticável para fins experimentais, e tal como em [225], dadas certas circunstancias, a largura das fendas podem contribuir muito pouco nas medidas aferidas, corroborando para adoção de modelos com uma simples barreira como obstáculo.

Já no Cap.(4), seção (4.1.2), ampliamos os resultados e análises do trabalho de M. Beau na Ref.[26], ao sistema de fenda dupla com efeitos de fase Aharonov-Bohm. A partir da Eq.(4.14) inferimos sobre a consistência física da Eq.(4.16). Como é nítido, através da Eq.(4.16) com fluxo ausente, recuperamos a forma matemática da intensidade de difração no regime de Fraunhoffer, uma expressão clássica, muito bem conhecida de fenômenos ondulatórios luminosos. Veja que isso é possível graças a sucessivas aproximações conferidas as funções de Fresnel (ver Cap.(1)). Contudo, quando empregamos essas aproximações a Eq.(4.8), percebemos que, até certo ponto, Eq.(4.13), ainda haveria um significado físico para a intensidade final (não há divergências), isto é, ela ainda seria capaz de demonstrar, juntamente com a (1.112) e a primeira parcela de (1.116), os padrões de difração com assimetrias AB. O mesmo não pode ser dito na etapa seguinte, onde alcançamos a Eq.(4.16), revelando uma descontinuidade em x = 0. Consequentemente, a Eq.(4.16) perde seu significado físico, ou seja, deixa de ser um observável, já que é incapaz de revelar os padrões de difração com efeito AB além de exibir porções onde as intensidades são negativas (ver Fig.(22)-{(a),(b)}. Desse modo, reforçamos a tese da inexistência ou incapacidade de encontrar uma expressão, nesse estágio de aproximação tal como a Eq.(1.114), porém, com efeito de fase AB, capaz de mostrar os padrões assimétricos de difração.

Como perspectiva de trabalho futuro, propomos discutir a difração no espaço e no tempo, com uma abordagem mais sofisticada da teoria discutida neste trabalho, na presença da gravidade e do efeito *AB* superposto dependente do tempo considerando também as contribuições probabilísticas provenientes de caminhos exóticos. Apêndices

APÊNDICE A – O teorema adiabático

A hipótese adiabática foi formulada em 1916 por Ehrenfest [141], a qual afirma que "qualquer estado que se transforma adiabaticamente nos parâmetros do sistema, retorna novamente a um estado definido com os mesmos números quânticos". Em 1928, Born e Fock [142] demonstraram a hipótese adiabática de Ehrenfest por meio do teorema adiabático, para estados de sistemas quânticos não-degenerados . Porém, efeitos de fases geométricas não foram incluídos na abordagem original de Born e Fock, sendo mencionada apenas anos mais tarde por Pancharatnam [96], Herzberg e Longuet-Higgins [143, 144], Stone [145] e Mead e Trulhar [146] e tratada formalmente por Michel V. Berry [90].

Em 1950, um tratamento matemático mais rigoroso da aproximação adiabática foi dado por Tosio Kato [148], e seus resultados foram empregados em diversos trabalhos [149–153], tornando a teoria mais sofisticada. Na Ref [154], onde os autores discutem os chamados estados topológicos da matéria, é feita uma revisão da demonstração do teorema adiabático dada nas abordagens de Born e Fock como também no formalismo de T. Kato. Fases geométricas e o transporte paralelo na condição de uma evolução temporal adiabática também são explorados nessa referência.

Na Ref. [147], A.C. Aguiar *et al.* faz uma aplicação da aproximação adiabática ao tratar o sistema de dois níveis, consistindo em uma partícula de spin 1/2 acoplada a um campo magnético externo dependente do tempo. É feita então, uma análise detalhada das equações diferenciais acopladas demonstrando claramente o motivo de se negligenciar os termos não-diagonais (acoplados). Isto é, os autores analisam a chamada frequência de Rabi na condição de que a frequência das transições eletrônicas entre os estados *up* e *down* ser muito maior que a frequência de precessão de Larmor. Na Ref. [114], M.T. Thomaz *et al.* retomam o sistema abordado na Ref. [147] e encontaram as fases geométricas associadas a dinâmica desse modelo.

Na Ref. [155], A.C.Aguiar Pinto et al. emprega a aproximação adiabática ao tratar sistemas quânticos não degenerados via matriz densidade. É possível encontrar

uma vasta discussão teórica nas Refs. [156–162] e experimental na Ref. [163] sobre a validade e aplicabilidade do Teorema Adiabático. Porém, não vamos nos deter as nuâncias matemáticas tratadas nessas referências, pois elas estão aquém do escopo teórico deste trabalho.

Neste capítulo, tomadas as considerações anteriores, a demostração do teorema adiabático será feita na representação de Schrödinger tal como foi originalmente abordada na Ref. [116].

A.0.0.1 Demonstração do teorema adiabático para sistemas de espectro degenerado

A descrição da evolução de sistemas quânticos que interagem entre si ou com o ambiente com escalas de tempo muito diferentes [164], é feita por operadores hamiltonianos dependentes de certos parâmetros que variam adiabaticamente no tempo. A demonstração do teorema adiabático, originalmente feita por Born e Fock [142], também pode ser encontrado em vários livros-texto [165, 166]. Sendo T o período associado a interação (via campos clássicos $\mathbf{R}(T)$) do hamiltoniano $\mathbf{H}(T)^1$ com o ambiente e τ o período associado aos fenômenos quânticos de transições eletrônicas a condição de evolução adiabática é atingida quando $T \gg \tau$.

Dado um sistema quântico governado por um hamiltoniano $\mathbf{H}(t)$ cuja variação é adiabática no tempo com período característico T, seu espectro de energia pode ser degenerado, porém, a degenerescência de cada nível de energia não muda com o tempo. De sua condição inicial, $|\psi(0)\rangle$, o sistema poderá ser encontrado num instante qualquer no estado $|\psi(t)\rangle$ por meio da Eq. de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \mathbf{H}(t) |\psi(t)\rangle .$$
 (A.1)

Para que o vetor de estado $|\psi(t)\rangle$ possa ser escrito como uma superposição de autoestados de $\mathbf{H}(t)$ e dessa forma, satisfazer a equação anterior é necessário que em cada instante t, o hamiltoniano tenha um conjunto completo de autoestados $\{|\varphi_n^{(\lambda_n)};t\rangle\}$. Aqui, são válidas as relações de, completeza

$$\sum_{n} \sum_{\lambda_n=1}^{D_n} |\varphi_n^{(\lambda_n)}; t\rangle \langle \varphi_n^{(\lambda_n)}; t| = \mathbf{1}, \quad (\lambda_n = 1, 2, \dots, D_n), \quad (A.2)$$

¹ Por conveniencia, para simplicar a notação adota-se $\mathbf{H}(\mathbf{R}(t)) = \mathbf{H}(t)$.

em que **1** é o operador identidade, e D_n é o grau de degenerescência associado ao autovalor $E_n(t)$, com $E_n(t) \neq E_m(t)$ para $n \neq m$, e a relação de ortonormalidade

$$\langle \varphi_m^{(\lambda_m)}; t | \varphi_n^{(\lambda_n)}; t \rangle = \delta_{m,n} \ \delta_{\lambda_m,\lambda_n}, \qquad (A.3)$$

com equação de autovalor instantânea,

$$\mathbf{H}(t) |\varphi_n^{(\lambda_n)}; t\rangle = E_n(t) |\varphi_n^{(\lambda_n)}; t\rangle .$$
(A.4)

Definindo uma nova variável adimensional s, tal como em [142],

$$s \equiv \frac{t}{T}, \qquad (A.5)$$

o vetor de estado que representa o sistema em cada instante s escrito na base de H(s) é:

$$|\psi(s)\rangle = \sum_{n} \sum_{\lambda_n=1}^{D_n} c_n^{(\lambda_n)}(s) \exp\left[-\frac{iT}{\hbar} \int_0^s E_n(s') ds'\right] |\varphi_n^{(\lambda_n)};s\rangle .$$
(A.6)

Para que o vetor de estado $|\psi(s)\rangle$ possa representar o sistema sob evolução adiabática é necessário que se tome algumas correções nos coeficientes $c_n^{(\lambda_n)}(s)$ no limite de $T \to \infty$. Dessa forma, substituindo a Eq. (A.6) na Eq. de Schrödinger (A.1), encontram-se um conjunto de equações diferenciais,

$$\frac{dc_m^{\lambda_m}(s)}{ds} = -\sum_n \sum_{\lambda_n=1}^{D_n} \exp\left(\frac{iT}{\hbar} \int_0^s \left[E_m(s') - E_n(s')\right] ds'\right) \langle \varphi_m^{(\lambda_m)}; s| (\frac{d}{ds} |\varphi_n^{(\lambda_n)}; s\rangle) c_n^{(\lambda_n)}(s),$$
(A.7)

em que, $\lambda_m = 1, 2, \ldots, D_m$.

Analogamente ao que foi feito anteriormente em (4.2.2)), o termo $\langle \varphi_m^{(\lambda_m)}; s | (\frac{d}{ds} | \varphi_n^{(\lambda_n)}; s \rangle)$ é dado por:

$$\langle \varphi_m^{(\lambda_m)}; s | (\frac{d}{ds} | \varphi_n^{(\lambda_n)}; s \rangle) = \frac{\langle \varphi_m^{(\lambda_m)}; s | \frac{d\mathbf{H}(s)}{ds} | \varphi_n^{(\lambda_n)}; s \rangle}{[E_n(s) - E_m(s)]}, \quad \text{para} \quad m \neq n.$$
(A.8)

Considerando a igualdade (A.8) na Eq. (A.7) e separando convenientemente os termos em que m = n e $m \neq n$, encontra-se

$$\frac{dc_m^{(\lambda_m)}(s)}{ds} = -\sum_{\substack{\lambda'_m=1\\m \neq m}}^{D_m} \langle \varphi_m^{(\lambda_m)}; s | (\frac{d}{ds} | \varphi_m^{(\lambda'_m)}; s \rangle) \ c_m^{(\lambda'_m)}(s) - \sum_{\substack{n,m \neq m}} \sum_{\substack{\lambda_n=1\\n \neq m}}^{D_n} \exp\left(\frac{iT}{\hbar} \int_0^s \left[E_m(s') - E_n(s') \right] ds' \right) \frac{\langle \varphi_m^{(\lambda_m)}; s | \frac{d\mathbf{H}(s)}{ds} | \varphi_n^{(\lambda_n)}; s \rangle}{\left[E_n(s) - E_m(s) \right]} \ c_n^{(\lambda_n)}(s).$$
(A.9)

A integral da equação (A.9), sobre a variável s, com s>0, é

$$c_{m}^{(\lambda_{m})}(s) = c_{m}^{(\lambda_{m})}(0) - \sum_{\lambda_{m}'=1}^{D_{m}} \int_{0}^{s} \left(\langle \varphi_{m}^{(\lambda_{m})}; s_{1} | (\frac{d}{ds_{1}} | \varphi_{m}^{(\lambda_{m}')}; s_{1} \rangle) \ c_{m}^{(\lambda_{m}')}(s_{1}) ds_{1} \right) - \sum_{\substack{n, \\ n \neq m}} \sum_{\lambda_{n}=1}^{D_{n}} \int_{0}^{s} \left(\exp\left(\frac{iT}{\hbar} \int_{0}^{s_{1}} \left[E_{m}(s') - E_{n}(s') \right] ds' \right) \frac{\langle \varphi_{m}^{(\lambda_{m})}; s_{1} | \frac{d\mathbf{H}(s_{1})}{ds_{1}} | \varphi_{n}^{(\lambda_{n})}; s_{1} \rangle}{\left[E_{n}(s_{1}) - E_{m}(s_{1}) \right]} \ c_{n}^{(\lambda_{n})}(s_{1}) \right) ds_{1} .$$
(A.10)

O Teorema de Riemann-Lebesgue [167], diz que para qualquer função F(x), contínua no intervalo $x \in [a,b]$, tem-se que:

$$\lim_{\epsilon \to \infty} \int_{a}^{b} F(x) \ e^{i\epsilon x} dx = 0.$$
 (A.11)

Com o propósito de reescrever a expressão contida na somatória da terceira parcela do lado direito da igualdade da Eq. (A.10) na forma da identidade (A.11), a seguinte definição é feita,

$$I_{n,m}^{(\lambda_{n},\lambda_{m})}(s) \equiv \int_{0}^{s} \left(\exp\left(\frac{iT}{\hbar} \int_{0}^{s_{1}} [E_{m}(s') - E_{n}(s')]ds' \right) \frac{\langle \varphi_{m}^{(\lambda_{m})}; s_{1} | \frac{d\mathbf{H}(s_{1})}{ds_{1}} | \varphi_{n}^{(\lambda_{n})}; s_{1} \rangle}{[E_{n}(s_{1}) - E_{m}(s_{1})]} c_{n}^{(\lambda_{n})}(s_{1}) \right) ds_{1}.$$
(A.12)

Para legitimar a aplicação da identidade do Teorema de Riemann-Lebesgue na Eq. (A.12) é preciso considerar também a seguinte definição,

$$g(s) \equiv \frac{1}{\hbar} \int_0^s \left[E_m(s_1) - E_n(s_1) \right] ds_1 \,. \tag{A.13}$$

Em função da definição (A.13), $I_{n,m}^{(\lambda_n,\lambda_m)}(s)$ ficará,

$$I_{n,m}^{(\lambda_n,\lambda_m)}(s) = -\lim_{T \to \infty} \frac{1}{\hbar} \int_{g(0)}^{g(s)} e^{iTg} \left\langle \varphi_m^{(\lambda_m)}; g \right| \frac{d\mathbf{H}(g)}{dg} |\varphi_n^{(\lambda_n)}; g\rangle \ c_n^{(\lambda_n)}(g) \frac{dg}{\dot{g}} = 0, \qquad (A.14)$$

sendo $\dot{g} = dg(s)/ds$. Fazendo uso do resultado obtido em (A.14) aplicado à Eq. (A.10), para $n \neq m$, no limite adiabático $(T \rightarrow \infty)$, encontra-se

$$c_m^{(\lambda_m)}(s) = c_m^{(\lambda_m)}(0) - \sum_{\lambda'_m = 1}^{D_m} \int_0^s \langle \varphi_m^{(\lambda_m)}; s_1 | (\frac{d}{ds_1} | \varphi_m^{(\lambda'_m)}; s_1 \rangle) \ c_m^{(\lambda'_m)}(s_1) ds_1 , \qquad (A.15)$$

ou alternativamente na forma diferencial,

$$\frac{dc_m^{(\lambda_m)}(s)}{ds} = -\sum_{\lambda_m'=1}^{D_m} \langle \varphi_m^{(\lambda_m)}; s | (\frac{d}{ds} | \varphi_m^{(\lambda_m')}; s \rangle) c_m^{(\lambda_m')}(s).$$
(A.16)

Esse resultado é conhecido pelo teorema adiabático [142]. Para um autovalor $E_m(t)$ não degenerado, tem-se $D_m = 1$. As equações (A.15) e (A.16) mostram que se originalmente o sistema foi preparado no estado $|\psi(0)\rangle$ associado ao autovalor degenerado de energia $E_m(0)$, as transições quânticas (eletrônicas) ocorreram apenas entre os estados pertencentes ao *m-ésimo* autosubeespaço.

Na na Ref. [168], os autores Gustavo Rigolin e Gerardo Ortiz introduziram uma teoria de perturbação adiabática para sistemas quânticos com espectro de energia degenerado. A série perturbativa encontrada por eles, permite que se estabeleça com rigor as condições para a validade do teorema adiabático da mecânica quântica para estes sistemas degenerados. Segundo eles, o mesmo formalismo pode ser usado para encontrar correções não adiabáticas para a fase geométrica não abeliana discutida por Wilczek-Zee [92]. Esses mesmos autores, na Ref. [169], ao se utilizarem da teoria discutida na Ref. [168], propõem um tratamento matemático rigoroso do teorema adiabático para o caso de sistemas de espectro degenerado, estabelecendo uma condição necessária e outra suficiente para sua validade. Eles ilustraram a aplicabilidade dessas condições a um problema degenerado dependente do tempo com solução exata.

APÊNDICE B – Artigos Publicados

- D.A.Lima, C.C.Favarato e S.V.B.Gonçalves, Uma análise da difração de elétrons por um fio delgado de comprimento variado com e sem efeitos de fase Aharonov-Bohm., Revista Brasileira de Ensino de Física 41, e20180228 (2019).
- D.A.Lima, C.C.Favarato, S.V.B.Gonçalves and G.Simonelli, The Double-Slit Electron Diffraction Experiment with Aharonov-Bohm Phase Effect Revisited and the Divergence in its Asymptotic Form, Brazilian Journal of Physics 49, 301-313 (2019).

Anexos

ANEXO A – O propagador da partícula livre

De acordo com o postulado fundamental da MQ, o estado de um sistema físico num instante t é completamente especificado pelo vetor de estado $|\psi(t)\rangle$. Por outro lado, a questão básica da dinâmica quântica não relativística é a de saber como evolui um sistema quântico entre um instante inicial t_0 e um instante final t, isto é, como obter $|\psi(t)\rangle$ a partir de $|\psi(t_0)\rangle$? A afirmação de que $|\psi(t_0)\rangle$ determina $|\psi(t)\rangle$ é a forma quanto-mecânica do princípio da causalidade, que assumiremos ser verdadeiro. Desse modo, admitiremos, então, que o estado $|\psi(t)\rangle$ pode ser obtido de $|\psi(t_0)\rangle$ por intermédio de um operador linear, o perador de evolução temporal $\mathscr{U}(t,t_0)$, definido por:

$$|\psi(t)\rangle = \mathscr{U}(t,t_0) |\psi(t_0)\rangle . \tag{A.1}$$

Da Eq.(A.1), segue imediatamente que,

$$\begin{aligned} |\psi(t_2)\rangle &= \mathscr{U}(t_2, t_1) |\psi(t_1)\rangle , \\ &= \mathscr{U}(t_2, t_1) \mathscr{U}(t_1, t_0) |\psi(t_0)\rangle , \\ &= \mathscr{U}(t_2, t_0) |\psi(t_0)\rangle , \end{aligned}$$
(A.2)

com

$$\mathscr{U}(t_n, t_0) = \mathscr{U}(t_n, t_{n-1}) \mathscr{U}(t_{n-1}, t_{n-2}) \dots \mathscr{U}(t_1, t_0),$$
(A.3)

por outro lado, tem-se também que,

$$\mathscr{U}(t,t) = 1. \tag{A.4}$$

Agora, para $\epsilon \ll 1$, vamos definir o operador $\mathscr{H}(t)$ da seguinte maneira:

$$\mathscr{U}(t+\epsilon,t) = 1 - \frac{i}{\hbar}\epsilon \mathscr{H}(t).$$
 (A.5)

Da Eq.(A.3, virá:

$$\mathscr{U}(t+\epsilon,t_0) = \mathscr{U}(t+\epsilon,t)\mathscr{U}(t,t_0).$$
(A.6)

Então, a equação diferencial satisfeita por $\mathscr{U}(t,t_0)$ será:

$$\frac{d}{dt}\mathcal{U}(t,t_{0}) = \lim_{\epsilon \to 0} \left(\frac{\mathcal{U}(t+\epsilon) - \mathcal{U}(t,t_{0})}{\epsilon} \right),$$

$$= \lim_{\epsilon \to 0} \left(\frac{\mathcal{U}(t+\epsilon,t)\mathcal{U}(t,t_{0}) - \mathcal{U}(t,t_{0})}{\epsilon} \right),$$

$$= \lim_{\epsilon \to 0} \left(\frac{\mathcal{U}(t,t_{0})\left(\mathcal{U}(t+\epsilon,t) - 1\right)}{\epsilon} \right),$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}(t)\mathcal{U}(t,t_{0}),$$
(A.7)

ou ainda, como

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathscr{U}(t, t_0) = \mathscr{H}(t) \mathscr{U}(t, t_0), \qquad (A.8)$$

com a condição inicial de que $\mathcal{U}(t_0, t_0) = 1$, conforme a Eq.(A.4).

O operador $\mathscr{H}(t)$ é característico do sistema físico em consideração, e é análogo à função Hamiltoniana em mecânica clássica, razão pela qual, em MQ, ele é chamado de operador Hamiltoniano. Agora, se \mathscr{H} não depende explicitamente do tempo, a Eq.(A.8) nos mostra:

$$\mathscr{U}(t,t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}(t-t_0)\right).$$
(A.9)

expressão essa que nos permite, sem restrição de generalidade, tomar $t_0 = 0$ e, portanto, usar a seguinte notação:

$$\mathscr{U}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}t\right).$$
 (A.10)

Agora, vamos obter a representação espectral de $\mathscr{U}(t)$. Para isso, usaremos um conjunto ortonormado completo de estados estacionários de \mathscr{H} , isto é:

$$\mathscr{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad ; \quad \langle \psi_m |\psi_n\rangle = \delta_{m,n} \,. \tag{A.11}$$

Usando a relação de completeza para o operador projeção desses estados, teremos:

$$\mathcal{U}(t) = \sum_{m,n} |\psi_m\rangle \langle \psi_m| \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathscr{H} t\right) |\psi_n\rangle \langle \psi_n| ,$$

$$= \sum_{m,n} |\psi_m\rangle \langle \psi_m|\psi_n\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathscr{H} t\right) \langle \psi_n| ,$$

$$= \sum_{m,n} \delta_{m,n} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) |\psi_m\rangle \langle \psi_n| , \qquad (A.12)$$

ou:

$$\mathscr{U}(t) = \sum_{n} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_{n}t\right) |\psi_{n}\rangle \langle\psi_{n}| , \qquad (A.13)$$

expressão essa que é a representação espectral de $\mathscr{U}(t)$, para a qual consideramos, por simplicidade, que é o espectro discreto.

Vamos, agora, definir o propagador para o sistema físico considerado. Para isso, suponhamos que o sistema seja descrito no espaço de configurações pelas coordenadas $\mathbf{q} = (q_1, q_1, \dots, q_l)$, onde l é o número de graus de liberdade. Se o sistema está no ponto \mathbf{q}_0 para o instante $t_0 = 0$, representado pelo estado $|\mathbf{q}_0\rangle$, a probabilidade de que esteja entre os estados $|\mathbf{q}\rangle \in |\mathbf{q} + d\mathbf{q}\rangle$ no instante t é, por definição, dado por:

$$\mathcal{P}(\mathbf{q},\mathbf{q}_{0};t) d\mathbf{q} = |\langle \mathbf{q} | \mathcal{U}(t) | \mathbf{q}_{0} \rangle|^{2} d\mathbf{q},$$

$$\equiv |\mathcal{K}(\mathbf{q},\mathbf{q}_{0};t)|^{2} d\mathbf{q}, \qquad (A.14)$$

onde:

$$\mathscr{K}(\mathbf{q},\mathbf{q}_0;t) \equiv \langle \mathbf{q} | \mathscr{U}(t) | \mathbf{q}_0 \rangle , \qquad (A.15)$$

define o propagador de $(\mathbf{q}_0, t_0 = 0)$ a (\mathbf{q}, t) . A expressão (A.15) mostra que ele representa uma amplitude de probabilidade para ir de um estado a outro.

A função de onda ns espaço das configurações é definido por:

$$\langle \mathbf{q} | \psi \rangle = \psi(\mathbf{q}),$$
 (A.16a)

$$\psi^*(\mathbf{q}) = \langle \psi | \mathbf{q} \rangle$$
, (A.16b)

onde (*) é o complexo conjugado. Usando a Eq.(A.16a) na Eq.(A.1) vir:

$$\psi(\mathbf{q},t) = \langle \mathbf{q} | \mathscr{U}(t,t_0) | \psi(t_0) \rangle . \tag{A.17}$$

Agora, inserindo-se a relação de completeza para o operador projeção $\int |\mathbf{q}_0\rangle \langle \mathbf{q}_0| d\mathbf{q}_0 = 1$ em (A.17), teremos:

$$\psi(\mathbf{q},t) = \int \langle \mathbf{q} | \mathscr{U}(t,t_0) | \mathbf{q}_0 \rangle \langle \mathbf{q}_0 | \psi(t_0) \rangle \, d\mathbf{q}_0 \,, \tag{A.18}$$

ou, usando-se a Eq.(A.15) e Eq.(A.16a), resultará:

$$\psi(\mathbf{q},t) \int \mathscr{K}(\mathbf{q},\mathbf{q}_0,t)\psi(\mathbf{q}_0)d\mathbf{q}_0, \qquad (A.19)$$

expressão essa que justifica chamar \mathcal{K} , também de função de Green dependente do tempo.

Para obtermos a representação espectral de $\mathscr K$ bastará inserir a Eq.(A.13) em (A.15). Assim, teremos:

$$\mathscr{K}(\mathbf{q},\mathbf{q}_{0};t) = \langle \mathbf{q} | \sum_{n} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_{n} t\right) |\psi_{n}\rangle \langle \psi_{n} | \mathbf{q}_{0}\rangle , \qquad (A.20)$$

ou, usando-se as Eqs.(A.16a) e (A.16b), virá:

$$\mathscr{K}(\mathbf{q},\mathbf{q}_0;t) = \sum_n \psi_n(\mathbf{q})\psi_n^*(\mathbf{q}_0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_nt\right).$$
(A.21)

Neste momento, estamos prontos para encontrar o propagador da partícula livre. Nesse caso, teremos:

$$\mathscr{K}(\mathbf{q},\mathbf{q}_{0};t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \mathbf{q} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \mathscr{U}(t) | \mathbf{p}_{0} \rangle \langle \mathbf{p}_{0} | \mathbf{q}_{0} \rangle d\mathbf{p} d\mathbf{p}_{0} \,. \tag{A.22}$$

Porém:

$$\langle \mathbf{p} | \mathscr{U}(t) | \mathbf{p}_0 \rangle = \exp\left(-\frac{p^2}{2m\hbar}t\right) \langle \mathbf{p} | \mathbf{p}_0 \rangle ,$$

$$= \delta\left(\mathbf{p} - \mathbf{p}_0\right) \exp\left(-\frac{p^2}{2m\hbar}t\right) .$$
(A.23)

Por outro lado, sabemos que:

$$\langle \mathbf{q} | \mathbf{p} \rangle = \frac{1}{\left(2 \pi \hbar\right)^{l/2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{q}\right),$$
 (A.24a)

$$\langle \mathbf{p}_0 | \mathbf{q}_0 \rangle = \frac{1}{\left(2 \pi \hbar\right)^{l/2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{q}_0\right),$$
 (A.24b)

onde ${\bf q}$ representa as coordenadas cartesianas da partícula, e la dimensão do espaço.

Então, substituindo as Eqs.(A.23), (A.24a) e (A.24b) na Eq.(A.22), virá:

$$\mathscr{K}(\mathbf{q},\mathbf{q}_0;t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{l/2}} \int \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \left[\frac{p^2}{2m}t - \mathbf{p}\left(\mathbf{q} - \mathbf{q}_0\right)\right]\right\} d\mathbf{p}.$$
 (A.25)

Para calcular a integral indicada na Eq.(A.25), usaremos a seguinte integral:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[i\left(a\,x^2\,+\,b\,x\right)\right]\,dx = \sqrt{\frac{i\,\pi}{a}}\,\exp\left(-i\frac{b^2}{4\,a}\right)\,,\tag{A.26}$$

que, levada na Eq.(A.25), encontramos finalmente o propagador procurado, ou seja:

$$\mathscr{K}(\mathbf{q},\mathbf{q}_0;t) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t}\right)^{l/2} \exp\left[\frac{i m}{2 \hbar t} \left(\mathbf{q} - \mathbf{q}_0\right)^2\right].$$
 (A.27)

A expressão (A.27) nos mostra que:

$$\lim_{t \to 0} \mathscr{K}_0(\mathbf{q}, \mathbf{q}_0; t) \to \delta \left(\mathbf{q} - \mathbf{q}_0 \right) , \qquad (A.28)$$

pois:

$$\delta\left(\mathbf{q}-\mathbf{q}_{0}\right) = \frac{1}{(\pi)^{l/2}} \lim_{\epsilon \to 0} \left\{ \frac{1}{(\epsilon)^{l/2}} \exp\left[-\frac{(\mathbf{q}-\mathbf{q}_{0})^{2}}{\epsilon}\right] \right\}.$$
 (A.29)

Referências Bibliográficas

1 L.De Broglie, Nature **112**, 540 (1923). Citado na página **10**.

2 C.J.Calbick, The Physics Teacher 1, 63 (1963). Citado na página 10.

3 R.B.Leighton e M.L.M.Sands, *The Feynman Lectures on Physics: Quantum mechanics* (Dover Publications, New York 2012). Citado 2 vezes nas páginas 10 e 22.

4 R.P.Feynman e A.R.Hibbs, *Quantum mechanics and path integrals: Emended edition* (Dover Publications, New York 2012). Citado 5 vezes nas páginas 10, 14, 15, 17 e 54.

5 R.Bach, D.Pope, S.H.Liou e H.Batelaan, New Journal of Physics **15**, 033018 (2013). Citado na página 10.

6 C.Jönsson, Zeitschrift für Physik 161, 454 (1961). Citado na página 10.

7 C.Jönsson, American Journal of Physics 42, 4 (1974). Citado na página 10.

8 O.Donati, G.P.Missiroli e G.Pozzi, American Journal of Physics 41, 639 (1973).
 Citado na página 10.

9 P.G.Merli, G.F.Missiroli e G.Pozzi, American Journal of Physics 44, 306 (1976).Citado na página 10.

10 A.Tonomura, J.Endo, T.Matsuda, T.Kawasaki e H.Ezawa, American Journal of Physics **57**, 117 (1989). Citado na página 10.

11 R.Rosa, Physics in Perspective 14, 178 (2012). Citado na página 10.

12 B.Barwick, G.Gronniger, L.Yuan, S.H.Liou e H.Batelaan, Journal of Applied Physics 100, 074322 (2006). Citado na página 10.

13 S.Frabboni, C.Frigeri, G.C.Gazzadi e G.Pozzi, American Journal of Physics 79, 615 (2011). Citado 2 vezes nas páginas 10 e 51.

14 A.Zeilinger, R.Gähler, C.G.Shull, W.Treimer e W.Mampe, Reviews of Modern Physics60, 1067 (1988). Citado na página 10.

15 F.Shimizu, K.Shimizu e H.Takuma, Physical Review A **46**, R17 (1992). Citado na página 10.

16 O.Carnal e J.Mlynek, Physical Review Letters 66, 2689 (1991). Citado na página 10.

M.Arndt, O.Nairz, J.V.Andreae, C.Keller, G.Van der Zouw e A.Zeilinger, Nature 401, 680 (1999). Citado na página 10.

18 O.Nairz, M.Arndt e A.Zeilinger, Journal of Modern Optics **47**, 2811 (2000). Citado na página 10.

19 O.Nairz, M.Arndt e A.Zeilinger, American Journal of Physics **71**, 319 (2003). Citado na página 10.

20 M.Gondran and A.Gondran, American Journal of Physics **73**, 507 (2005). Citado na página 10.

21 J.M.F.Bassalo e M.S.D.Cattani, Elementos de Física matemática, v.3 Equações integrais e Integrais de trajetória não relativísticas (Editora Livraria da Física, São Paulo 2012) 1^a ed. Citado na página 10.

22 D.J.Griffiths e D.F.Schroeter, *Introduction to Quantum Mechanics* (Cambridge University Press, Cambridge 2018) 3^a ed. Citado 7 vezes nas páginas 13, 93, 98, 103, 104, 105 e 106.

23 C.C-Tannoudji, B.Diu e F.Laloë, *Quantum Mechanics*, $v.1 \ e \ v.2$ (A Wiley-Interscience Publication, Paris 1977) 2^a ed. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 22.

M.d.l.A.Fanaro, M. Arlego e M.R.Otero, European Journal of Physics Education 3, 1 (2012). Citado na página 13.

D.H.Kobe, Annals of Physics 123, 381 (1979). Citado 9 vezes nas páginas 12, 13, 14, 17, 54, 58, 78, 107 e 108.

M.Beau, European Journal of Physics 33, 1023 (2012). Citado 28 vezes nas páginas
10, 12, 13, 14, 17, 18, 22, 23, 24, 31, 33, 34, 35, 36, 42, 43, 47, 49, 50, 52, 54, 58, 60, 75, 81,
86, 108 e 109.

27 D.Shapiro e W.C.Henneberger, Journal of Physics A: Mathematical and General 22,
3605 (1989). Citado 10 vezes nas páginas 12, 14, 17, 54, 58, 73, 78, 86, 107 e 108.

D.H.Kobe, V.C.Aguilera-Navarro e R.M.Ricotta, Physical Review A 45, 6192 (1992).
Citado 6 vezes nas páginas 12, 14, 17, 54, 58 e 108.

29 O.A.Barut e S.Basri, American Journal of Physics 60, 896 (1992). Citado 6 vezes nas páginas 14, 17, 18, 22, 54 e 58.

30 V.C.Aguilera-Navarro e R.M.Quick, Physical Review A **50**, 2885 (1994). Citado 6 vezes nas páginas 12, 14, 17, 54, 58 e 108.

31 K.Bradonjić e J.D.Swain, Quantum Information Processing 13, 323 (2014). Citado 10 vezes nas páginas 12, 14, 17, 54, 58, 84, 85, 90, 108 e 109.

32 R.P.Feynman, Reviews of Modern Physics 20, 367 (1948). Citado na página 15.

33 P.A.M.Dirac, Proceedings of the Royal Society of London. Series A 133, 60 (1931).
Citado 3 vezes nas páginas 15, 74 e 91.

34 P.Sancho, The European Physical Journal D 68, 34 (2014). Citado na página 17.

35 A.V.Wijngaarden e W.L.Scheen, *Table of Fresnel Integrals*, (Verhandl. Konink. Ned. Akad. Wetenschapen., Amsterdam 1949). Citado na página 20.

36 R.J.Hangelbroek, Journal of Engineering Mathematics 1, 37 (1967) Citado na página
20.

37 R.Bulirsch, Numerische Mathematik 9, 380 (1967). Citado na página 20.

38 R.Levien, Rapp. tech -, - (2008). Citado na página 21.

39 D.S.Meek e D.J.Walton, Journal of Computational and Applied Mathematics 25, 69 (1989). Citado na página 21.

40 E.D-Kostova e V.Kostov, *Tese: Irregularity of optimal trajectories in a control problem* for a car-like robot, school: Inria (1998). Citado na página 21.

41 D.J.Walton e D.S.Meek, Computers & Graphics 29, 353 (2005). Citado na página 21.

42 D.J.Walton e D.S.Meek, Journal of Computational and Applied Mathematics **223**, 86 (2009). Citado na página 21.

43 L.Blanch, E.Checa e J.Marín, Modelling in Science Education and Learning 6, 105 (2013). Citado na página 21.

44 J.L.Bastardo, S.A.Ibrahim, P.F.de Córdoba, J.F.U.Schölzel e Y.L.Ratis, Applied Mathematics Letters **18**, 23 (2005). Citado na página 22.

45 Y.Z.Umul, Optics Express **13**, 8469 (2005). Citado na página 22.

46 P.Wellin, *Programming with Mathematica* \mathbb{B} : An Introduction (Cambridge University Press, New York 2013) 1^{*a*} ed. Citado na página 22.

47 S.Wolfram, An Elementary Introduction to the Wolfram Language (Wolfram Media, Inc., Manitoba 2015) 1^a ed. Citado na página 22.

48 P.Wellin, Essentials of Programming in Mathematica[®] (Cambridge University Press, New York 2015) 1^a ed. Citado na página 22.

49 C.Hastings, K.Mischo e M.Morrison, Hands-On Start to Wolfram Mathematica: and programming with the Wolfram language (Wolfram Media, Inc., Illinois 2015) 2^a ed. Citado na página 22. 50 M.Alonso e E.J.Finn, *Física um curso universitário*, v. 2 Campos e ondas (Editora Edgar Blucher, São Paulo 2015) 2^a ed. Citado 5 vezes nas páginas 22, 30, 39, 40 e 107.

51 H.M.Nussenzveig, Curso de Física Básica, v. 4 Ótica, Relatividade e Física Quântica (Editora Edgar Blucher, São Paulo, 1998) 1^a ed. Citado 3 vezes nas páginas 22, 31 e 107.

52 K.D.Machado, *Eletromagnetismo*, v. 3 (Editora Toda Palavra, Ponta Grossa, 2013)
1^a ed. Citado 4 vezes nas páginas 22, 36, 40 e 107.

53 M.Born e E.Wolf, *Principles of Optics - Eletromagnetic Theory of Propagation*, *Interference and Diffraction of Light* (Cambridge University Press, Cambridge, 1999) 7th ed. Citado 4 vezes nas páginas 22, 31, 49 e 107.

54 H.Yabuki, International Journal of Theoretical Physics **25**, 159 (1986). Citado 5 vezes nas páginas 11, 30, 61, 68 e 69.

55 M.Born, Zeitschrift für Physik **38**, 803 (1926). Citado 2 vezes nas páginas 31 e 55.

56 R.D.Sorkin, Modern Physics Letters A 09, 3119 (1994). Citado na página 30.

57 U.Sinha, C.Couteau, T.Jennewein, R.Laflamme e G.Weihs, Science **329**, 418 (2010). Citado na página 30.

58 H.De Raedt, K.Michielsen e K.Hess, Physical Review A **85**, 012101 (2012). Citado na página 30.

59 R.Sawant, J.Samuel, A.Sinha, S.Sinha and U.Sinha, Physical Review Letters 113, 120406 (2014). Citado na página 30.

60 A.Sinha, A.H.Vijay e U.Sinha, Scientific Reports **5**, 10304 (2015). Citado na página 30.

61 O.S.Magana-Loaiza *et al.*, Nature Communications **7**, 13987 (2016). Citado na página 30.

62 J.Q.Quach, Physical Review A 95, 042129 (2017). Citado na página 30.

63 Y. Aharonov e A. Casher, Physical Review Letters 53, 319 (1984). Citado na página73.

64 A.Cimino et al, Physical Review Letters 63, 380 (1989). Citado na página 73.

65 K.Sangster, E.A.Hinds, S.M.Barnett e E.Riis, Physical Review Letters 71, 3641 (1993). Citado na página 73.

66 K.Sangster et al., Physical Review A 51, 1776 (1995). Citado na página 73.

67 A.Görlitz, B.Schuh e A.Weis, Physical Review-Section A-Atomic Molecular and Optical Physics **51**, R4305 (1995). Citado na página 73.

68 K.Zeiske, G.Zinner, F.Riehle e J.Helmcke, Applied Physics B **50**, 205 (1995) Citado na página 73.

69 S.Yanagimachi, M.Kajiro, M.Machiya e A.Morinaga, Physical Review A 65, 042104
(2002) Citado na página 73.

70 J.Gillot, S.Lepoutre, A.Gauguet, J.Vigué e M.Büchner, The European Physical Journal D **68**, 168 (2014) Citado na página 73.

71 X-G.He e B.H.J. McKellar, Physical Review A 47, 3424 (1993) Citado na página 73.

72 M.Wilkens, Physical Review Letters 72, 5 (1994) Citado na página 73.

73 H.Wei, R.Han and X.Wei, Physical Review Letters 75, 2071 (1995) Citado na página73.

S.Lepoutre, A.Gauguet, G.Trénec, M.Büchner e J.Vigué, Physical Review Letters109, 120404 (2012) Citado na página 74.

J.Gillot, S.Lepoutre, A.Gauguet, M.Büchner e J.Vigué, Physical Review Letters 111, 030401 (2013) Citado na página 74.

76 X-G.He e B.H.J.McKellar, Physical Review A 64, 022102 (2001) Citado na página74.

77 X-G.He e B.H.J.McKellar, Physics Letters B 559, 263 (2003) Citado na página 74.

78 M.Ericsson e E.Sjöqvist, Physical Review A 65, 013607 (2001) Citado na página 74.

79 J.Anandan, Physical Review Letters 85, 1354 (2000) Citado na página 74.

80 J.P.Dowling, C.P.Williams e J.D.Franson, Physical Review Letters **83**, 2486 (1999) Citado na página 74.

81 A.S.Goldhaber e W.P.Trower, American Journal of Physics **58**, 429 (1990) Citado na página 74.

82 C.Castelnovo, R.Moessner e S.L.Sondhi, Nature 451, 42 (2008) Citado na página 74.

83 D.J.P.Morris *et al.*, Science **326**, 411 (2009) Citado na página 74.

84 I.Chuang, B.Yurke, R.Durrer e N.Turok, Science 251, 1336 (1991) Citado na página
74.

85 Z.Fang, N.Nagaosa, et al., Science 302, 92 (2003) Citado na página 74.

86 P.Milde et.al, Science 340, 1076 (2013) Citado na página 74.

87 M.W.Ray *et al.*, Nature **505**, 657 (2014) Citado na página 74.

88 V.Pietilä e M.Möttönen, Physical Review Letters **103**, 030401 (2009) Citado na página 74.

89 C.Furtado e G.Duarte, Physica Scripta 71, 7 (2005) Citado na página 74.

M.V.Berry, Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences 392, 45 (1984). Citado 11 vezes nas páginas 12, 73, 90, 91, 97, 98, 99, 102, 104, 105 e 112.

91 B.Simon, Physical Review Letters 51, 2167 (1983). Citado na página 90.

92 F.Wilczek e A.Zee, Physical Review Letters **52**, 2111 (1984). Citado 2 vezes nas páginas 90 e 116.

93 A.Zee, Physical Review A 38, 1 (1988). Citado na página 90.

94 Y.Aharonov e J.Anandan, Physical Review Letters, **58**, 1593 (1987). Citado na página 90.

95 J.Samuel e R.Bhandari, Physical Review Letters **60**, 2339 (1988). Citado 2 vezes nas páginas 91 e 95.

96 S.Pancharatnam, Proceedings of the Indian Academy of Sciences - Section A 44, 247 (1956). Citado 2 vezes nas páginas 91 e 112.

97 J.Anandan, Physics Letters A 133, 171 (1988). Citado na página 91.

98 B.R.Holstein, American Journal of Physics **57**, 1079 (1989). Citado 2 vezes nas páginas 91 e 102.

99 D.Ellinas, S.M.Barnett e M.A.Dupertuis, Physical Review A **39**, 3228 (1989). Citado na página 91.

100 D.Gamliel e J.H.Freed, Physical Review A 39, 3238 (1989). Citado na página 91.

101 S.I.Chu, Z.C.Wu e E.Layton, Chemical Physics Letters **157**, 151 (1989). Citado na página 91.

102 A.Uhlmann, Letters in Mathematical Physics **21**, 229 (1991). Citado na página 91.

103 E.Sjöqvist et al., Physical Review Letters 85, 2845 (2000). Citado na página 91.

104 S.Filipp e E.Sjöqvist, Physical Review Letters 90, 050403 (2003). Citado na página91.

105 L.G.Yang, B.Shao e J.Zou, The European Physical Journal D **66**, 1 (2012). Citado na página 91.

106 J.J.John Sakurai e J.Napolitano, *Modern Quantum Mechanics* (Pearson Education, Inc., Essex 2014) 2^a ed. Citado 5 vezes nas páginas 93, 98, 99, 101 e 102.

107 D.Xiao, M-C.Chang e Q.Niu, Reviews of Modern Physics **82**, 1959 (2010). Citado 3 vezes nas páginas 93, 100 e 102.

108 W.Jin-wei e G.Guang-can, Acta Physica Sinica (Overseas Edition) **4**, 406 (1995). Citado na página 93.

109 S.L.Zhu, Z.D.Wang e Y.D.Zhang, Condensed Matter **102**, 153 (1997). Citado na página 95.

110 G.G. Polavieja, Physical Review Letters 81, 1 (1998). Citado na página 95.

111 A.Mostafazadeh, Journal of Physics A: Mathematical and General 32, 8157 (1999).Citado na página 95.

112 S.L.Zhu e Z.D.Wang, Physical Review Letters 85, 1076 (2000). Citado na página 95.

113 S.L.Zhu, Z.D.Wang e Y.D.Zhang, Physical Review B **61**, 1142 (2000). Citado na página 95.

114 M.T.Thomaz, A.C.A.Pinto e M.Moutinho, Brazilian Journal of Physics 40, 180 (2010). Citado 3 vezes nas páginas 95, 96 e 112.

115 S.Filipp et al., Physical Review A 72, 021602 (2005) Citado na página 95.

116 M.A.Alves e M.T.Thomaz, American Journal of Physics **75**, 552 (2007) Citado 2 vezes nas páginas 96 e 113.

117 R.Resta, Journal of Physics: Condensed Matter 12, R107 (2000) Citado na página99.

118 Y.Zhang et al., Nature 438, 201 (2005) Citado na página 99.

119 A.F.Young, Y.Zhang e P.Kim, Springer International Publishing: Physics of Graphene, 3 (2014) Citado na página 99.

120 Y.G.Liu, T.Miller e T.C.Chiang, Physical Review Letters **107**, 166803 (2011) Citado na página 99.

121 B.K.Pal, S.Pal e B.Basu, Classical and Quantum Gravity **30**, 125002 (2013) Citado na página 99.

122 W.Youlin e M.Guangda, Chinese Physics Letters 12, 193 (1995) Citado na página99.

- 123 Y.Q.Cai e G.Papini, Classical and quantum gravity 7, 269 (1990) Citado na página99.
- 124 R.S.Nikam et al., Physics Letters B 235, 215 (1990) Citado na página 99.
- 125 T.F.Jordan, Journal of Mathematical Physics 28, 1759 (1987) Citado na página 99.
- 126 J.N.Laia, Journal of Mathematical Physics 51, 122308 (2010) Citado na página 99.
- 127 A.Tomita e R.Y.Chiao, Physical Review Letters 57, 937 (1986) Citado na página99.
- 128 T.Bitter e D.Dubbers, Physical Review Letters 59, 251 (1987) Citado na página 99.
- 129 J.Moody, A.Shapere e F.Wilczek, Physical Review Letters **56**, 893 (1986) Citado na página 99.
- 130 D.Suter et al., Molecular Physics 61, 1327 (1987) Citado na página 99.
- 131 D.Leibfried *et al.*, Nature **422**, 412 (2003) Citado na página 99.
- 132 T.Calarco et al., Physical Review A 70, 012306 (2004) Citado na página 99.
- 133 H.Imai e A.Morinaga, Physical Review A 76, 062111 (2007) Citado na página 99.
- 134 E.Sjöqvist, Physics 1, 35 (2008) Citado na página 99.
- 135 J.Dajka, J.Łuczka e P.Hänggi, Quantum Information Processing **10**, 85 (2011) Citado na página 99.
- 136 Z-Y.Gu e S-W.Qian, Commun. Theor. Phys.(Beijing, China) **43**, 89 (2005) Citado na página 99.
- 137 H.L.Guidorizzi, Um curso de cálculo, v. 3 (Editora LTC, Rio de Janeiro 2002) 2^a ed. Citado na página 99.
- 138 A.Garg, American Journal of Physics **78**, 661 (2010) Citado 4 vezes nas páginas 99, 100, 101 e 102.
- 139 K.Everschor-Sitte e M.Sitte, Journal of Applied Physics **115**, 172602 (2014) Citado na página 100.
- 140 J.von.Bergmann and H.von Bergmann, American Journal of Physics **75**, 888 (2007) Citado na página 100.

141 P.Ehrenfest, Proc. Amst. Acad. 19, 576 (1916). Citado na página 112.

142 M.Born e V.Fock, Zeitschrift für Physik **51**, 165 (1928). Citado 4 vezes nas páginas 112, 113, 114 e 116.

143 G.Herzberg e H.C.Longuet-Higgins, Discuss. Faraday Soc. **35**, 77 (1963). Citado na página 112.

144 H.C.Longuet-Higgins, Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences **344**, 147 (1975). Citado na página 112.

145 A.J.Stone, Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences **351**, 141 (1976). Citado na página 112.

146 C.A.Mead e T.D.G.Truhlar, The Journal of Chemical Physics **70**, 2284 (1979). Citado na página 112.

147 A.C.Pinto, M.C.Nemes, J.G.P.de Faria e M.T.Thomaz, American Journal of Physics68, 955 (2000). Citado na página 112.

148 T.Kato, Journal of the Physical Society of Japan 5, 435 (1950). Citado na página112.

149 A.Lenard, Annals of Physics 6, 261 (1959). Citado na página 112.

150 J.A.de Azcárraga e L.Navarro, Journal of Mathematical Physics **16**, 243 (1975). Citado na página 112.

151 S.A.Fulling, Journal of Mathematical Physics 16, 875 (1975). Citado na página 112.

152 G.A.Hagedorn, Annals of Physics 196, 278 (1989). Citado na página 112.

153 G.Nenciu, Communications in Mathematical Physics **152**, 479 (1993). Citado na página 112.

154 J.C.Budich e B.Trauzettel, Physica Status Solidi (RRL)-Rapid Research Letters 7,109 (2013). Citado na página 112.

155 A.C.A.Pinto, K.M.R.Fonseca e M.T.Thomaz, Physica A: Statistical Mechanics and its Applications **311**, 169 (2002). Citado na página 112.

156 D.M.Tong et al., Physical Review Letters 98, 150402 (2007). Citado na página 113.

157 A.G.Chirkov, Technical Physics Letters 27, 93 (2001). Citado na página 113.

158 Y.Zhao, Physical Review A 77, 032109 (2008). Citado na página 113.

159 K.P.Marzlin e B.C.Sanders, Technical Physics Letters **93**, 160408 (2004). Citado na página 113.

160 T.Yong, Communications in Theoretical Physics 57, 343 (2012). Citado na página113.

161 L.Dafa e M.H.Yung, New Journal of Physics 16, 053023 (2014). Citado na página113.

162 J.Ortigoso, Physical Review A 86, 032121 (2012). Citado na página 113.

163 J.Du et al., Physical Review A 101, 060403 (2008). Citado na página 113.

164 H.Kuratsuji e S.Iida, Progress of Theoretical Physics **74**, 439 (1985). Citado na página 113.

165 A.Messiah, Quantum Mechanics Two Volumes Bound as One (Dover Publications, New York 2000) 2^a ed. Citado na página 113.

166 S.Weinberg, *Lectures on Quantum Mechanics* (Cambridge University Press, Cambridge 2015) 2^a ed. Citado na página 113.

167 N.A.Lemos, *Convite à Física Matemática* (Editora Livraria da Física, São Paulo 2013) 1^a ed. Citado na página 115.

168 G.Rigolin e G.Ortiz, Physical Review Letters 104, 170406 (2010). Citado na página116.

169 G.Rigolin e G.Ortiz, Physical Review A 85, 062111 (2012). Citado na página 116.

170 X.Y.Wu et al., International Journal of Theoretical Physics 49, 2191 (2010).

171 A.S.Sanz, F.Borondo e M.J.Bastiaans, Physical Review A 71, 042103 (2005).

172 D.M.Reis, E.M.Santos e A.V.A.Neto, Revista Brasileira de Ensino de Física 37, 2312 (2015). Citado 2 vezes nas páginas 54 e 108.

173 D.Lincoln, The Physics Teacher 54, 203 (2016). Citado na página 54.

174 A.Velentzas, The Physics Teacher 52, 493 (2014). Citado na página 54.

175 D.F.Styer et al., American Journal of Physics 70, 288 (2002). Citado na página 54.

176 P.D.Mannheim, American Journal of Physics 51, 328 (1983). Citado na página 54.

177 D.A.Lima, C.C.Favarato and S.V.B.Gonçalves, Revista Brasileira de Ensino de FÍsica 41, e20180228 (2019). Citado 9 vezes nas páginas 54, 55, 57, 58, 59, 73, 80, 84 e 108. 178 P.A.Tipler e G.Mosca, *Física para cientistas e engenheiros, v. 2 Eletricidade e magnetismo, óptica* (Editora LTC, Rio de Janeiro 2006) 2^a ed. Citado 2 vezes nas páginas 59 e 107.

179 R.E.Haskell, American Journal of Physics 38, 1039 (1970). Citado na página 60.

180 S.Ganci, American journal of physics 73, 83 (2005). Citado na página 60.

181 G.Rengaraj et al., New Journal of Physics 20, 063049 (2018). Citado na página 71.

182 W.Ehrenberg e R.E.Siday, Proceedings of the Physical Society. Section B **62**, 8 (1949). Citado 2 vezes nas páginas 72 e 73.

183 Y.Aharonov e D.Bohm, Physical Review **115**, 485 (1959). Citado 2 vezes nas páginas 72 e 73.

184 Y.Aharonov e D.Bohm, Physical Review **123**, 1511 (1961). Citado 2 vezes nas páginas 72 e 73.

185 G.M.Amaral *et al.*, Revista Brasileira de Ensino de Física **38**, e3309 (2016). Citado na página 72.

186 M.Bright e D.Singleton, Physical Review D 91, 085010 (2015). Citado na página 73.

187 T.T.Wu e C.N.Yang, Physical Review D 12, 3845 (1975). Citado na página 73.

188 R.G.Chambers, Physical Review Letters 5, 3 (1960). Citado na página 73.

189 S.Olariu e I.I.Popescu, Reviews of Modern Physics **57**, 339 (1985). Citado na página 73.

190 B.E.Allman *et al.*, Physical Review Letters **68**, 2409 (1992). Citado na página 73.

191 B.E.Allman *et al.*, Physical Review Letters **70**, 250 (1993). Citado na página **73**.

192 C.C.Gerry e V.A.Singh, Physical Review D 20, 2550 (1979). Citado na página 73.

193 M.V.Berry, European Journal of Physics 1, 240 (1980). Citado na página 73.

194 X.Zhu e W.C.Henneberger, Journal of Physics A: Mathematical and General 23, 3983 (1990). Citado na página 73.

195 N.Osakabe et al., Physical Review A 34, 815 (1986). Citado na página 73.

196 A.Tonomura et al., Physical Review Letters 48, 1443 (1982). Citado na página 73.

197 A.Tonomura et al., Physical Review Letters 56, 792 (1986). Citado na página 73.

198 M.Ballesteros e R.Weder, Journal of Mathematical Physics **50**, 122108 (2009). Citado na página 73.

- 199 R.B.Laughlin, Physical Review Letters 50, 1395 (1983). Citado na página 75.
- 200 R.A.Webb et al., Physical Review Letters 54, 2696 (1985). Citado na página 75.
- 201 M.Bayer et al., Physical Review Letters 90, 186801 (2003). Citado na página 75.
- 202 S.Russo et al., Physical Review B 77, 085413 (2008). Citado na página 75.
- 203 M.Huefner et al., New Journal of Physics 12, 043054 (2010). Citado na página 75.
- 204 P.Recher et al., Physical Review B 76, 235404 (2007). Citado na página 75.

205 L.L.Li, D.Moldovan, P.Vasilopoulos e F.M.Peeters, Physical Review B 95, 205426 (2017). Citado na página 75.

206 J.J.Sakurai e J. Napolitano, *Mecânica Quântica Moderna* (Editora Bookman, Porto Alegre, 2013) 2^a ed. Citado 4 vezes nas páginas 76, 104, 107 e 108.

207 D.A.Lima, C.C.Favarato, S.V.B.Gonçalves e G.Simonelli, Brazilian Journal of Physics **49**, 301-313 (2019). Citado na página 73.

208 F.K.Wilhelm *et al.*, *Decoherence of Flux Qubits Coupled to Electronic Circuits*, Advances in Solid State Physics **7023**, 763 (2003). Citado na página 85.

209 L.Tian et al., Decoherence of the Superconducting Persistent Current Qubit,
Quantum Mesoscopic Phenomena and Mesoscopic Devices in Microelectronics -, 429
(2000). Citado na página 85.

210 J.R.Friedman *et al.*, Nature **406**, 43 (2000). Citado na página 85.

211 C.H.Van der Wal et al., Science 290, 773 (2000). Citado na página 85.

212 V.V.Aristov e A.V.Nikulov, *Quantum Informatics 2007*, International Society for Optics and Photonics **7023**, 702302 (2008). Citado na página 85.

213 J.E.Mooij et al., Science 285, 1036 (1999). Citado na página 85.

214 T.P.Orlando *et al.*, Physica C: Superconductivity **372**, 194 (2002). Citado na página 85.

215 T.P.Orlando *et al.*, Physica C: Superconductivity **368**, 294 (2002). Citado na página 85.

216 T.P.Orlando et al., Physical Review B 60, 15398 (1999). Citado na página 85.

- 217 D.H.Kobe, American Journal of Physics 48, 456 (1980). Citado na página 86.
- 218 T.H.Boyer, Physical Review D 8, 1679 (1973). Citado na página 78.
- 219 P.Choi *et al.*, Review of Scientific Instruments 73, 2276 (2002). Citado na página 107.
- 220 H.Shi et al., Optics express 13, 6815 (2005). Citado na página 109.
- 221 H.Yanagisawa et al., Scientific Reports 7, 12661 (2017). Citado na página 109.
- 222 Q.Chen *et al.*, Nanotechnology **29**, 085301 (2018). Citado na página 109.
- 223 T.W.Ebbesen et al., Nature **391**, 667 (1998). Citado na página 109.
- 224 M.Verma *et al.*, Journal of the Optical Society of America A **29**, 195 (2012). Citado na página 109.
- 225 S.You, C.Kuang e B.Zhang, Scientific Reports **6**, 33764 (2016). Citado na página 109.