Mecânica Quântica

Carlos Eduardo Aguiar

Programa de Pós-Graduação em Ensino de Física
Instituto de Física - UFRJ

1º período letivo de 2009

Plano do curso

1. A física clássica em dificuldades.
2. Os princípios da mecânica quântica: sistemas de dois estados.
3. Sistemas de dois estados: aplicações.
4. Sistemas de N estados.
5. Partículas idênticas.
6. Simetrias.
7. Posição e momentum.
8. Equação de Schroedinger em 1 dimensão: aplicações.
9. A soma sobre caminhos.

Leituras recomendadas

- M. Le Bellac, *Quantum Physics*, Cambridge, 2006.
- H.M. Nussenzveig, *Curso de Física Básica: Ótica, Relatividade, Física Quântica*, Blucher, 2002.
- R.P. Feynman, *Lições de Física de Feynman*, vol. III, Bookman, 2008.
- R.P. Feynman, R.B. Leighton, M. Sands, *QED - A estranha teoria da luz e da matéria*, Gradiva, 1988.
- T.F. Jordan, *Quantum Mechanics in Simple Matrix Form*, Dover, 2005.
- D.F. Styer, *The Strange World of Quantum Mechanics*, Cambridge, 2000.
- J.S. Townsend, *A Modern Approach to Quantum Mechanics*, USB, 2000.
- O. Pessoa Jr, *Conceitos de Física Quântica*, Livraria da Física, 2003.
- A. Zeilinger, *A Face Oculta da Natureza*, Globo, 2005.

Sobre o ensino de mecânica quântica:

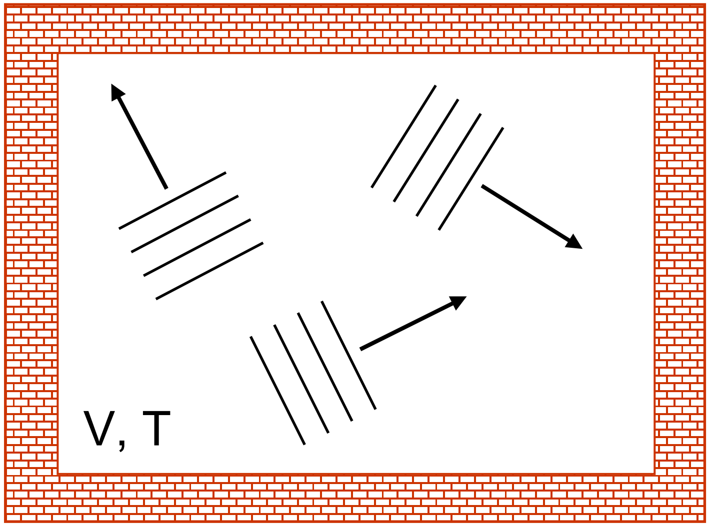
- M. A. Moreira, I. M. Greca, *Uma revisão da literatura sobre estudos relativos ao ensino da mecânica quântica introdutória*, Investigações em Ensino de Ciências, 6 (2001) 29-56.
- I. M. Greca, M. A. Moreira, V.E. Herscovitz, *Uma proposta para o ensino de mecânica quântica*, Revista Brasileira de Ensino de Física, 33 (2001) 444.
- R. Müller, H. Wiesner, *Teaching quantum mechanics on an introductory level*, American Journal of Physics 70 (2002) 200; 70 (2002) 887.
- I. D. Johnston, K. Crawford, P. R. Fletcher, *Student difficulties in learning quantum mechanics*, International Journal of Science Education 20 (1998) 427-446.
- I. M. Greca, O. Freire Jr, *Does an Emphasis on the Concept of Quantum States Enhance Students' Understanding of Quantum Mechanics?*, Science & Education 12 (2003) 541–557.
- D. F. Styer, *Common Misconceptions Regarding Quantum Mechanics*, American Journal of Physics 64 (1996) 31-34.
- C. R. Rocha, V. E. Herscovitz, M. A. Moreira, *O Ensino de Mecânica Quântica sob a Perspectiva dos Referenciais Teóricos da Aprendizagem Significativa e dos Campos Conceituais*, Anais do XVIII SNEF (2009).
- L. D. Carr, S. B. McKagan, Graduate Quantum Mechanics Reform, arxiv.org: 0806.2628

A física clássica em dificuldades

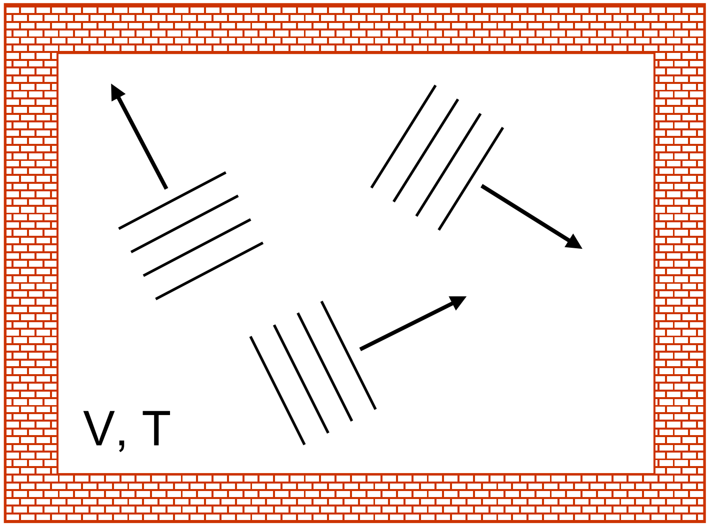
Charles Addams, New Yorker, 1940

Radiação térmica

- Um recipiente onde foi feito vácuo não está inteiramente vazio: ele ainda contém *ondas eletromagnéticas*, emitidas e absorvidas pelas paredes.



Radiação em equilíbrio térmico



Lei de Stefan-Boltzmann

densidade de energia: $u = U / V = a\,T^4$

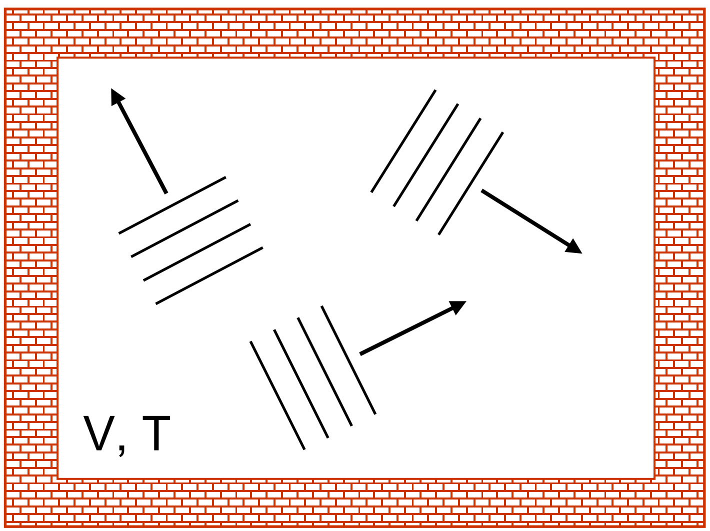
calor específico: $c_V = C_V / V = 4\,a\,T^3$

Valor medido da *constante de radiação*:
$a = (7{,}565 \pm 0{,}001) \times 10^{-16}$ J/m^3/K^4

O calor específico do “vácuo”

Segundo a física clássica:

onda estacionária ↔ oscilador harmônico: $E = \frac{1}{2}V^2 + \frac{1}{2}\omega^2 X^2$



teorema da equipartição: $\boxed{\frac{1}{2}kT}$

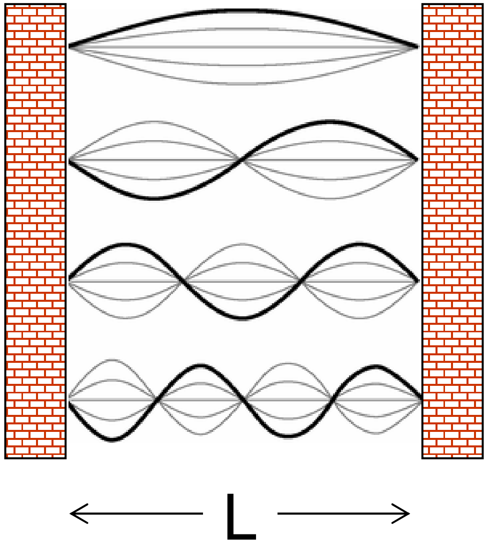
energia média: $\overline{E} = kT$

energia total: $U = NkT$

capacidade térmica: $C_V = Nk$

número de ondas estacionárias: $\boxed{N = ?}$

O calor específico do vácuo



Em 1 dimensão:

$$L = n\frac{\lambda}{2}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

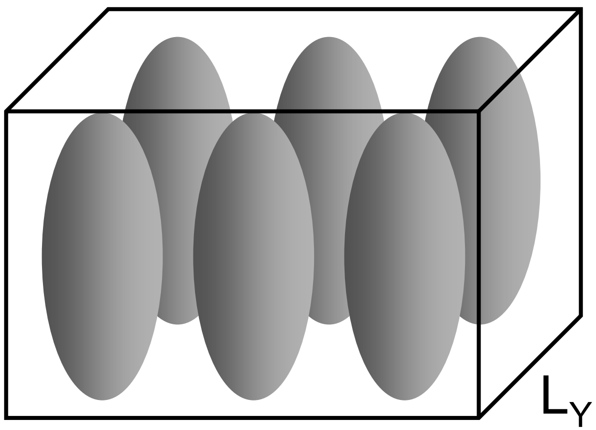
O número de ondas estacionárias na caixa é infinito ($N = \infty$).

$$C_V = NkT = \infty$$

Segundo a física clássica, o calor específico do vácuo é infinito!

O calor específico do vácuo

Em 3 dimensões a situação é ainda pior:



$$L_x = n_x \frac{\lambda_x}{2}, \quad n_x = 1, 2, 3, \ldots$$

$$L_y = n_y \frac{\lambda_y}{2}, \quad n_y = 1, 2, 3, \ldots$$

$$L_z = n_z \frac{\lambda_z}{2}, \quad n_z = 1, 2, 3, \ldots$$

O número de ondas estacionárias na caixa tridimensional é infinito.

$$C_V = NkT = \infty$$

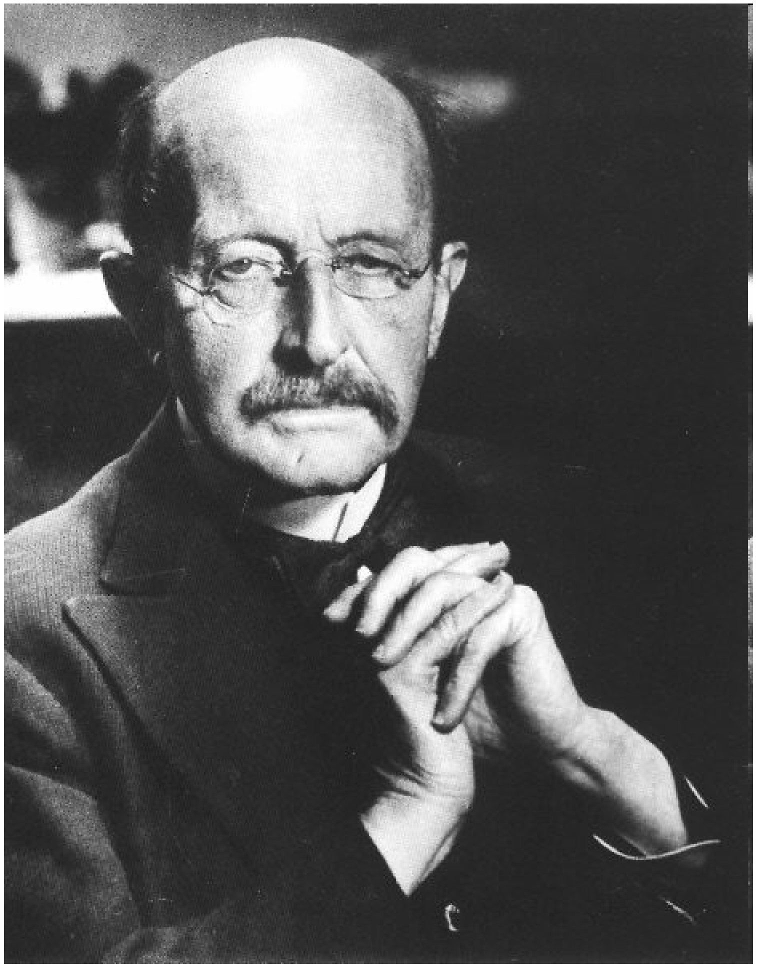
Em suma:

- Segundo a física clássica, o calor específico da radiação eletromagnética confinada em uma caixa é infinito.

- É impossível haver equilíbrio térmico entra as paredes da caixa e a radiação no seu interior.

- A física clássica não entende uma caixa vazia.

Quantização da energia



Max Planck: the reluctant revolutionary

Helge Kragh, Physics World (Dec. 2000)
http://physicsworld.com/cws/article/print/373

O quantum de Planck

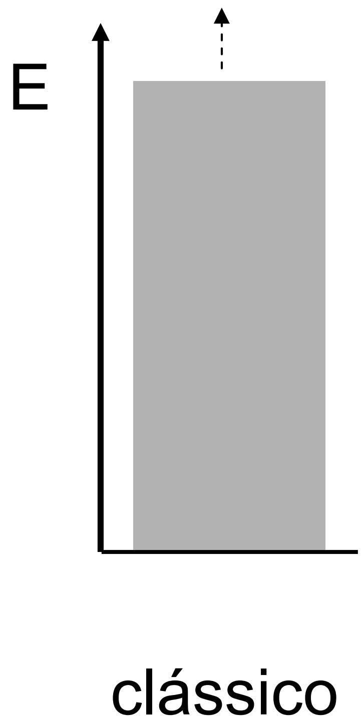
Um oscilador harmônico de freqüência ν pode ter apenas as energias

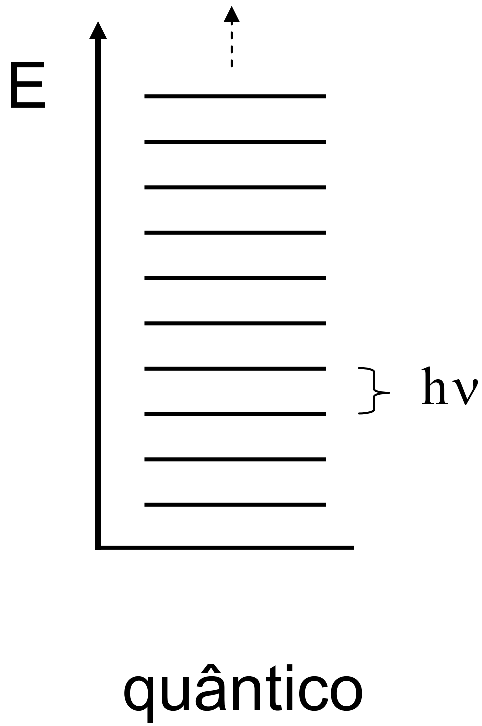
$$E = n\,h\nu\,, \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

$h\nu$ = *quantum* de energia

h = *constante de Planck* = $6{,}626069 \times 10^{-34}$ Js

O quantum de Planck





h-cortado

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1{,}054\,571\,6 \times 10^{-34}\ \text{Js}$$ (constante de Planck reduzida)

$$\omega = 2\pi\,\nu \quad \Rightarrow \quad \hbar\omega = h\nu$$

freqüência angular do oscilador

Energia média do oscilador de Planck

Oscilador em equilíbrio térmico com um corpo de temperatura T:

$\boxed{\text{Distribuição de Boltzmann:}}$ $$P(E) \propto \exp(-E / kT)$$

$\boxed{\text{Energia média:}}$ $$\overline{E} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} E_n \exp(-E_n / kT)}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-E_n / kT)}$$

Cálculo da energia média

$$\overline{E} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} E_n \exp(-E_n / kT)}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-E_n / kT)}$$

$$X = \exp(-h\nu / kT)$$

$$\overline{E} = h\nu \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n\, X^n}{\sum_{n=0}^{\infty} X^n} = h\nu \frac{X \sum_{n=0}^{\infty} n\, X^{n-1}}{\sum_{n=0}^{\infty} X^n} = h\nu X \frac{\frac{d}{dX} \sum_{n=0}^{\infty} X^n}{\sum_{n=0}^{\infty} X^n} = h\nu X \frac{1/(1-X)^2}{1/(1-X)} = h\nu \frac{X}{1-X}$$

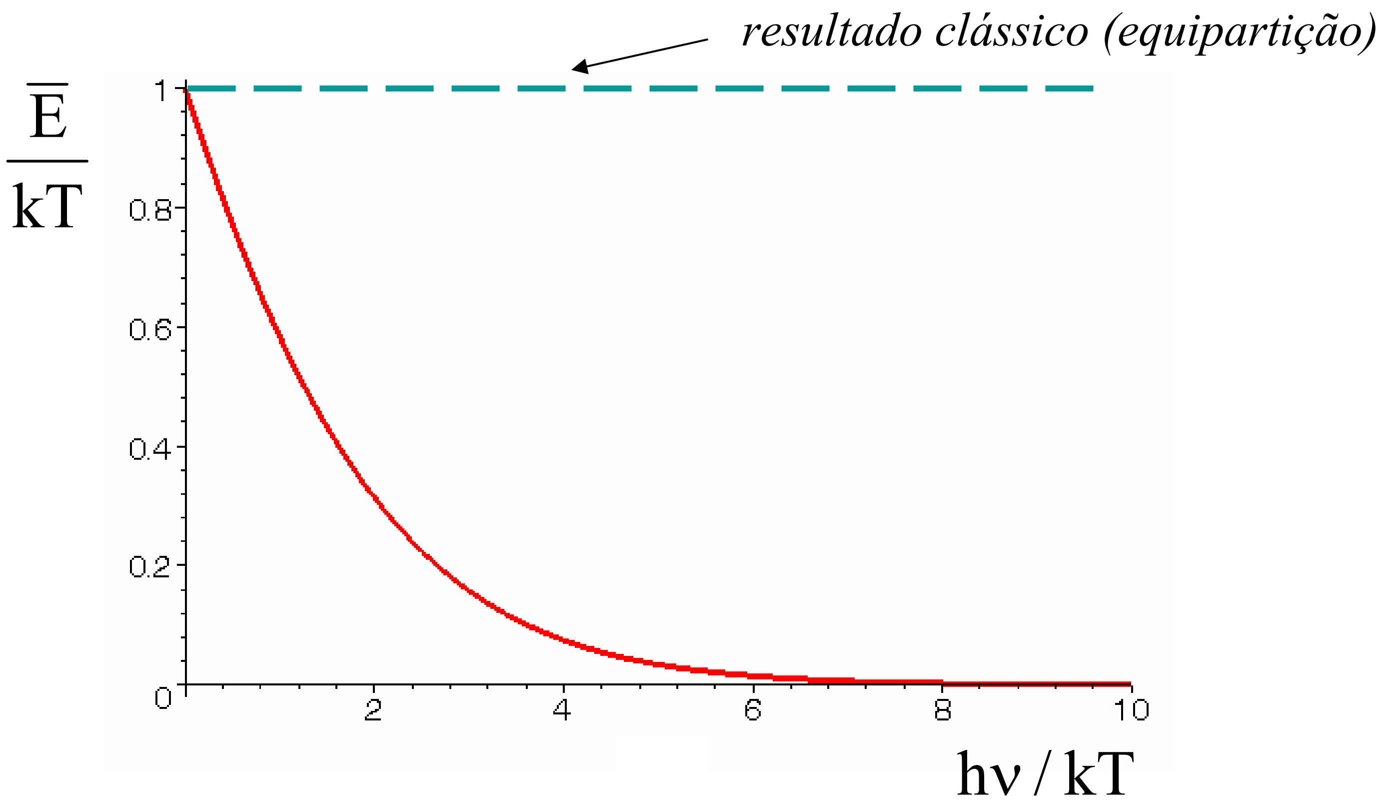
Energia média do oscilador de Planck

$$\boxed{\overline{E} = \frac{h\nu}{\exp(h\nu / kT) - 1}}$$

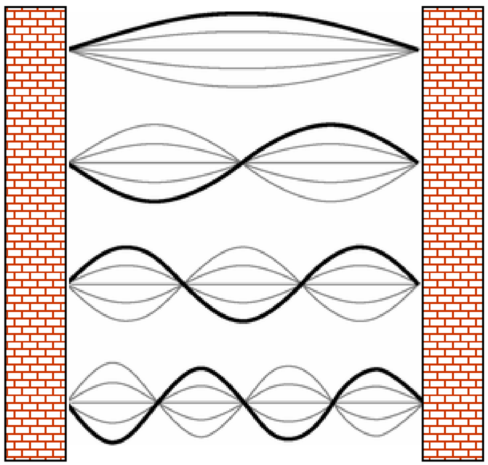
$h\nu << kT \quad \Rightarrow \quad \overline{E} = kT$ (resultado clássico – teorema da equipartição)

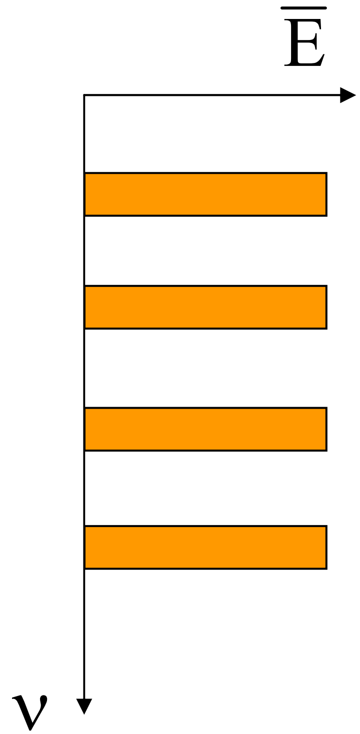
$h\nu >> kT \quad \Rightarrow \quad \overline{E} = 0$ (oscilador "congelado" em E = 0)

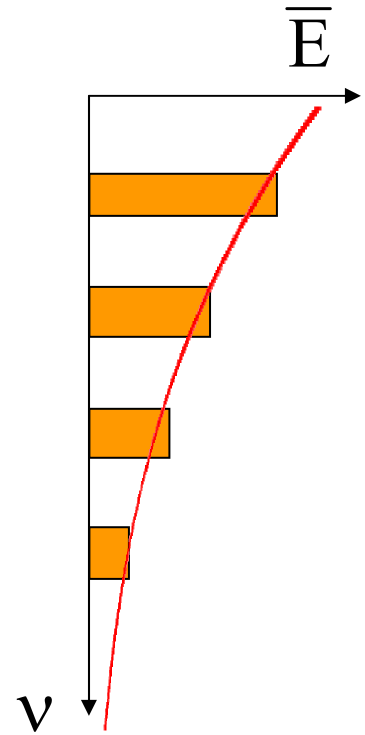
Energia média do oscilador de Planck



O calor específico do vácuo







clássico:
u e c_V infinitos

quântico:
u e c_V finitos

O calor específico do vácuo

$$U = \int_0^\infty \overline{E}(\nu, T)\, n(\nu)\, d\nu$$

energia média de uma onda com freqüência ν

número de ondas com freqüência entre ν e ν+dν

$$\overline{E} = \frac{h\nu}{\exp(h\nu / kT) - 1}$$

$$n(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} V$$

O calor específico do vácuo

$$u = \frac{8\pi h}{c^3}\int_0^\infty \frac{\nu^3}{\exp(h\nu / kT) - 1}\, d\nu$$
$$= \frac{8\pi h}{c^3}\left(\frac{kT}{h}\right)^4 \int_0^\infty \frac{s^3}{\exp(s) - 1}\, ds$$
$$= aT^4$$

$$c_V = 4aT^3$$

$$a = \frac{8\pi^5 k^4}{15(hc)^3}$$
$$= (7{,}5657 \pm 0{,}0005) \times 10^{-16}\ \mathrm{J/m^3/K^4}$$

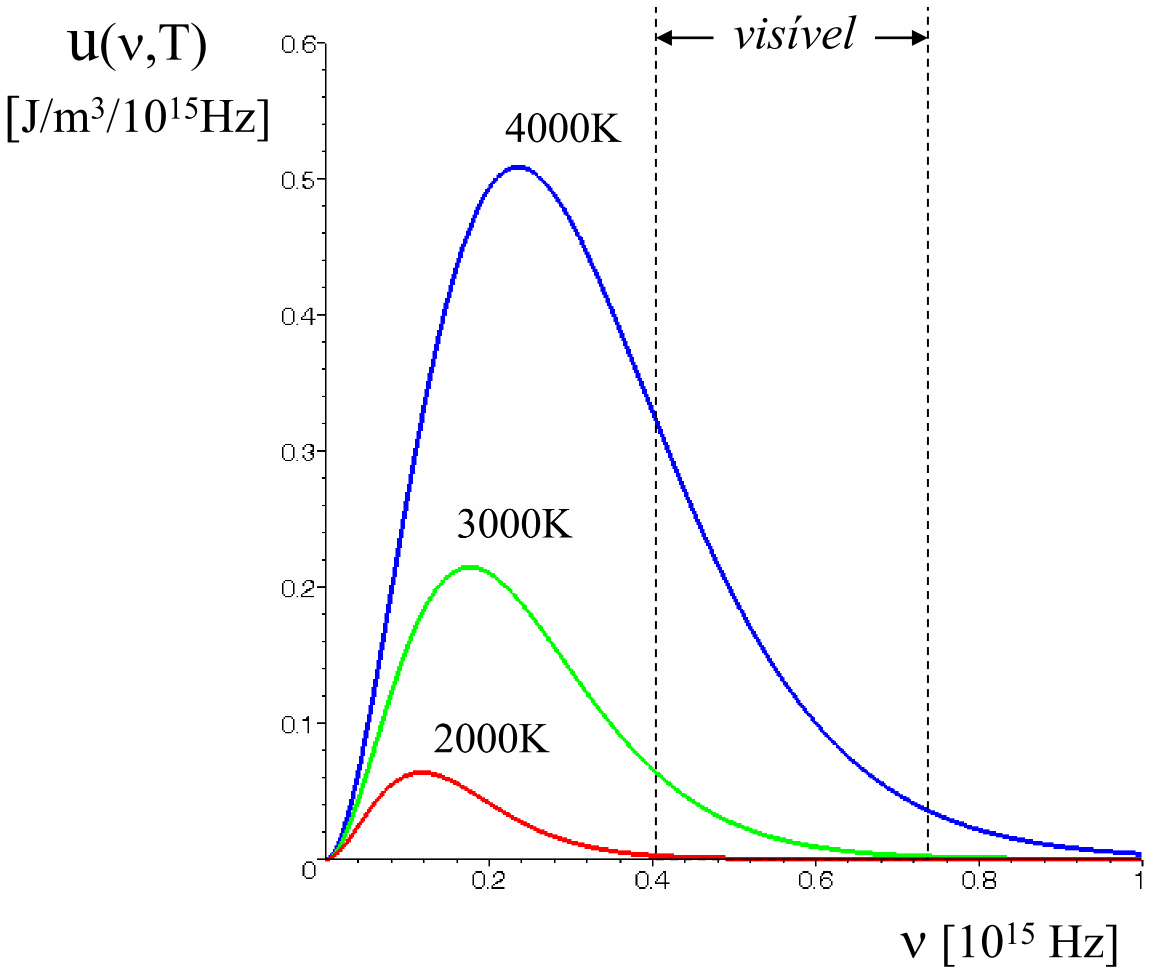
$$a_{exp} = (7{,}565 \pm 0{,}001) \times 10^{-16}\ \mathrm{J/m^3/K^4}$$

O espectro de Planck

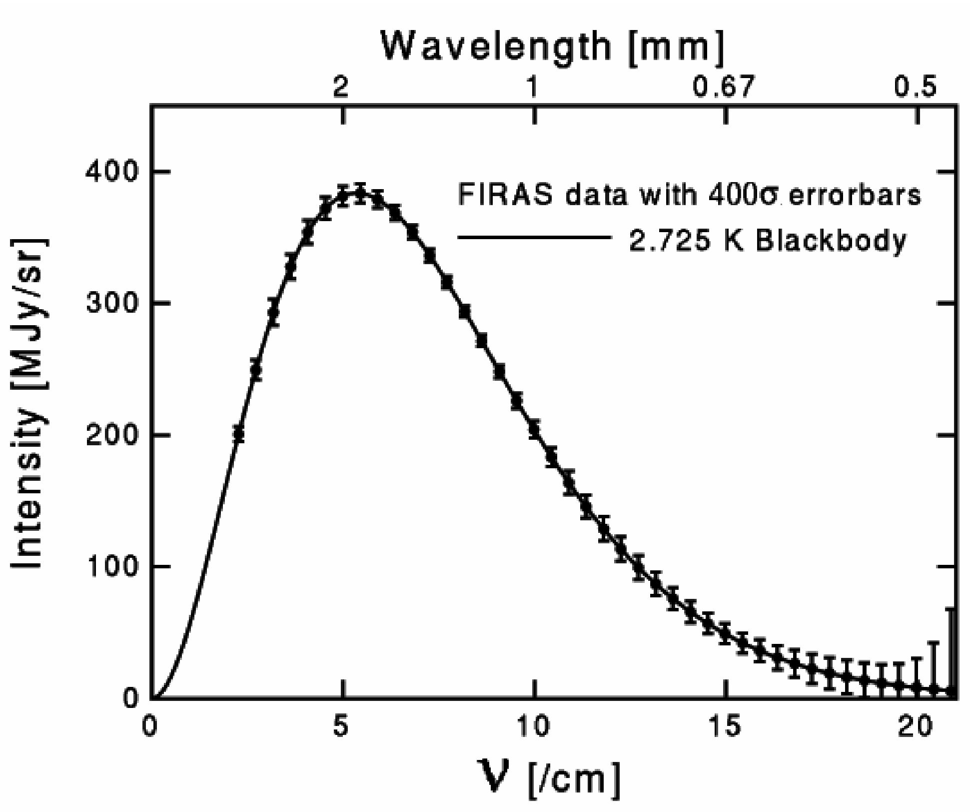
$$u(\nu, T) = \frac{\overline{E}(\nu, T)\, n(\nu)}{V}$$

$$\boxed{u(\nu, T) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{\exp(h\nu / kT) - 1}}$$

O espectro de Planck

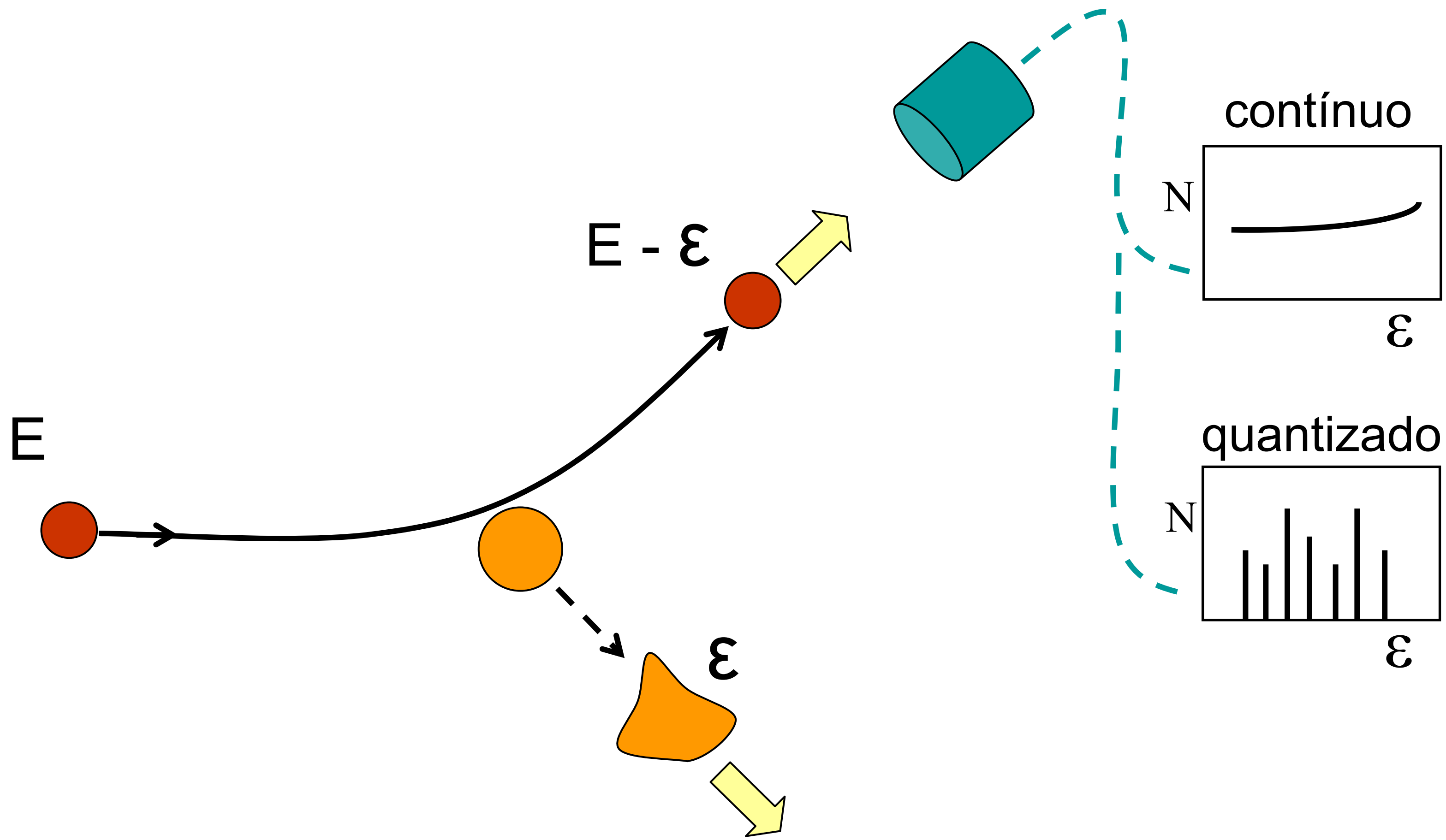


Radiação cósmica de fundo



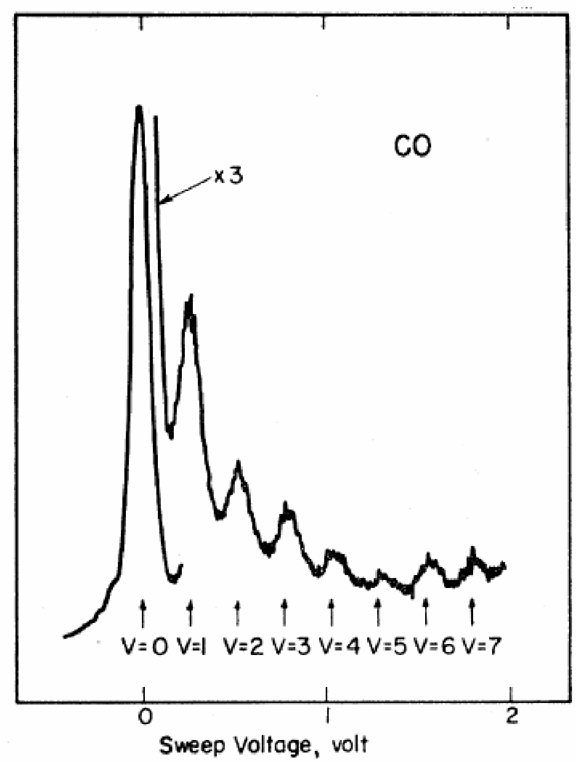
Dados do satélite Cobe

Evidências diretas da quantização da energia: espalhamento inelástico



Espalhamento inelástico pela molécula de CO

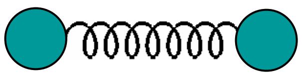
e + CO



G. J. Schulz, *Vibrational Excitation of N2, CO, and H2 by Electron Impact*, Phys. Rev. 135, A988 (1964)

Espalhamento inelástico por moléculas de hidrogênio

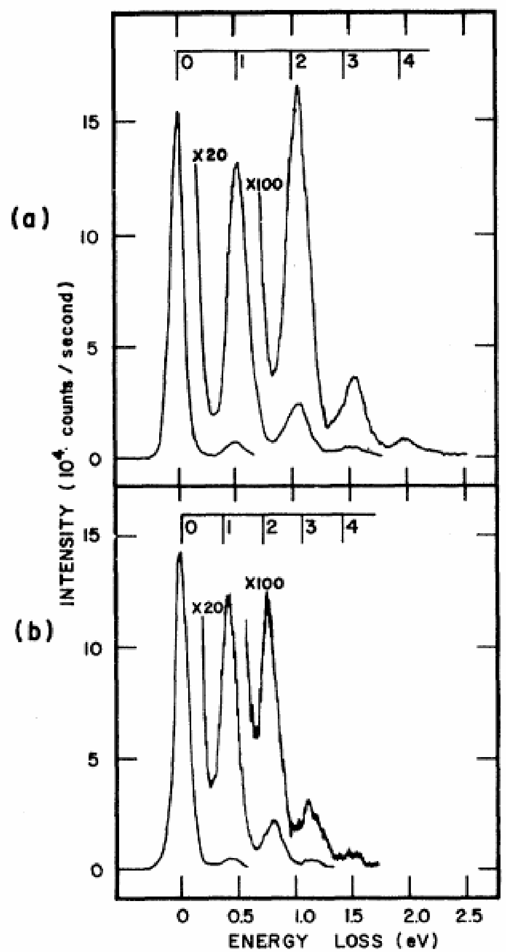
$p + H_2$



m k m

$p + D_2$

2m k 2m



$$\omega = \sqrt{k/m}$$

$$\frac{\omega(D_2)}{\omega(H_2)} = \sqrt{\frac{m(H)}{m(D)}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \approx 0{,}7$$

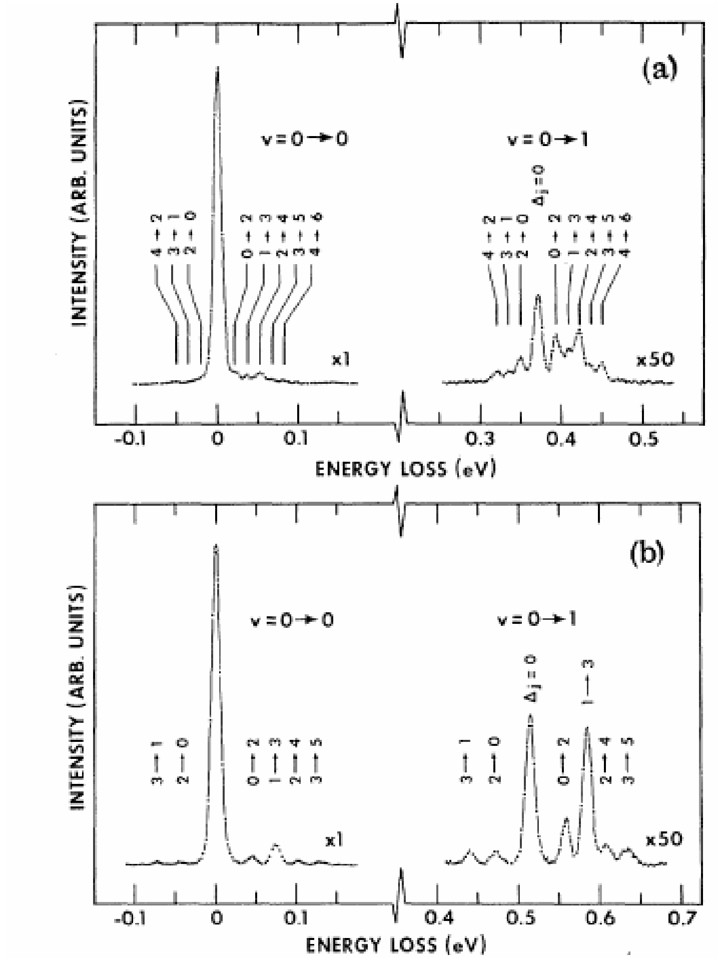
$$\frac{\Delta E\,(D_2)}{\Delta E\,(H_2)} \approx 0{,}8$$

J.H. Moore and J.P. Doering, *Ion-Impact Excitation of Pure Vibrational Transitions in Diatomic Molecules*, Phys. Rev. Lett. 23 564 (1969)

Espalhamento inelástico por moléculas de hidrogênio

$e + D_2$

$e + H_2$

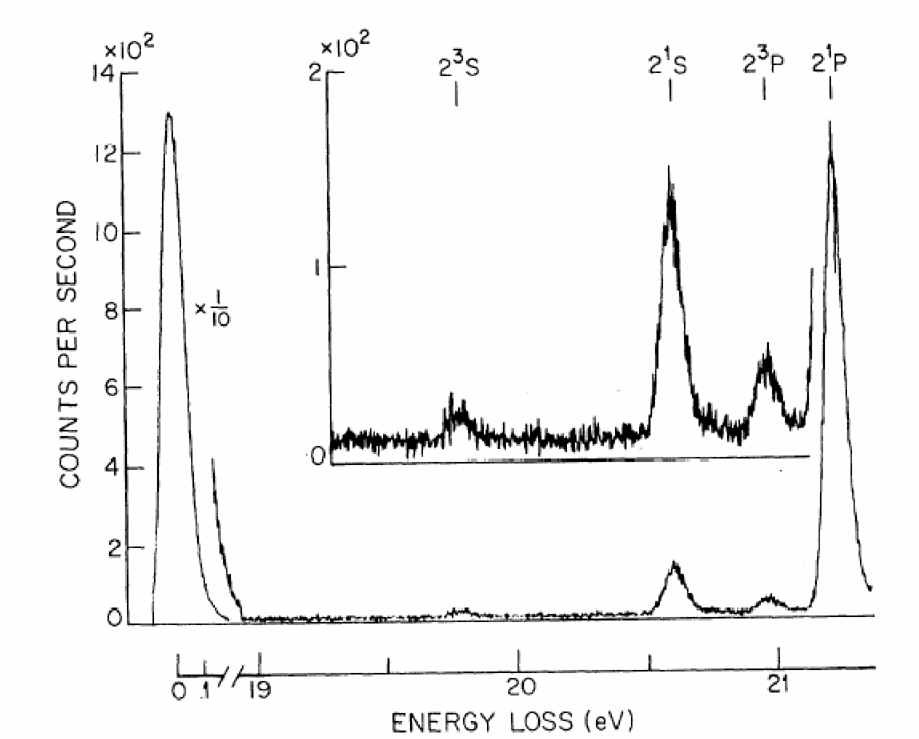


a energia de rotação também é quantizada

E.S. Chang, S-F. Wong, *Isotope Effects in Molecular Scattering by Electrons*, Phys. Rev. Lett. 38, 1327 (1977)

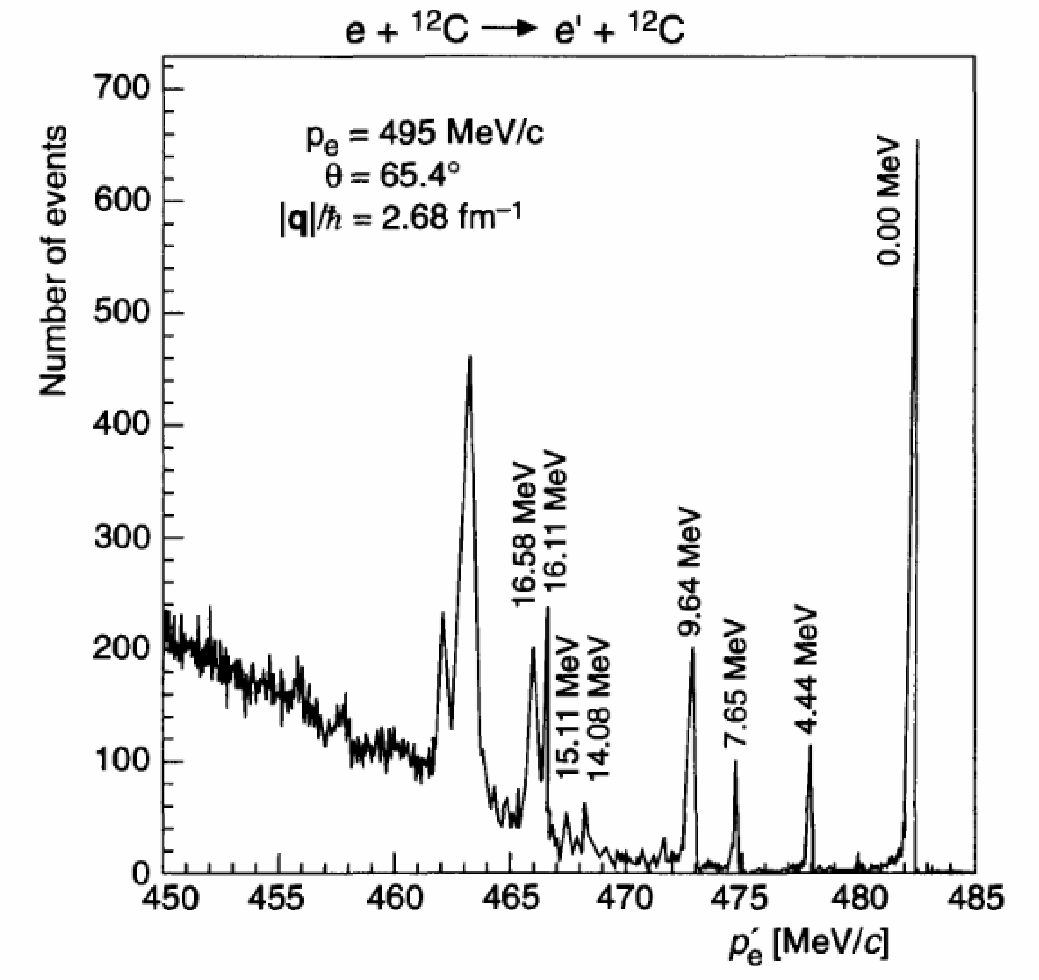
Espalhamento inelástico pelo átomo de He

e + He



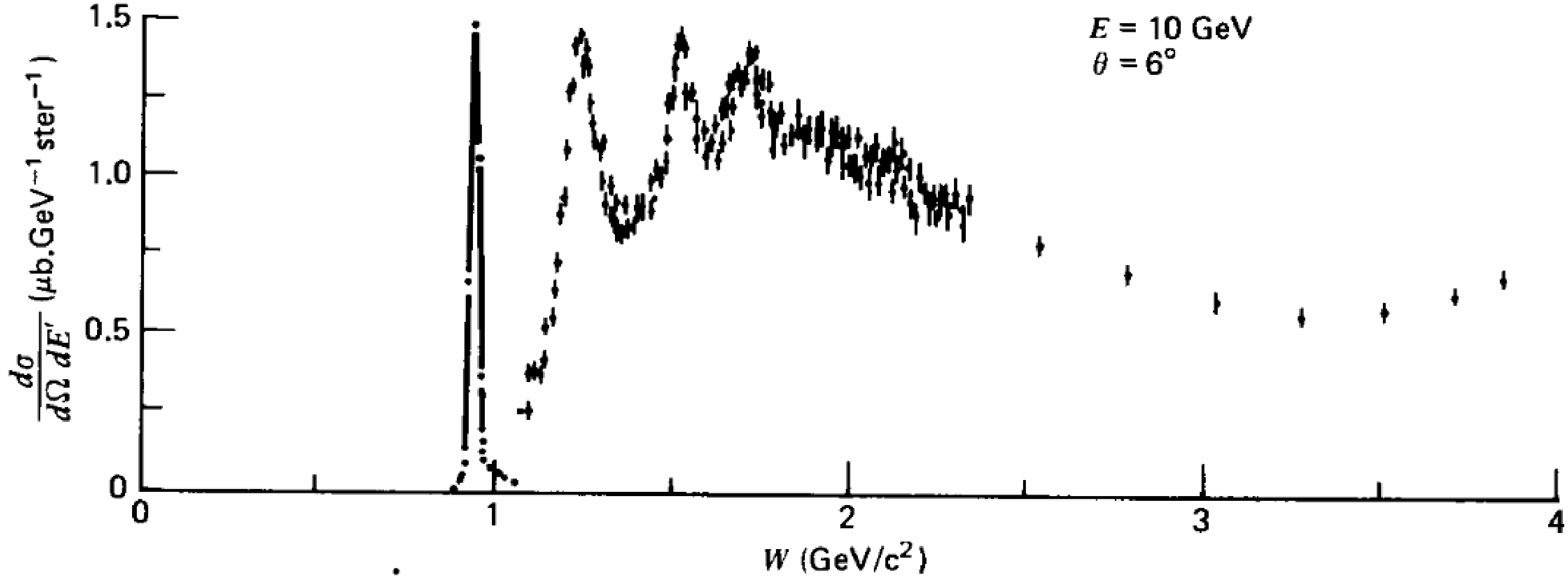
D.G. Truhlar, *Differential and Integral Cross Sections for Excitation of the 2^1P State of Helium by Electron Impact*, Phys. Rev. A 1, 778 (1970)

Espalhamento inelástico pelo núcleo de ^{12}C



B. Povh et al., *Particles and Nuclei* (Spriger, 2004) p.70

Espalhamento inelástico pelo próton



F. Halzen, A.D. Martin, Quarks and Leptons (Wiley, 1984) p.180

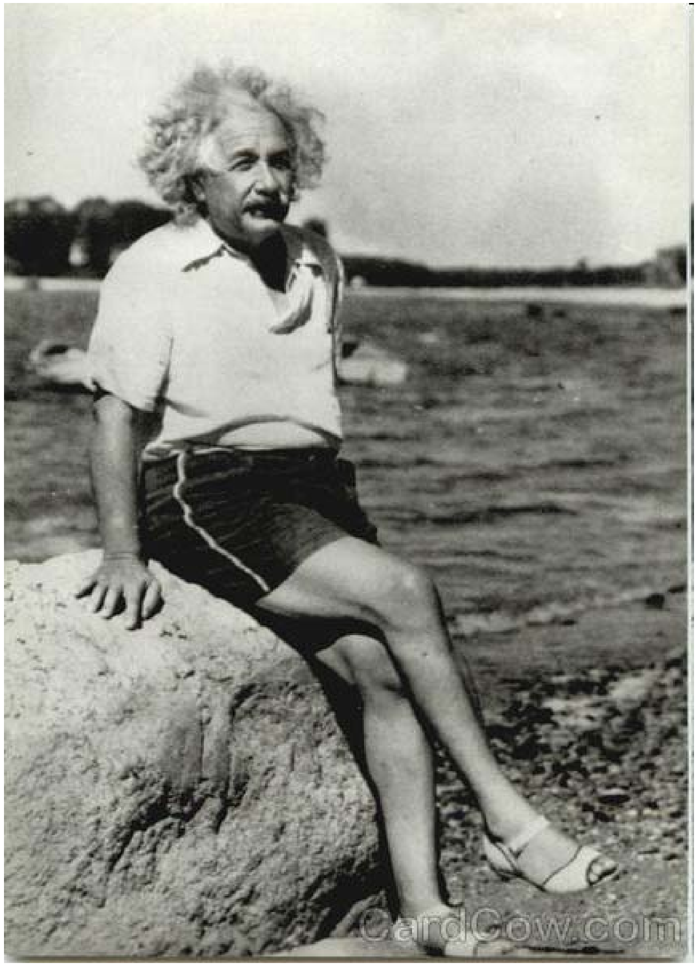
Em suma:

A energia de

- moléculas,
- átomos,
- núcleos atômicos,
- hádrons,
- ...

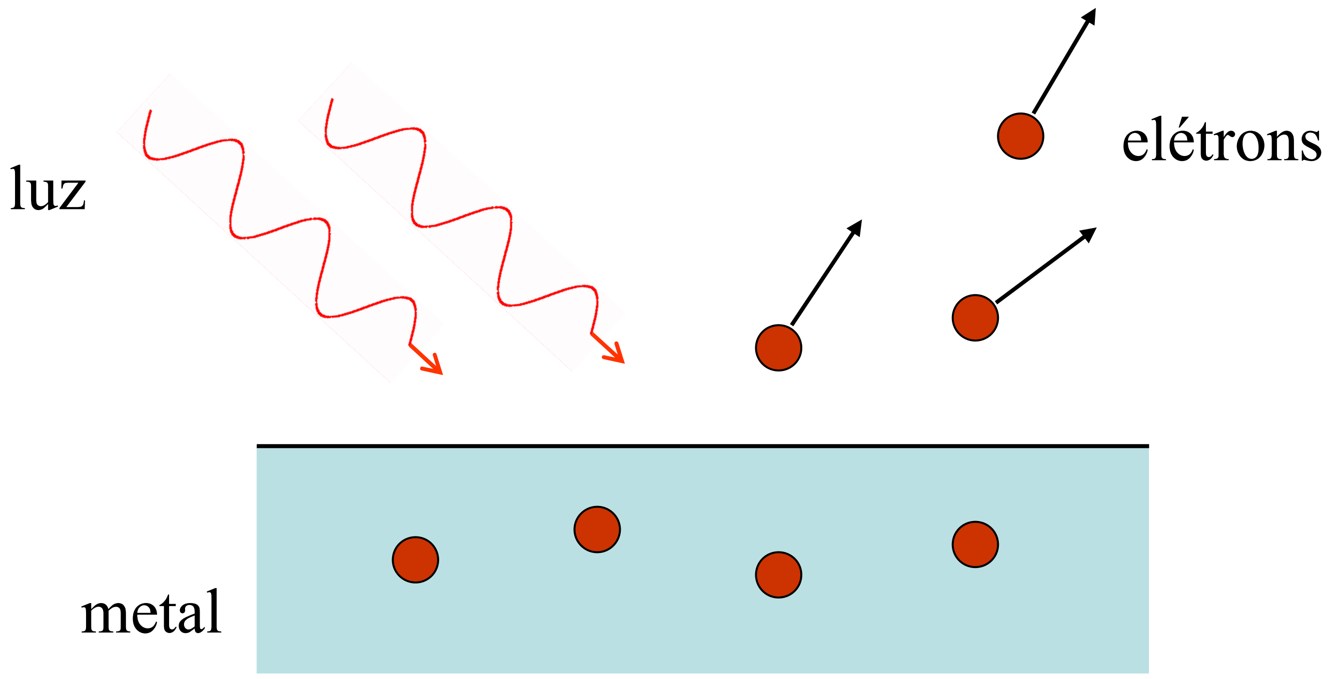
é *quantizada*.

Partículas de luz

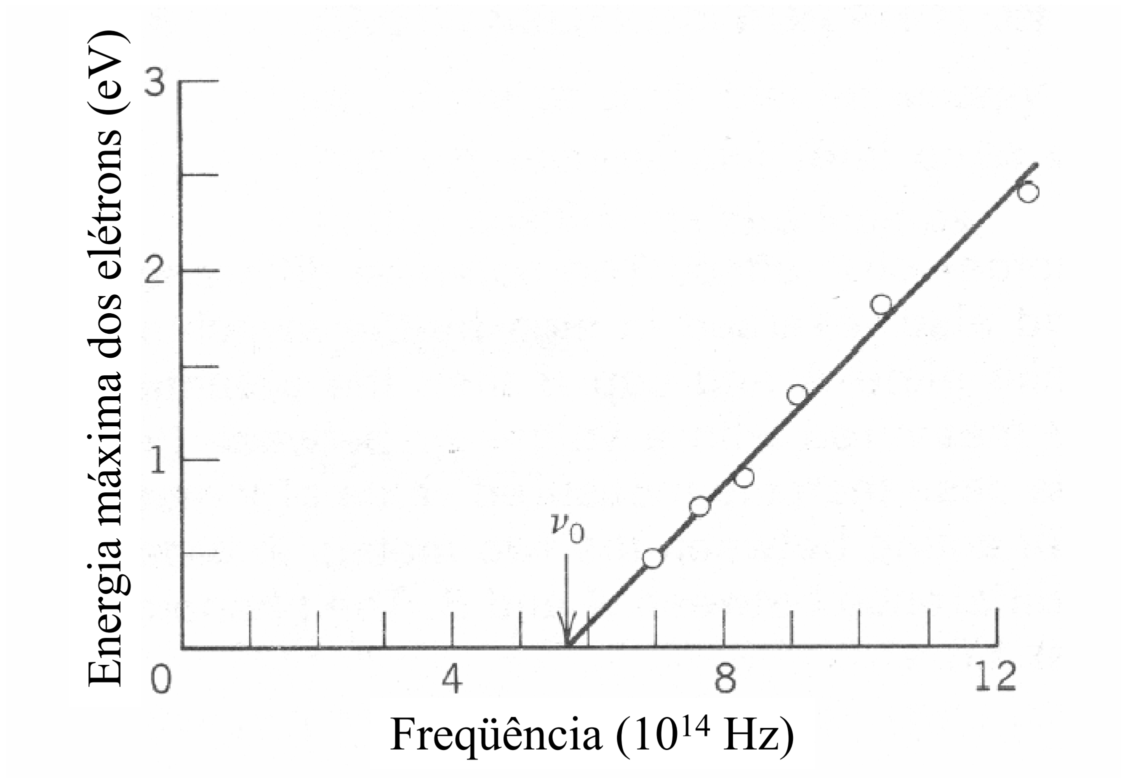


Albert Einstein

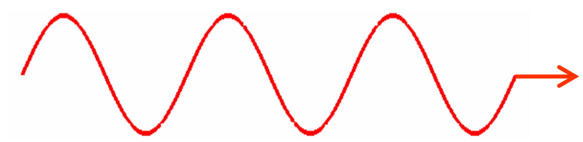
O efeito fotoelétrico



O efeito fotoelétrico

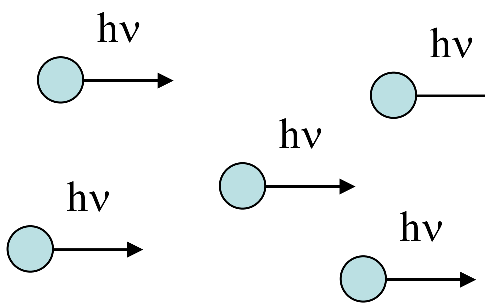


Fótons



Planck:
oscilador quantizado

$$\boxed{E = nh\nu}$$



Einstein:
n = número de fótons
$h\nu$ = energia de um fóton

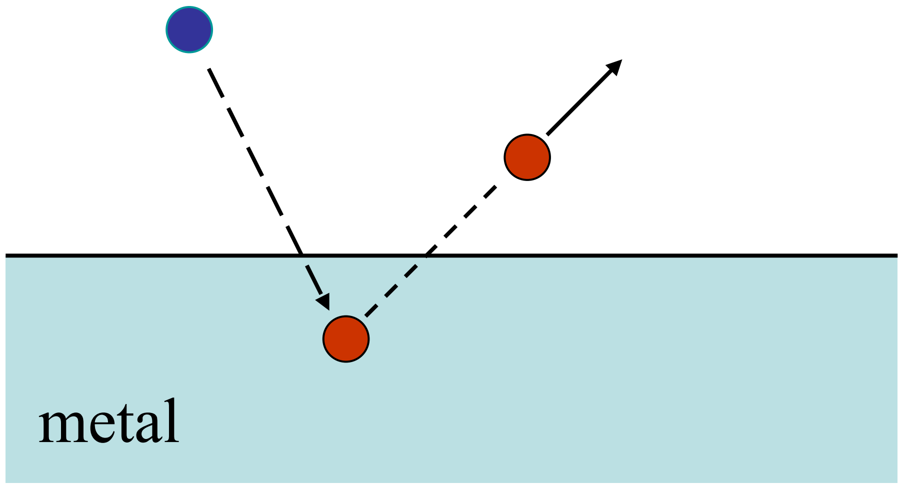
O efeito fotoelétrico

fóton:

$E = h\nu$

elétron:

$E = h\nu - \Delta$



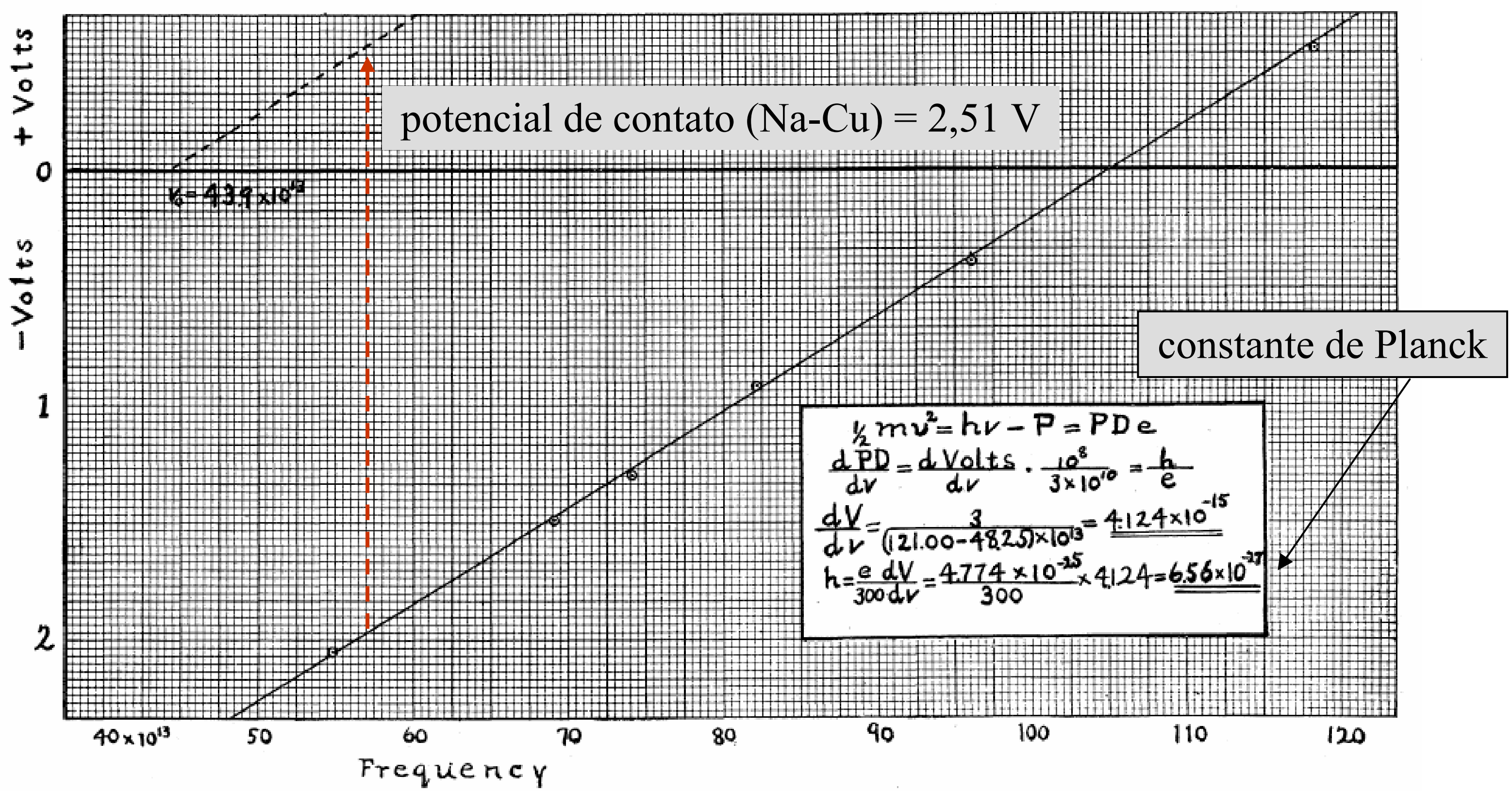
$\Delta_{min} \equiv W \leftrightarrow$ função trabalho $\Rightarrow$ $\boxed{E_{max} = h\nu - W}$

$\nu_0 = W/h =$ freqüência de corte

O efeito fotoelétrico

Sódio metálico

R.A. Millikan, *A Direct Photoelectric Determination of Planck's "h"*, Physical Review 7, 355 - 388 (1916)



Massa do fóton

$$\left.\begin{aligned} E &= \frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}} \\ p &= \frac{mv}{\sqrt{1-v^2/c^2}} \end{aligned}\right\} \qquad E^2 = c^2p^2 + m^2c^4$$

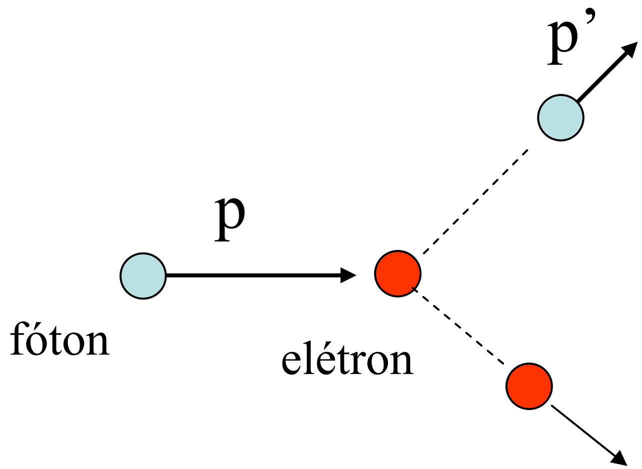
$$\boxed{v = c \quad \Rightarrow \quad m = 0 \quad \Rightarrow \quad E = cp}$$

Momentum do fóton

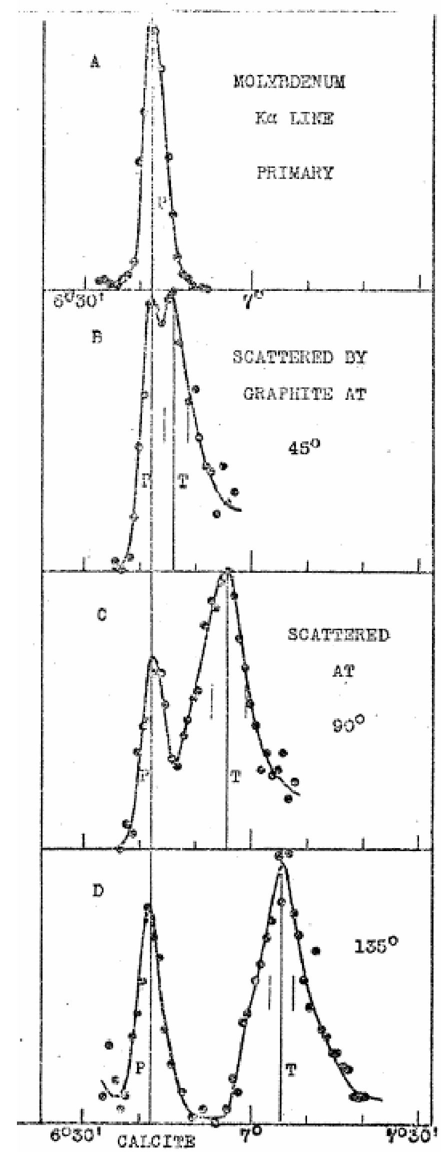
$$p = \frac{E}{c} = h\frac{\nu}{c} \quad \Rightarrow \quad \boxed{p = \frac{h}{\lambda}}$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad \Rightarrow \quad \boxed{p = \hbar k}$$

O efeito Compton

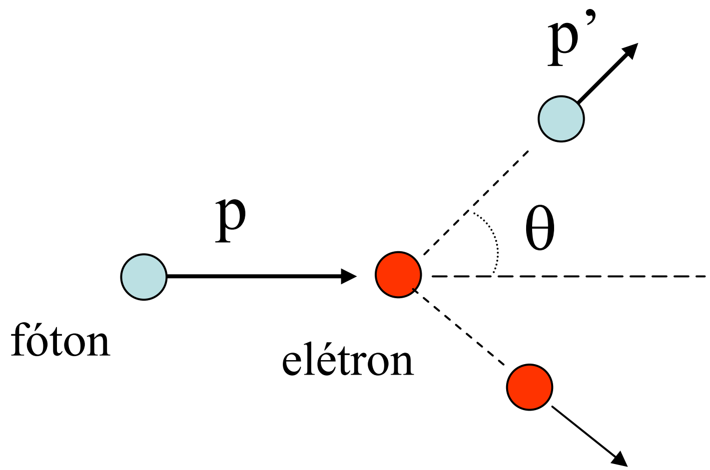


$$p' < p \quad \Rightarrow \quad \lambda' > \lambda$$



A. H. Compton, *The Spectrum of Scattered X-Rays,* Physical Review 22 409 (1923)

O efeito Compton



conservação da energia e momentum

$$\boxed{\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c}(1 - \cos\theta)}$$

$h/m_e c$ = comprimento de onda Compton = 0,024 Å

Ondas de matéria

Louis de Broglie
(Louis-Victor-Pierre-Raymond, 7º duque de Broglie)

Relações de de Broglie

Einstein
(1905)

onda eletromagnética

$$\boxed{\begin{matrix}\nu \\ \lambda\end{matrix}}$$

$\Rightarrow$

partícula

$$\boxed{\begin{aligned} E &= h\nu \\ p &= \frac{h}{\lambda}\end{aligned}}$$

de Broglie
(1923)

partícula

$$\boxed{\begin{matrix}E \\ p\end{matrix}}$$

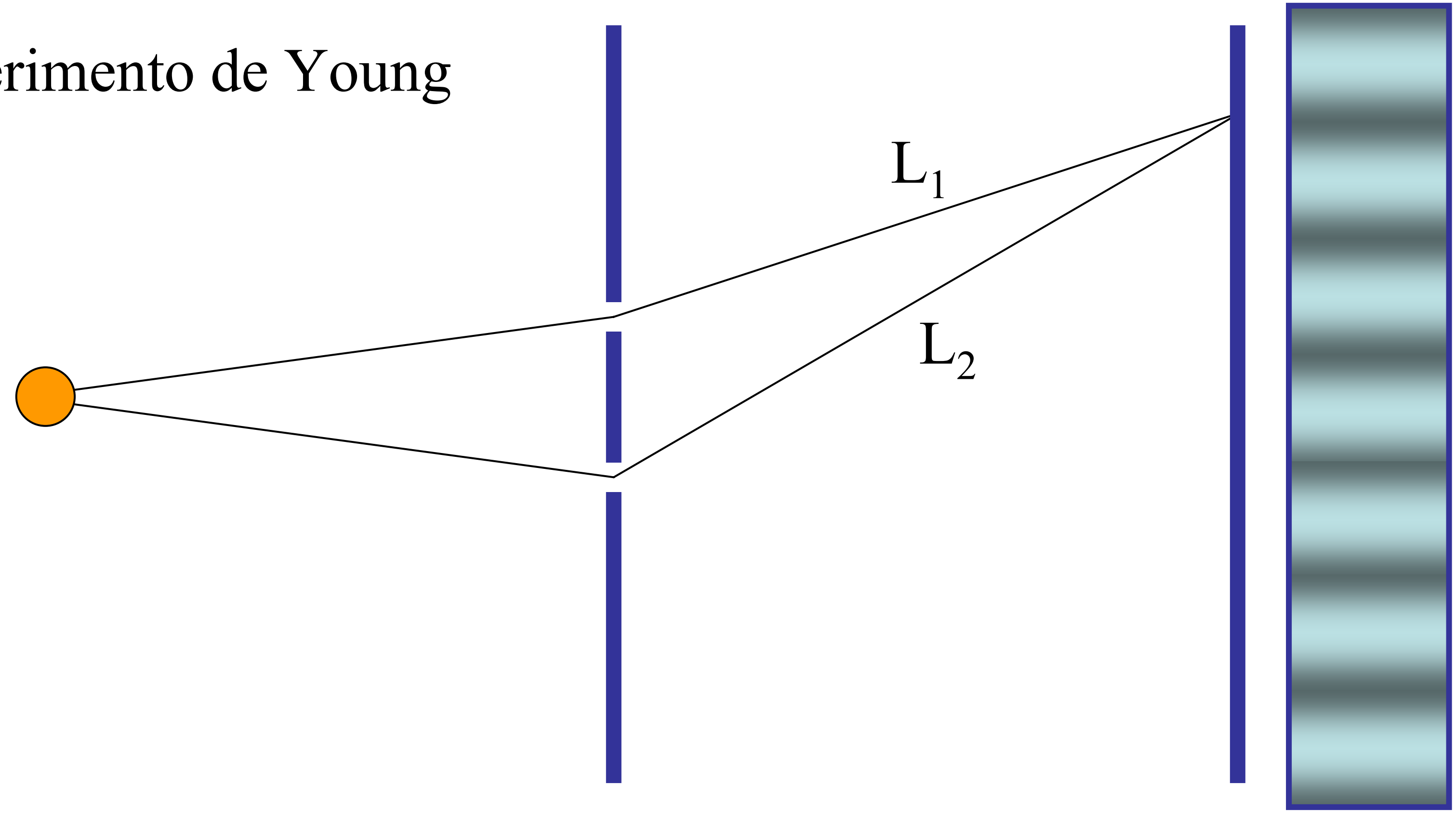
$\Rightarrow$

onda

$$\boxed{\begin{aligned} \nu &= \frac{E}{h} \\ \lambda &= \frac{h}{p}\end{aligned}}$$

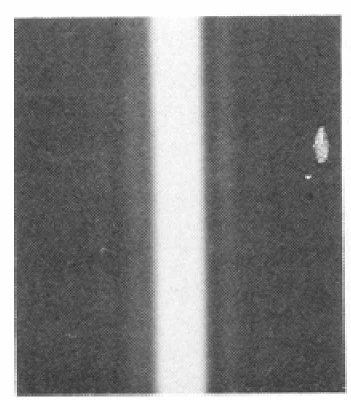
Interferência de partículas

Experimento de Young

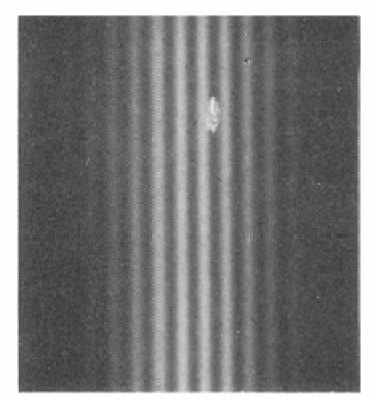


interferência construtiva: $L_1 - L_2 = n\,\lambda$

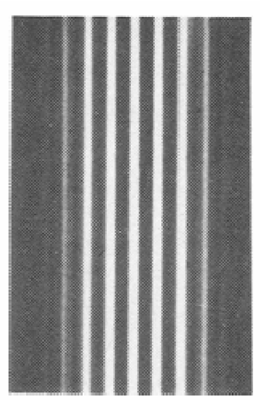
Experimento de Young: elétrons



1 fenda



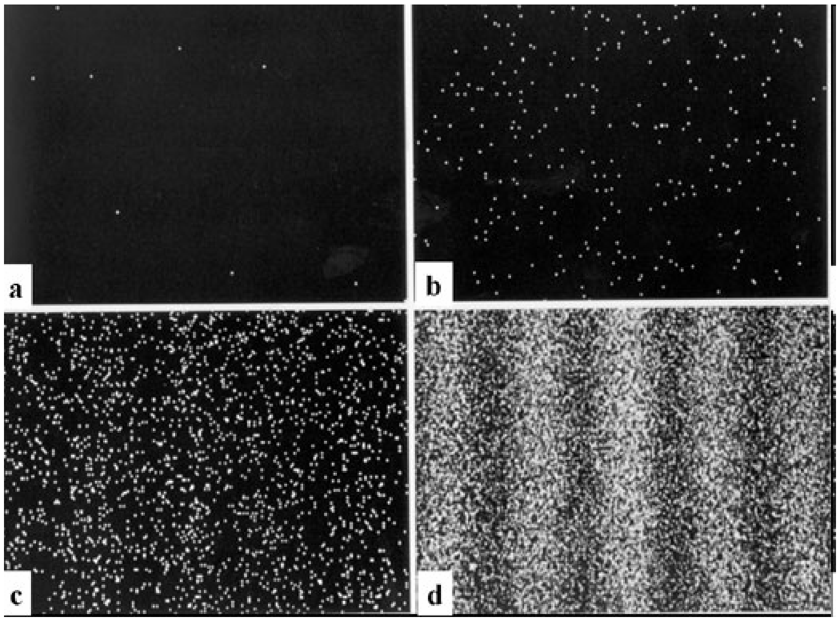
2 fendas



5 fendas

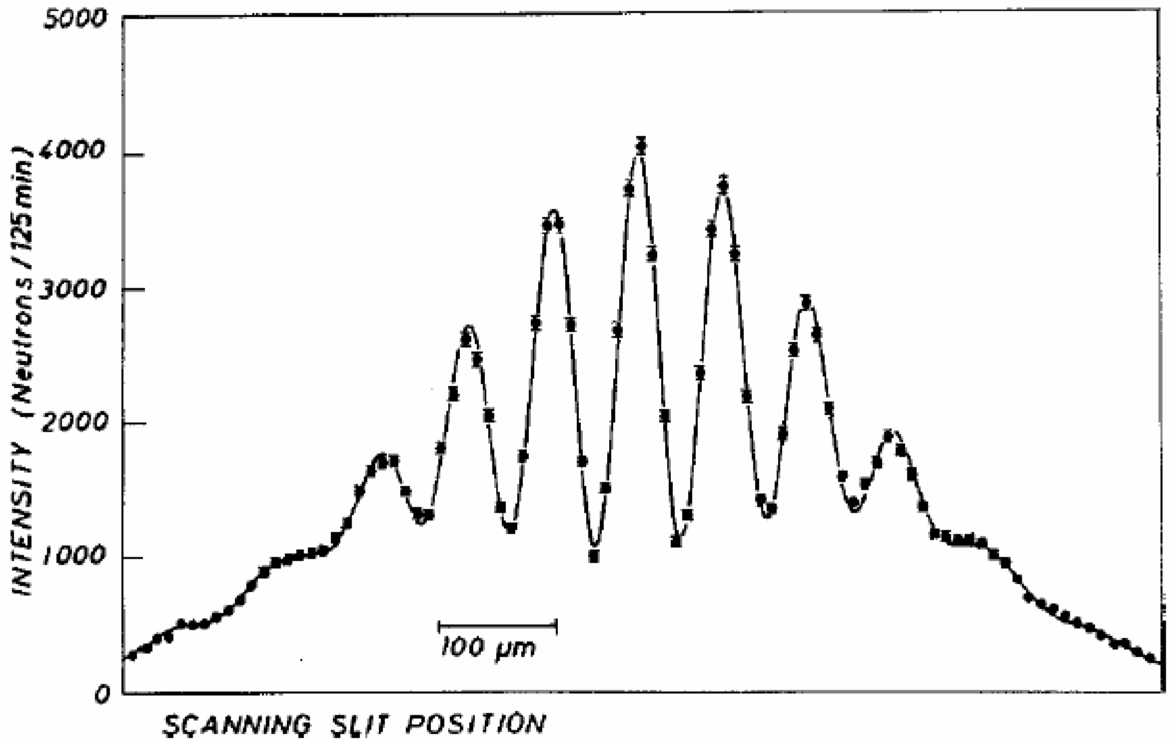
C. Jönsson, *Electron diffraction at multiple slits*, Am. J. Phys. 42, 4 (1974)

Elétrons (um a um)



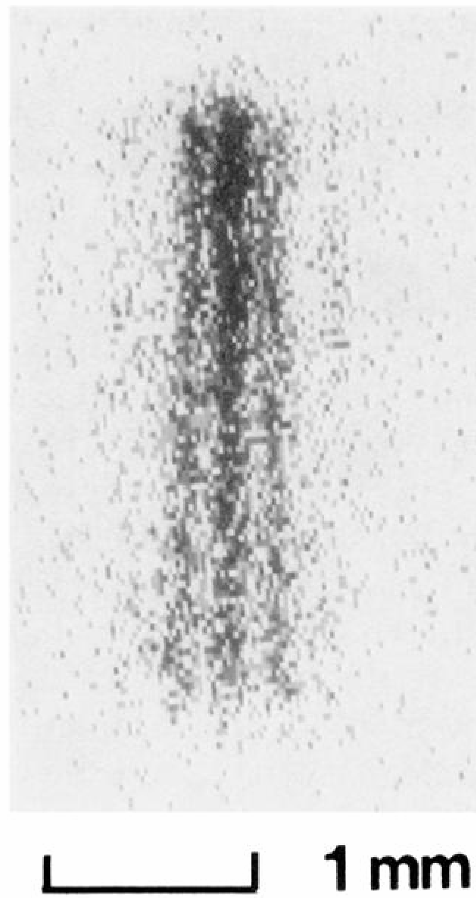
A Tonomura et al., *Demonstration of single-electron build-up of an interference pattern*, Am. J. Phys. 57, 117 (1989)

Duas fendas: nêutrons



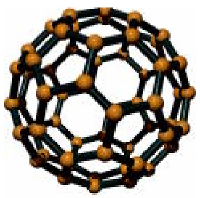
R. Gähler, A. Zeilinger, *Wave-optical experiments with very cold neutrons*, Am. J. Phys. 59, 316 (1991).

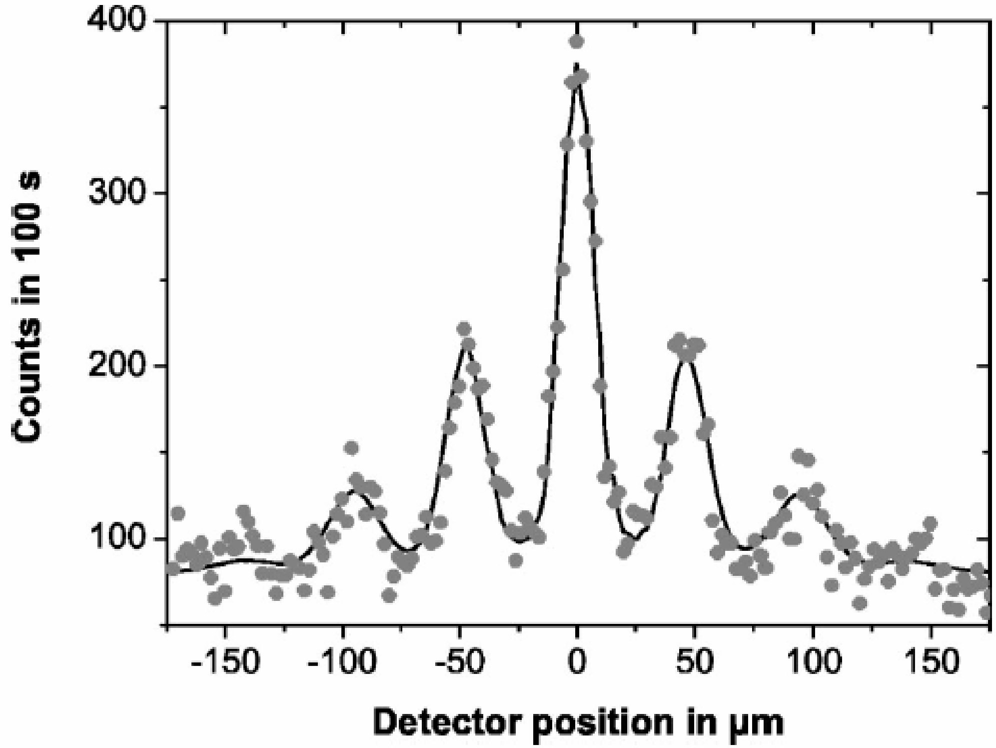
Duas fendas: átomos de neônio



F. Shimizu et al., *Double-slit interference with ultracold metastable neon atoms*, Phys. Rev. A 46, R17 (1992)

Duas fendas: moléculas de carbono 60





O. Nairz, M. Arndt, A. Zeilinger, *Quantum interference experiments with large molecules*, Am. J. Phys. 71 , 319 (2003).

Em suma:

- Ondas eletromagnéticas podem ter comportamento corpuscular

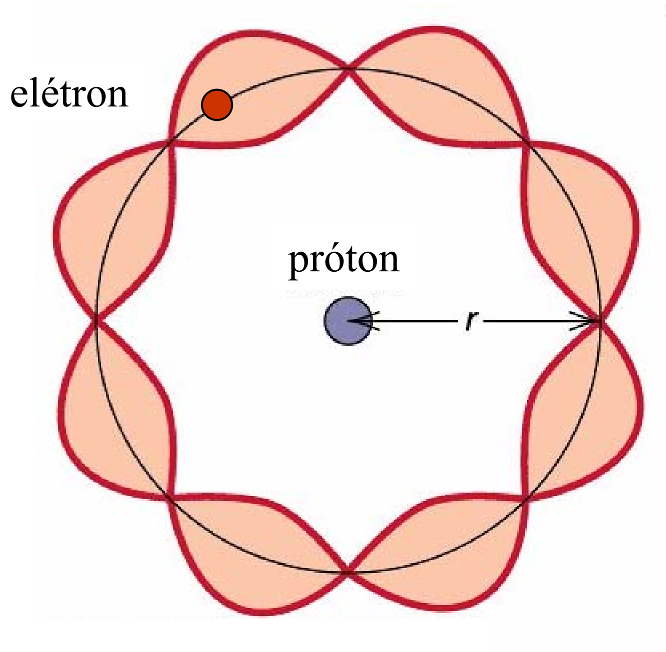
- Partículas podem ter comportamento ondulatório

Dois “mistérios”

- Quantização da energia
- Dualidade onda-partícula

Esses dois “mistérios” estão relacionados.

A energia do átomo de hidrogênio



interferência construtiva
(onda estacionária)

$$2\pi r = n\lambda$$

$$2\pi r = n\frac{h}{p}$$

$$pr = n\frac{h}{2\pi} = n\hbar$$

Momento angular quantizado!
Bohr (1913)

$$\boxed{L = n\hbar}$$

A energia do átomo de hidrogênio

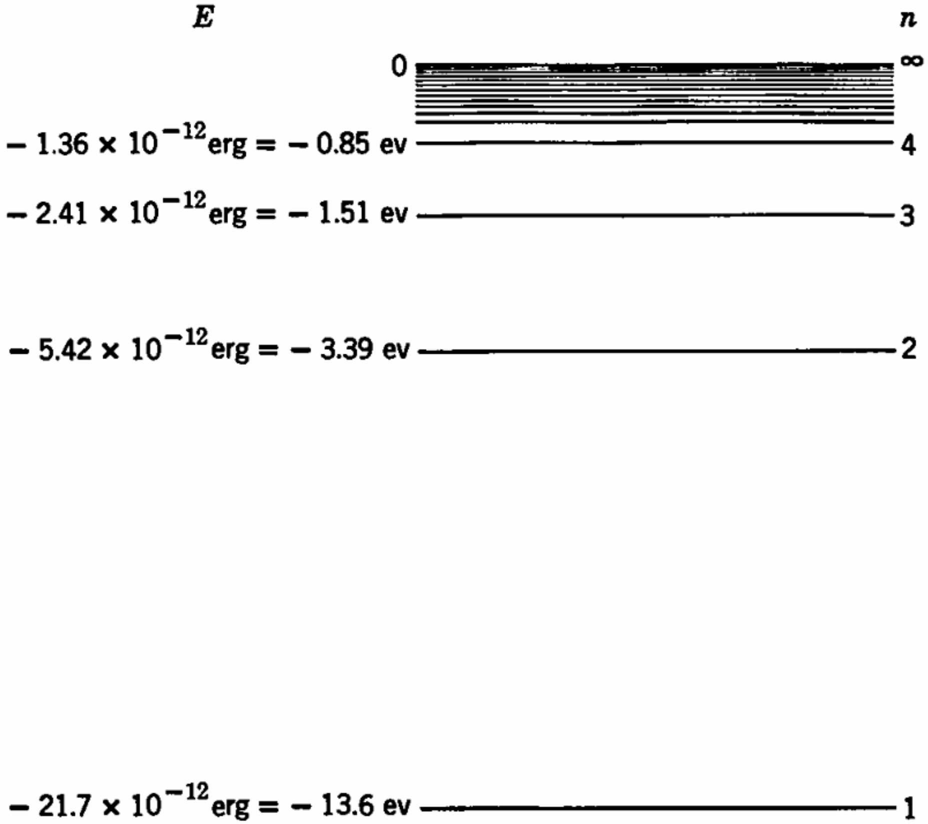
mecânica clássica (F = ma): $$m\frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{r^2} \quad\Rightarrow\quad mv^2 r = e^2$$

$$\left.\begin{aligned} mv^2 r &= e^2 \\ mvr &= n\hbar \end{aligned}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{aligned} v &= \frac{e^2}{\hbar}\frac{1}{n} \\ r &= \frac{\hbar^2}{me^2} n^2 \end{aligned}\right.$$

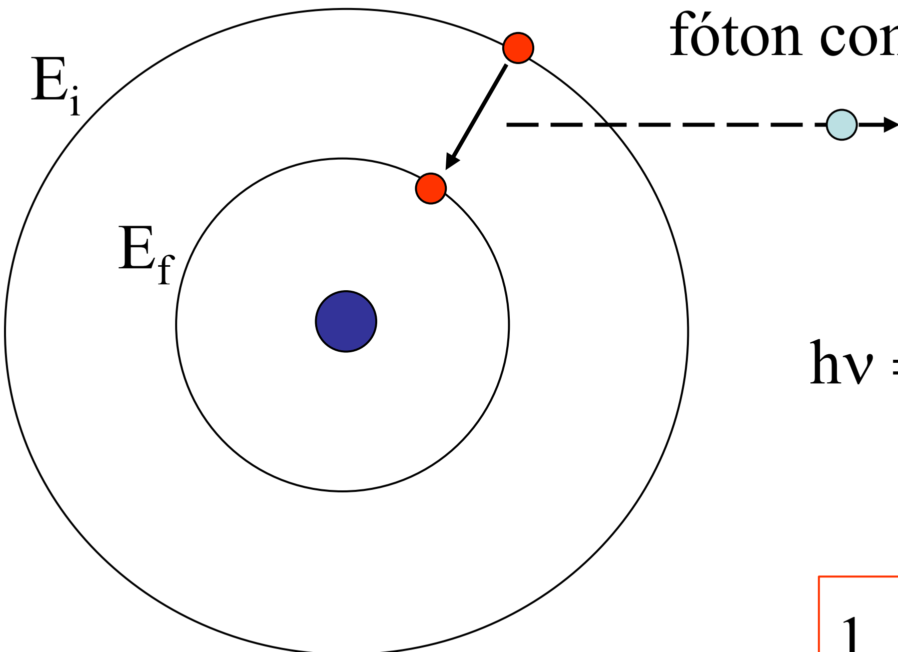
$$\boxed{E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{r} \quad\Rightarrow\quad E = -\frac{1}{2}\frac{me^4}{\hbar^2}\frac{1}{n^2}}$$

A energia do átomo de hidrogênio

$$E = -\frac{1}{2}\frac{me^4}{\hbar^2}\frac{1}{n^2}$$
$$= -\frac{13{,}6 \text{ eV}}{n^2}$$



O espectro do hidrogênio



fóton com energia $h\nu = E_i - E_f$

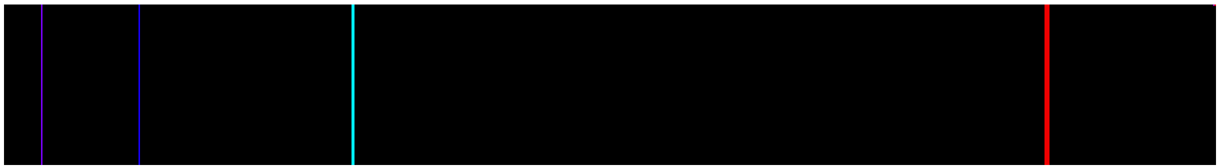
$$h\nu = \frac{1}{2}\frac{me^4}{\hbar^2}\left(\frac{1}{n_f^{\,2}} - \frac{1}{n_i^{\,2}}\right)$$

Bohr, 1913

$$\boxed{\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{2}\frac{me^4}{\hbar^3 c}\left(\frac{1}{n_f^{\,2}} - \frac{1}{n_i^{\,2}}\right)}$$

O espectro do hidrogênio

espectro visível



Balmer: $$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n_i^{\,2}} \right)$$

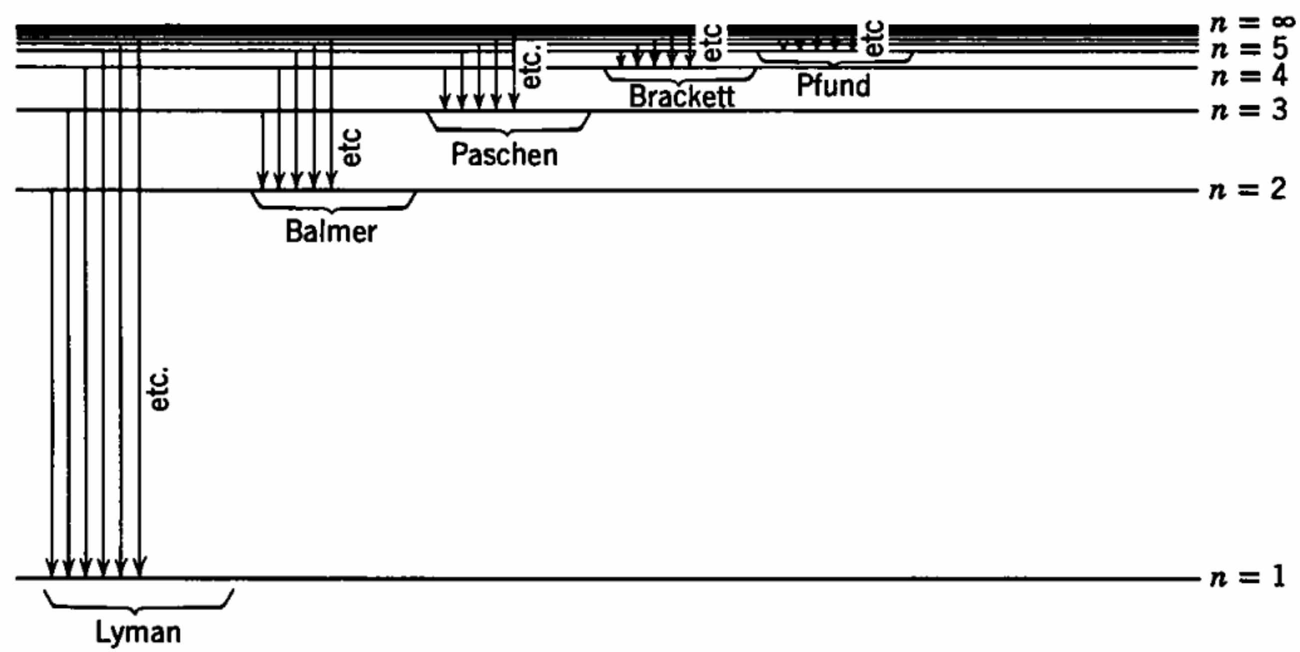
$R_H = 109{,}677\ \mathrm{cm}^{-1}$

constante de Rydberg

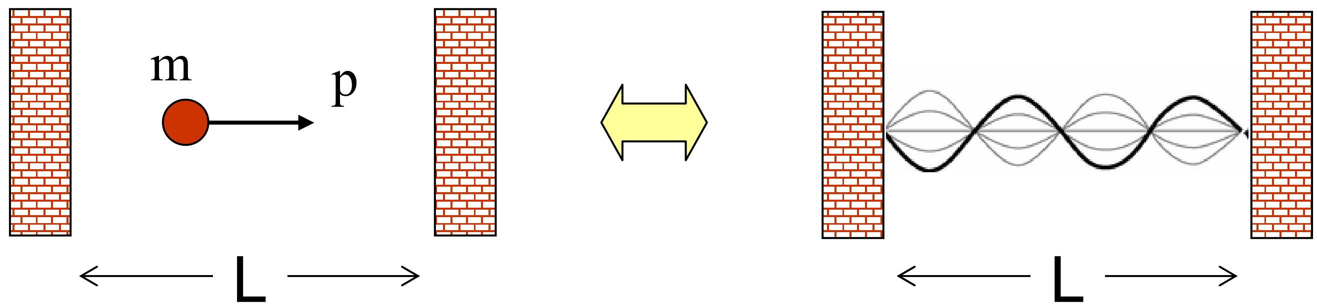
Bohr: $$R_H = \frac{1}{2} \frac{m e^4}{\hbar^3 c}$$

m = massa reduzida e-p

O espectro do hidrogênio



Partícula em uma caixa

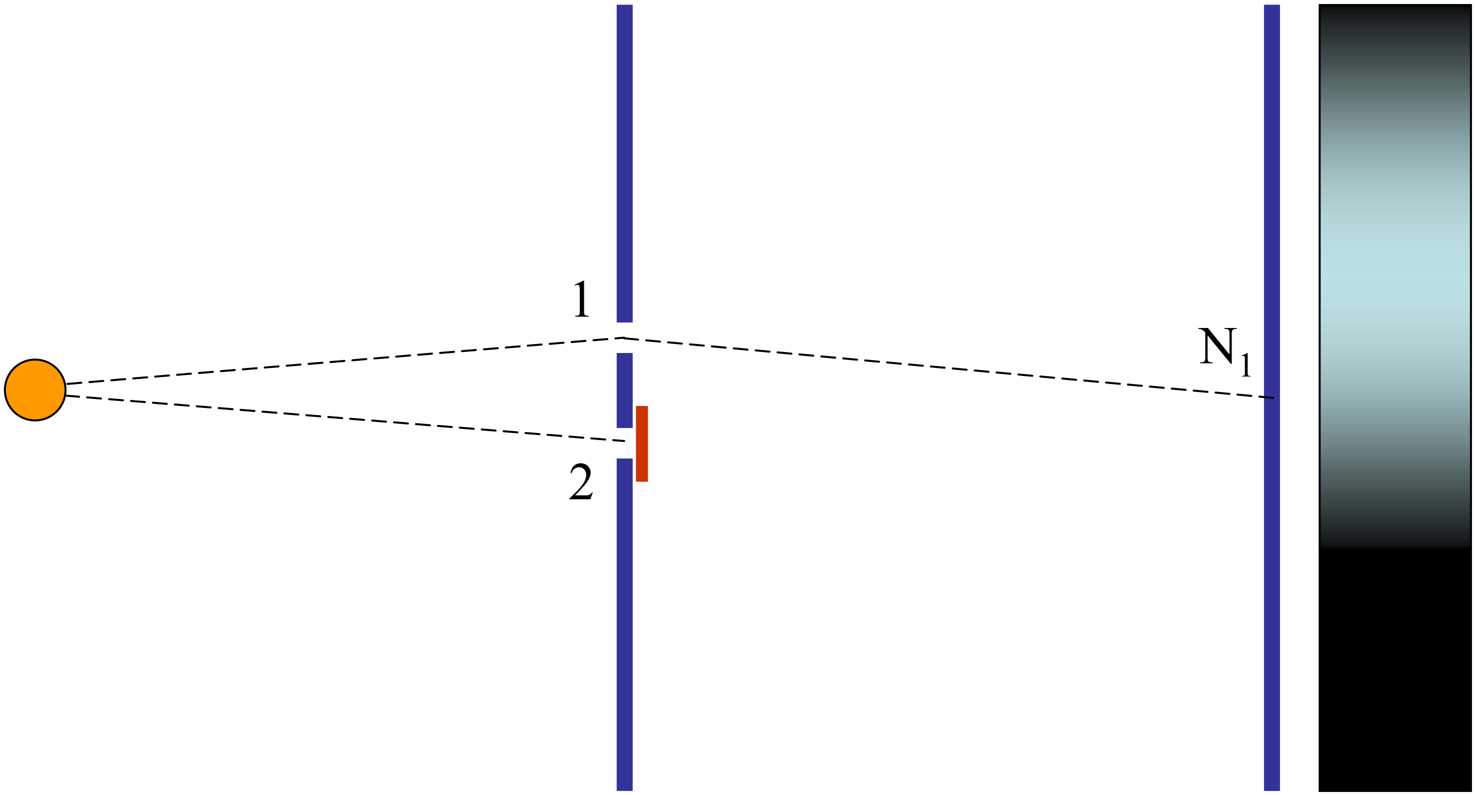


de Broglie: $$p = \frac{h}{\lambda}$$

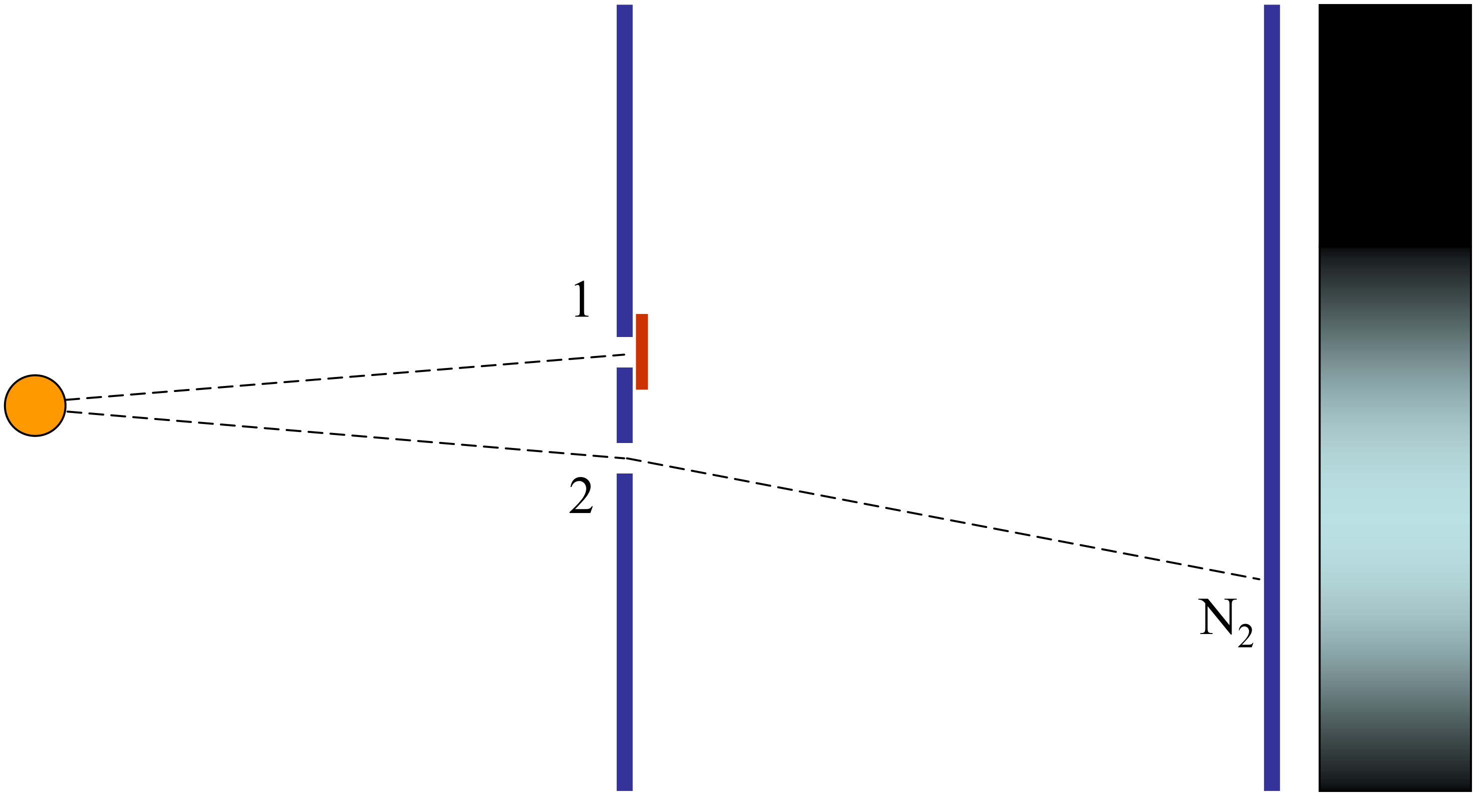
onda estacionária: $$L = n\frac{\lambda}{2}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{p_n = \frac{h}{2L}n} \qquad \boxed{E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{h^2}{8mL^2}n^2}$$

Experimento de dupla fenda com partículas

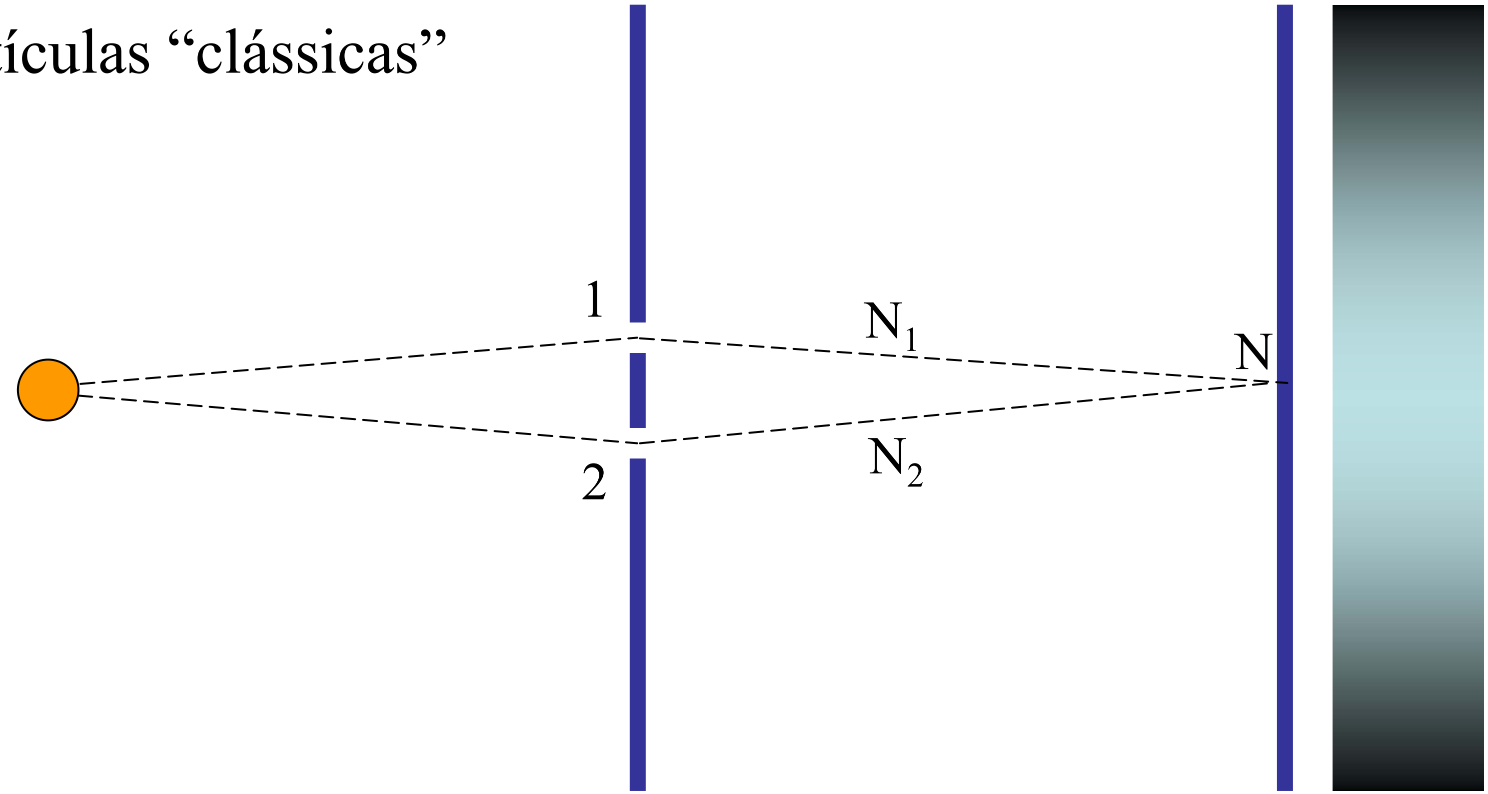


Experimento de dupla fenda com partículas



Experimento de dupla fenda com partículas

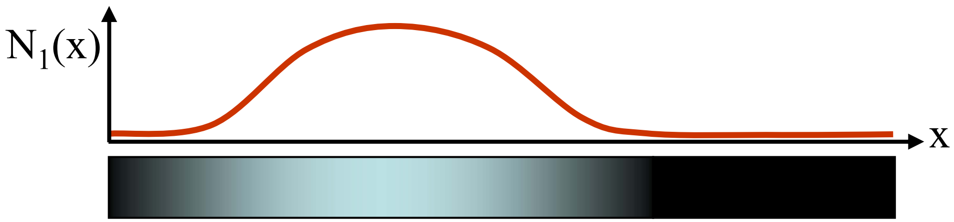
Partículas “clássicas”



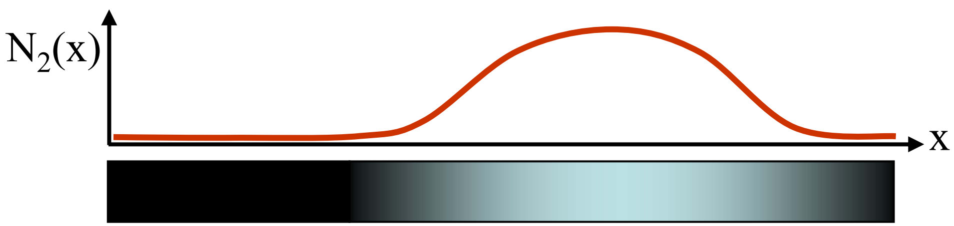
Cada partícula passa *ou* pela fenda 1 *ou* pela fenda 2 $\Rightarrow$ $N = N_1 + N_2$

Partículas clássicas

Cada partícula passa *ou* pela fenda 1 *ou* pela fenda 2 $\Rightarrow$ $N = N_1 + N_2$

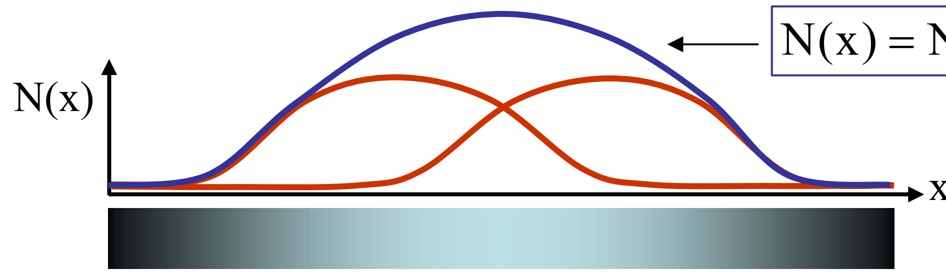


apenas a fenda 1 aberta



apenas a fenda 2 aberta

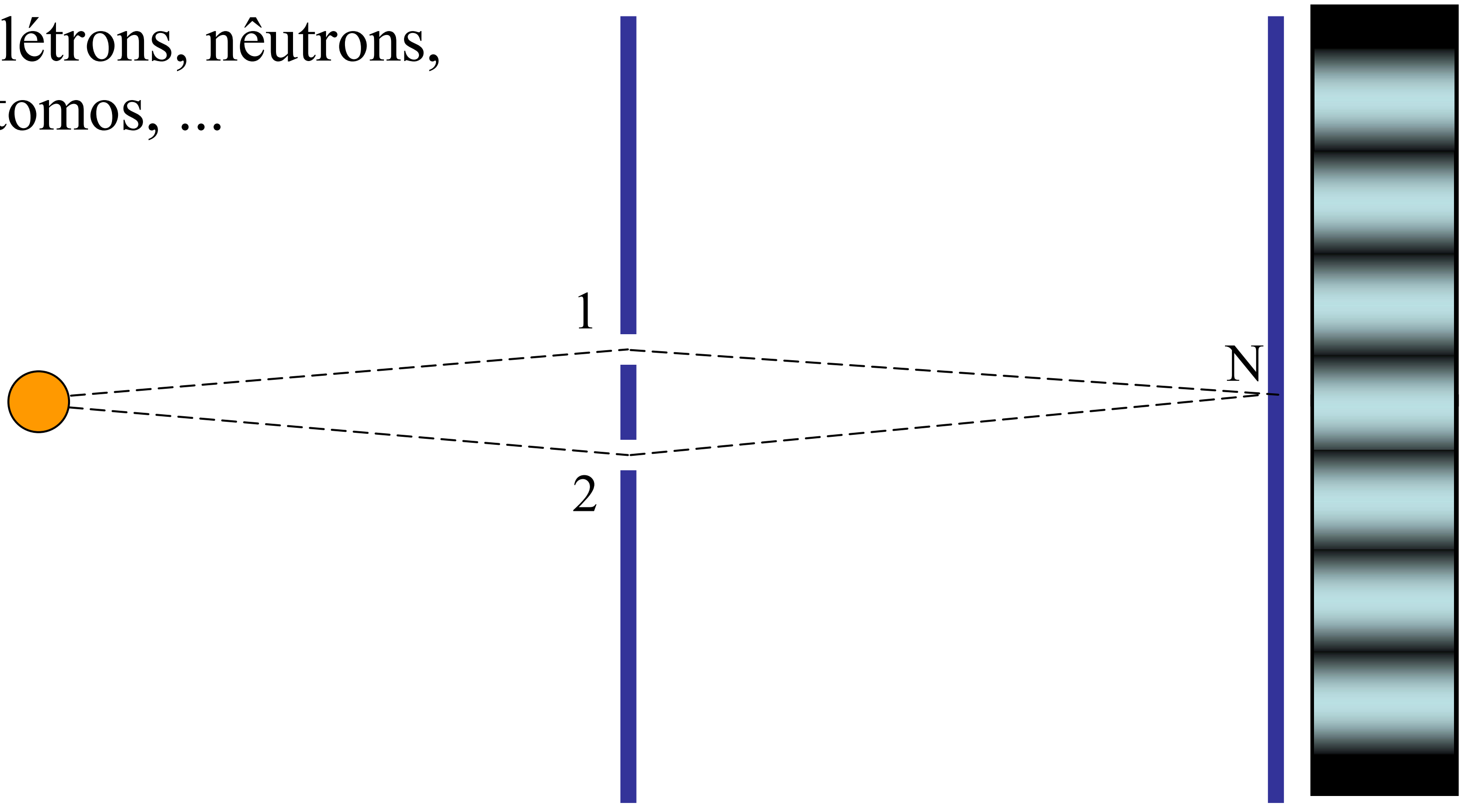
$N(x) = N_1(x) + N_2(x)$



fendas 1 e 2 abertas

Experimento de dupla fenda com partículas

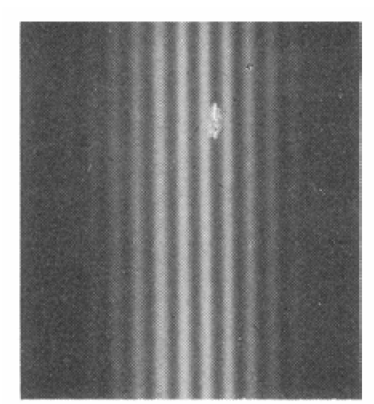
Elétrons, nêutrons, átomos, ...

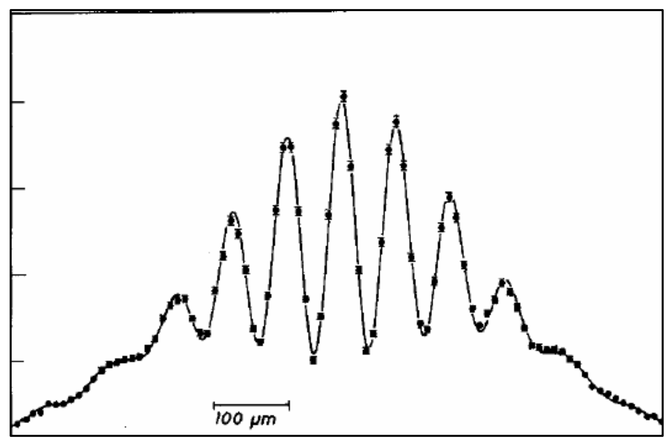


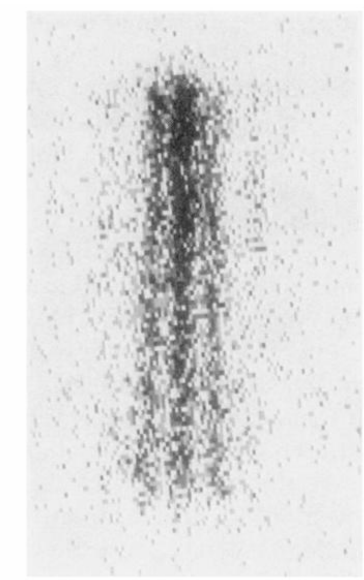
$$N \neq N_1 + N_2$$

Experimento de dupla fenda com partículas

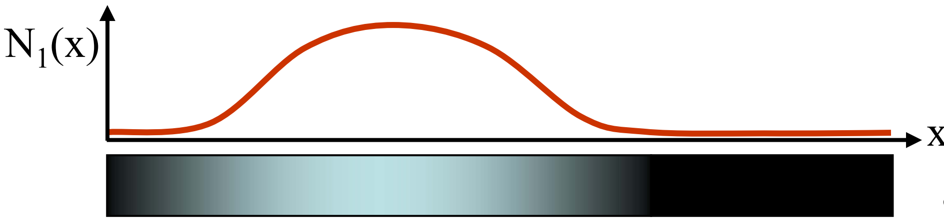
Elétrons, nêutrons, átomos, ...



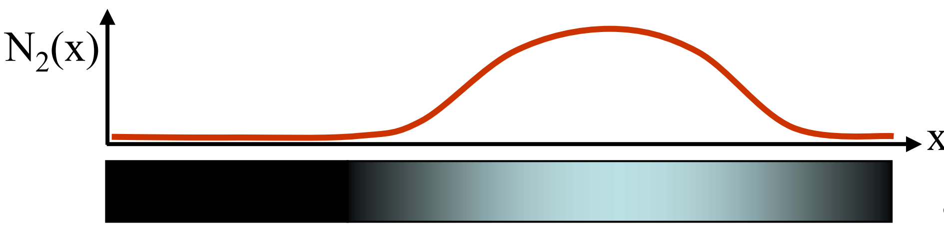




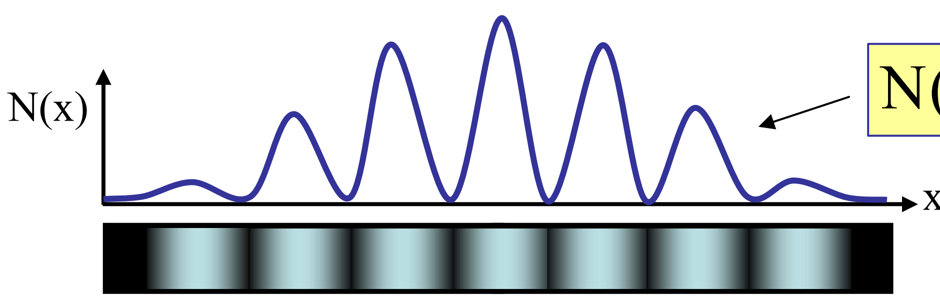
Elétrons, nêutrons, átomos, ...



apenas a fenda 1 aberta



apenas a fenda 2 aberta



$$\boxed{N(x) \neq N_1(x) + N_2(x)}$$

fendas 1 e 2 abertas

Elétrons, nêutrons, átomos, ...

$$\boxed{N(x) \neq N_1(x) + N_2(x)}$$

⇓

A afirmativa

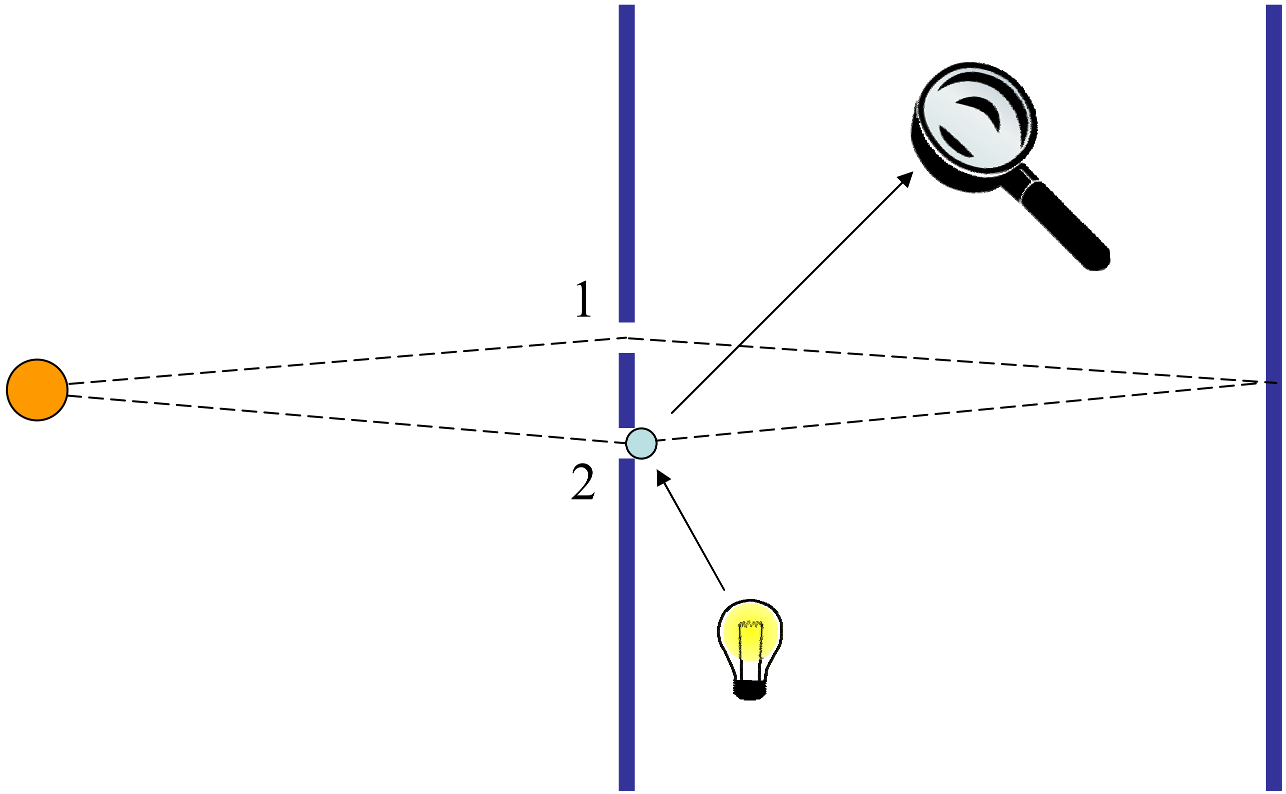
"<u>cada partícula passa ou pela fenda 1 ou pela fenda 2</u>"

é falsa.

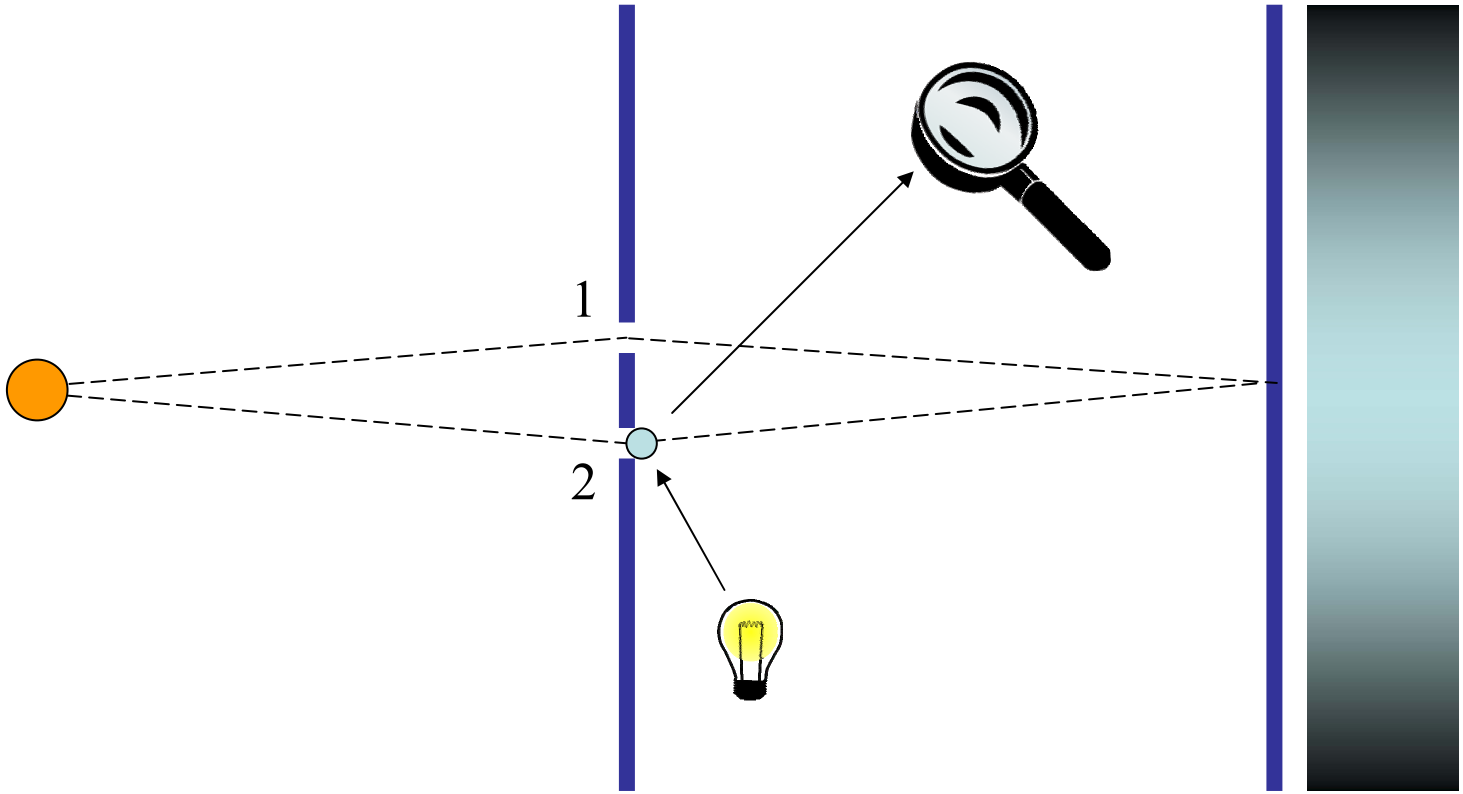
… a phenomenon which is impossible, *absolutely* impossible, to explain in any classical way, and which has in it the heart of quantum mechanics. In reality, it contains the *only* mystery.

R. P. Feynman, The Feynman Lectures on Physics, v.3, p.1-1

E se *observarmos* por onde passa a partícula?



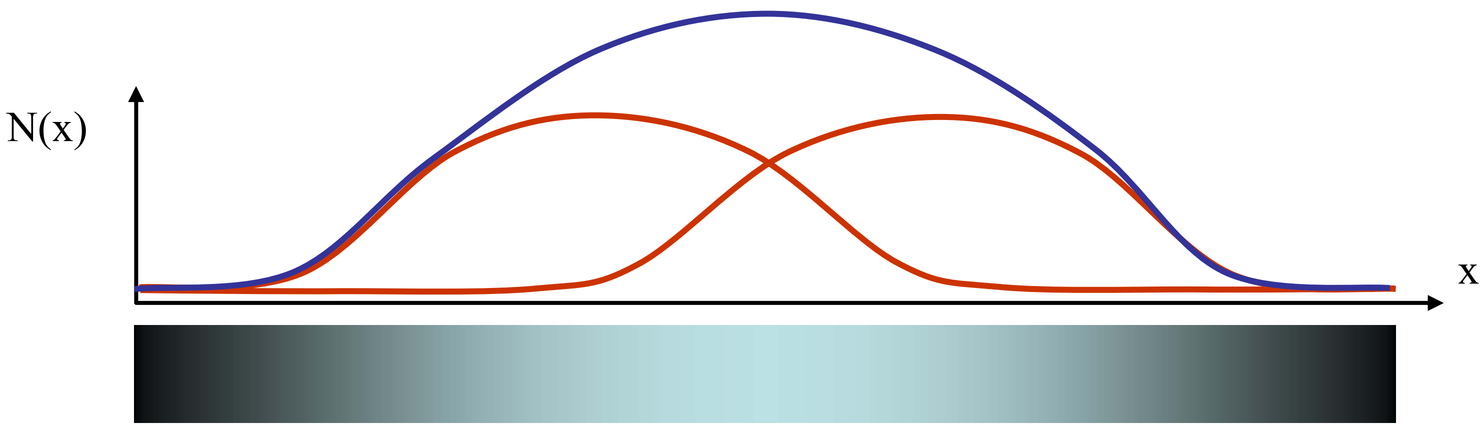
E se *observarmos* por onde passa a partícula?



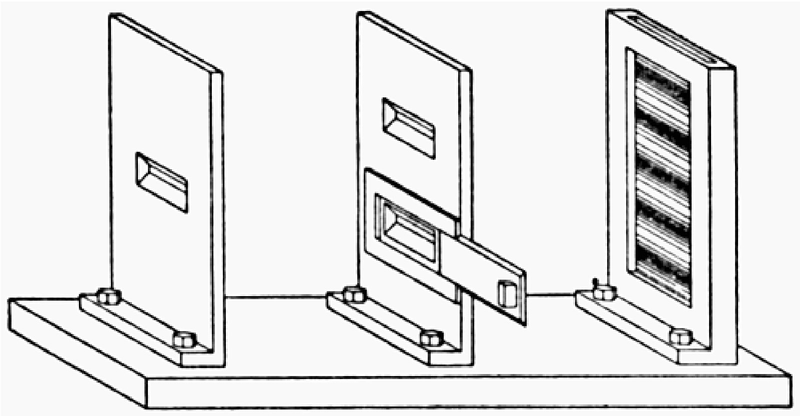
A interferência desaparece!
-- complementaridade --

E se *observarmos* por onde passa a partícula?

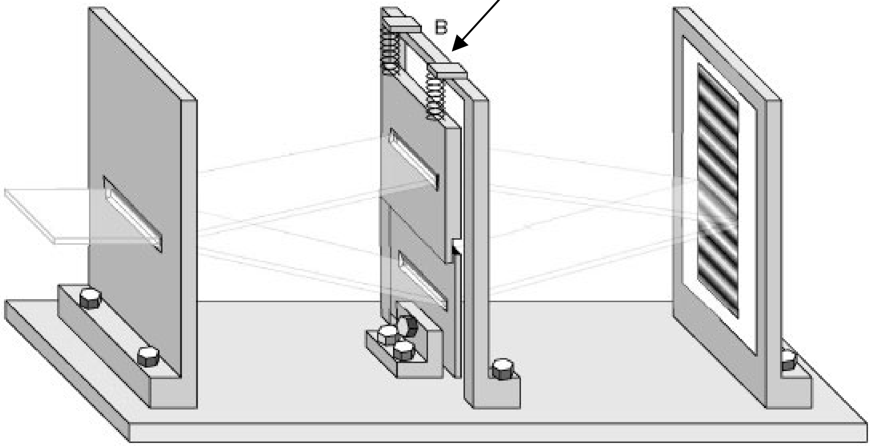
$$N(x) = N_1(x) + N_2(x)$$



Experimento sobre a complementaridade

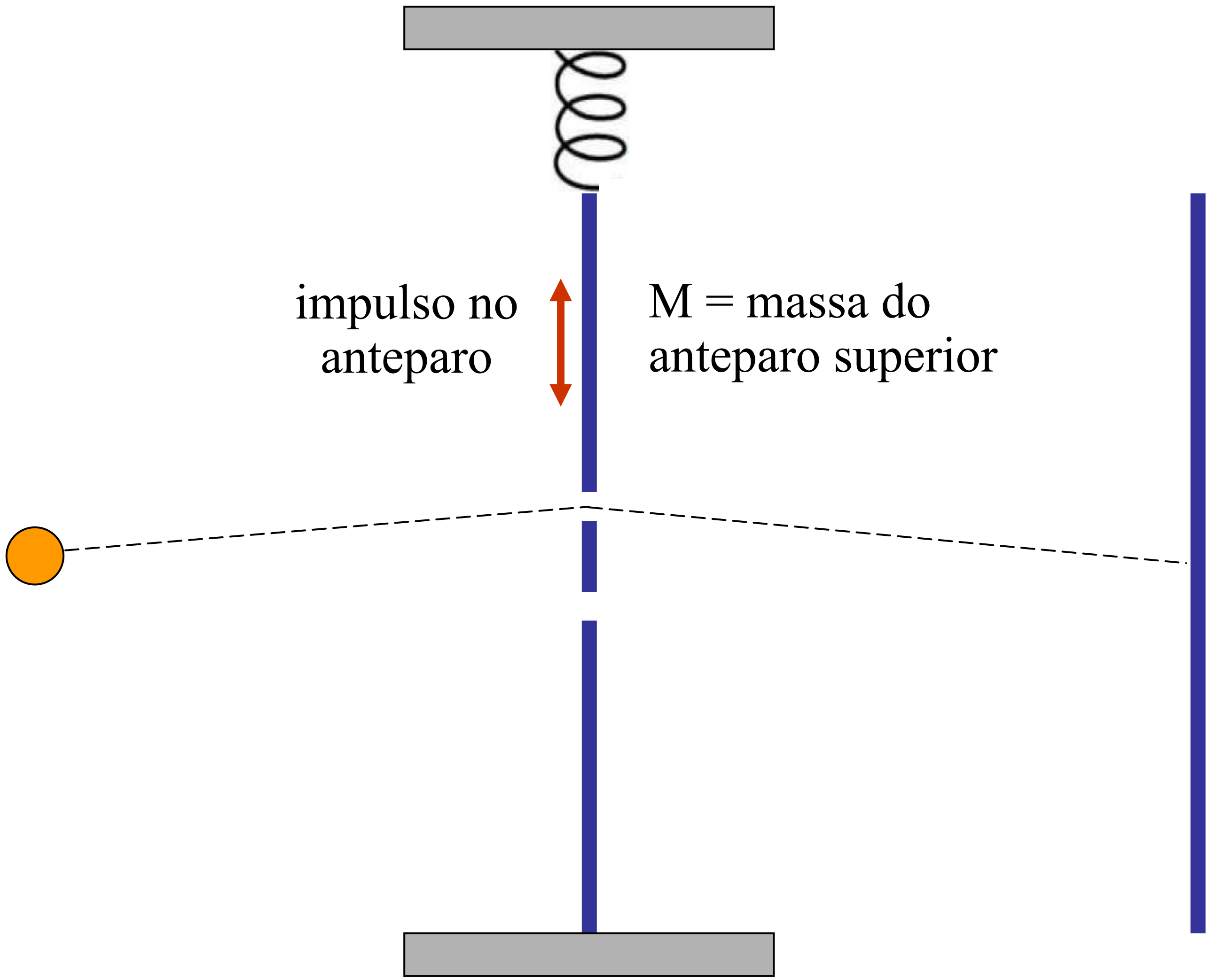


molas

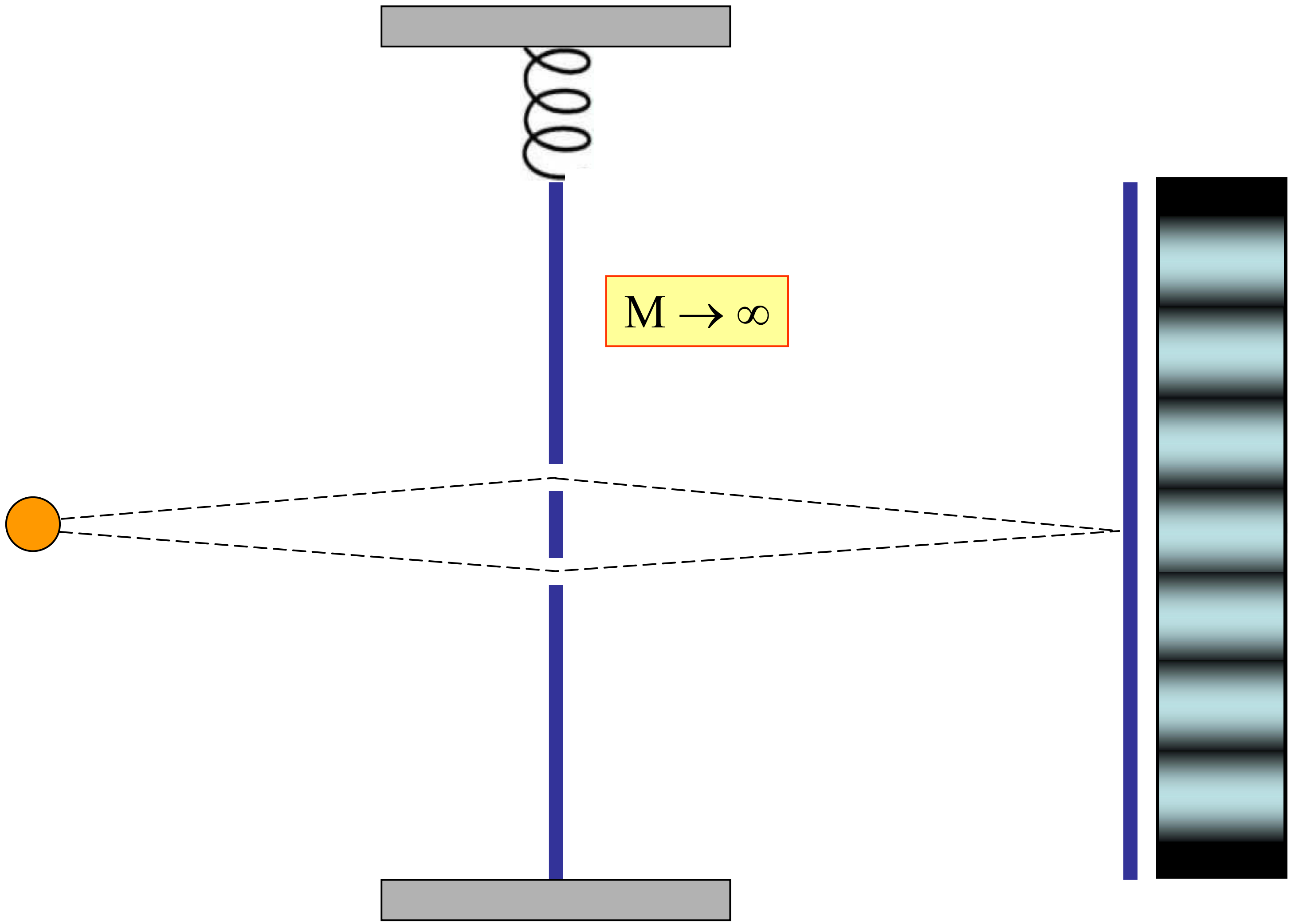


Desenhos: Niels Bohr

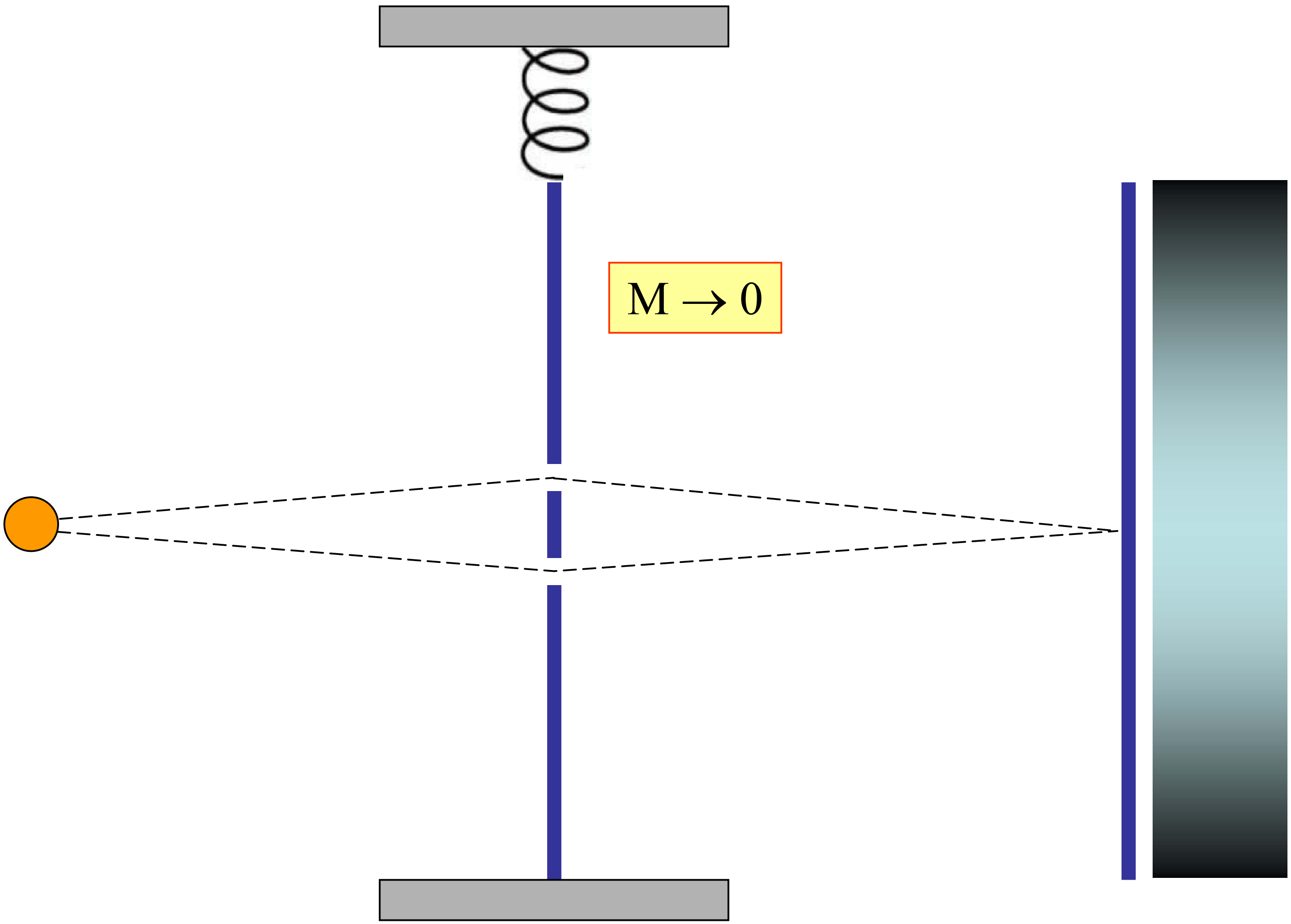
Experimento sobre a complementaridade



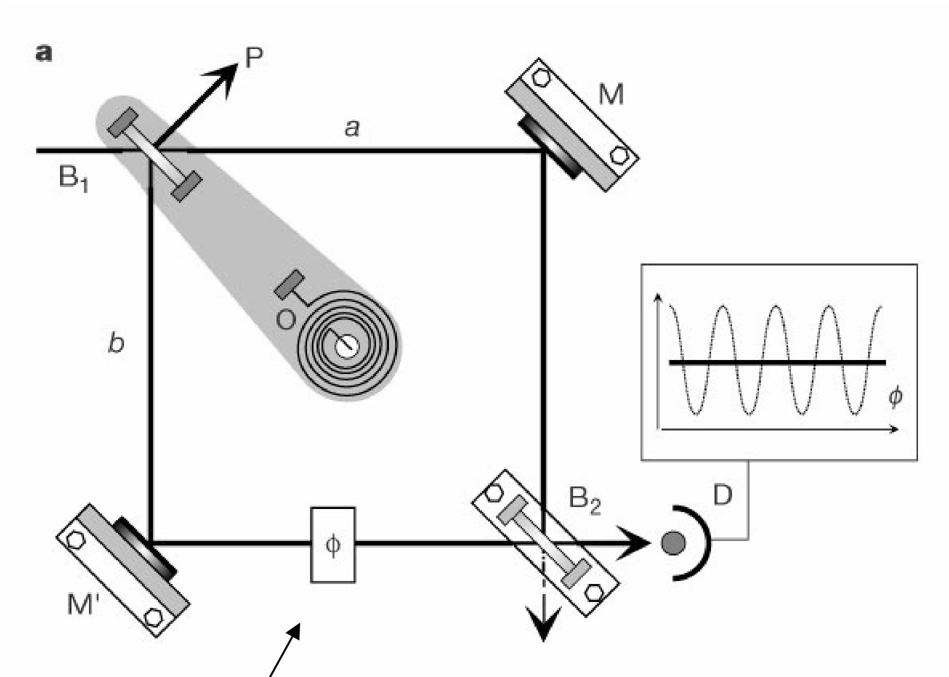
Experimento sobre a complementaridade



Experimento sobre a complementaridade



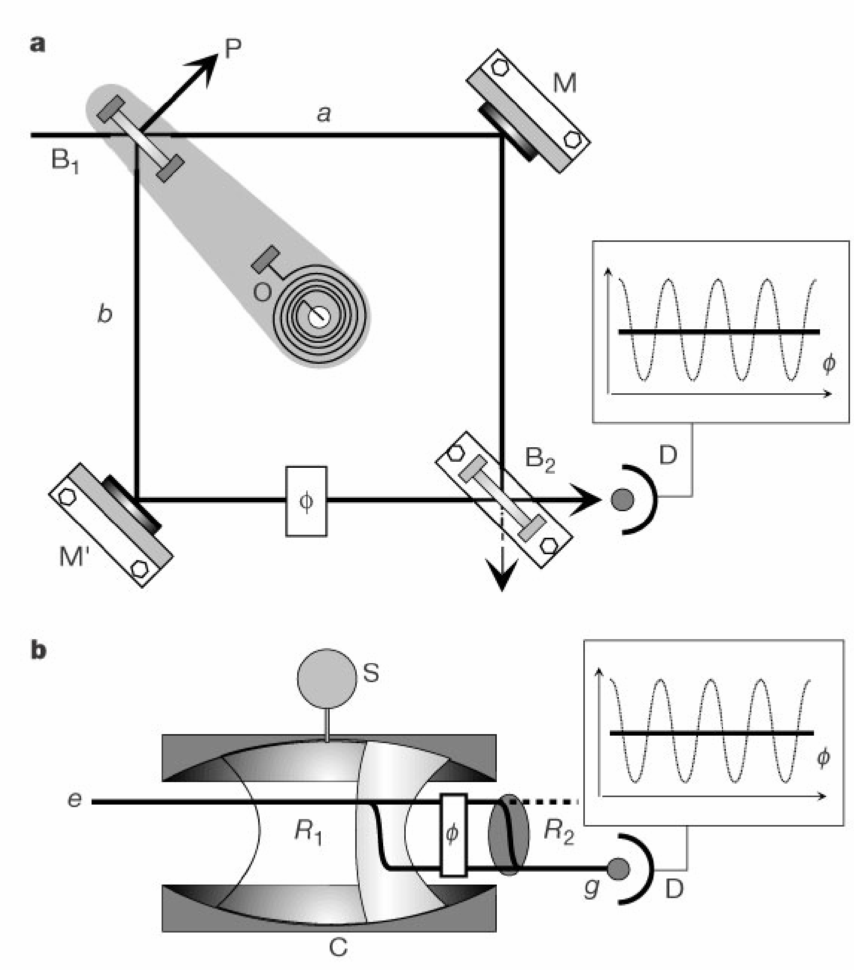
Experimento sobre a complementaridade



diferença de caminhos (ajustável)

P. Bertet et al., *A complementarity experiment with an interferometer at the quantum-classical boundary*, Nature 411, 166 (2001)

Experimento sobre a complementaridade

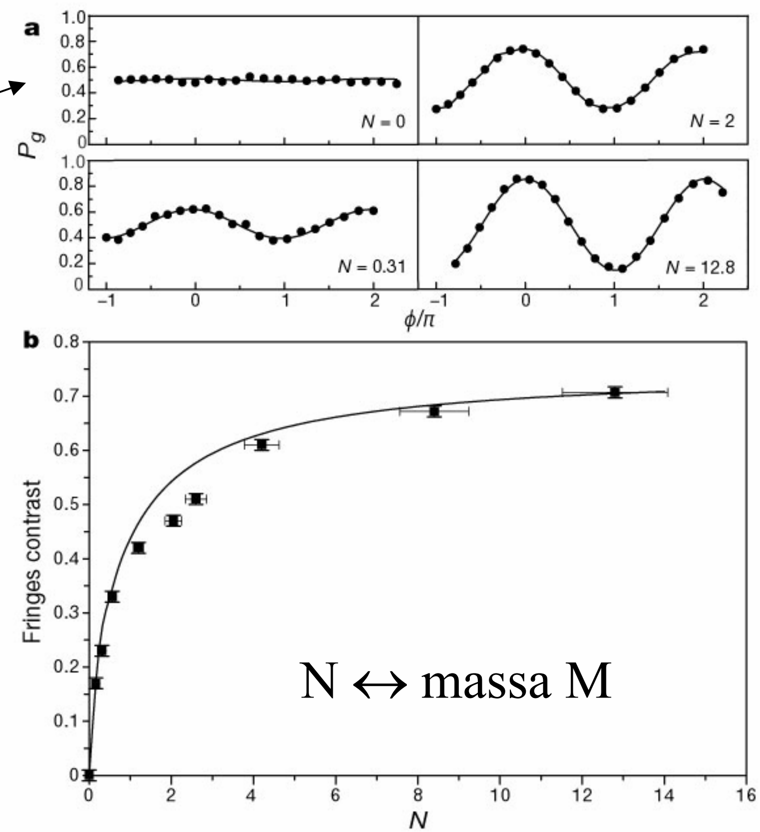


o experimento real

P. Bertet et al., *A complementarity experiment with an interferometer at the quantum-classical boundary*, Nature 411, 166 (2001)

Experimento sobre a complementaridade

- $M = 0$
- caminho identificado
- não há padrão de interferência



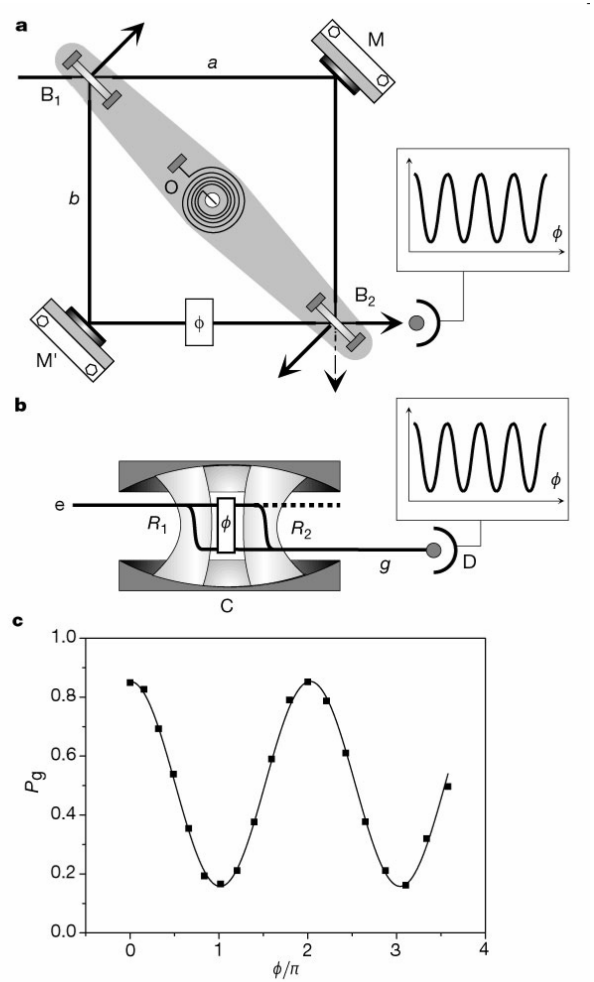
- $M \to \infty$
- caminho não identificado
- padrão de interferência

P. Bertet et al., *A complementarity experiment with an interferometer at the quantum-classical boundary*, Nature 411, 166 (2001)

Experimento sobre a complementaridade

impossível determinar o caminho

⇔



interferência

⇔

P. Bertet et al., *A complementarity experiment with an interferometer at the quantum-classical boundary*, Nature 411, 166 (2001)

Próximos passos (não estão em ppt)

2. Os princípios da mecânica quântica: sistemas de dois estados.
3. Sistemas de dois estados: aplicações.
4. Sistemas de N estados.
5. Partículas idênticas.
6. Simetrias.
7. Posição e momentum.
8. Equação de Schroedinger em 1 dimensão: aplicações.
9. A soma sobre caminhos.