Mecânica Quântica

Carlos Eduardo Aguiar

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

1º período letivo de 2010

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, R.B. Leighton, M. Sands, *Lições de Física de Feynman*, vol. III, Bookman, 2008.
- R.P. Feynman, *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:

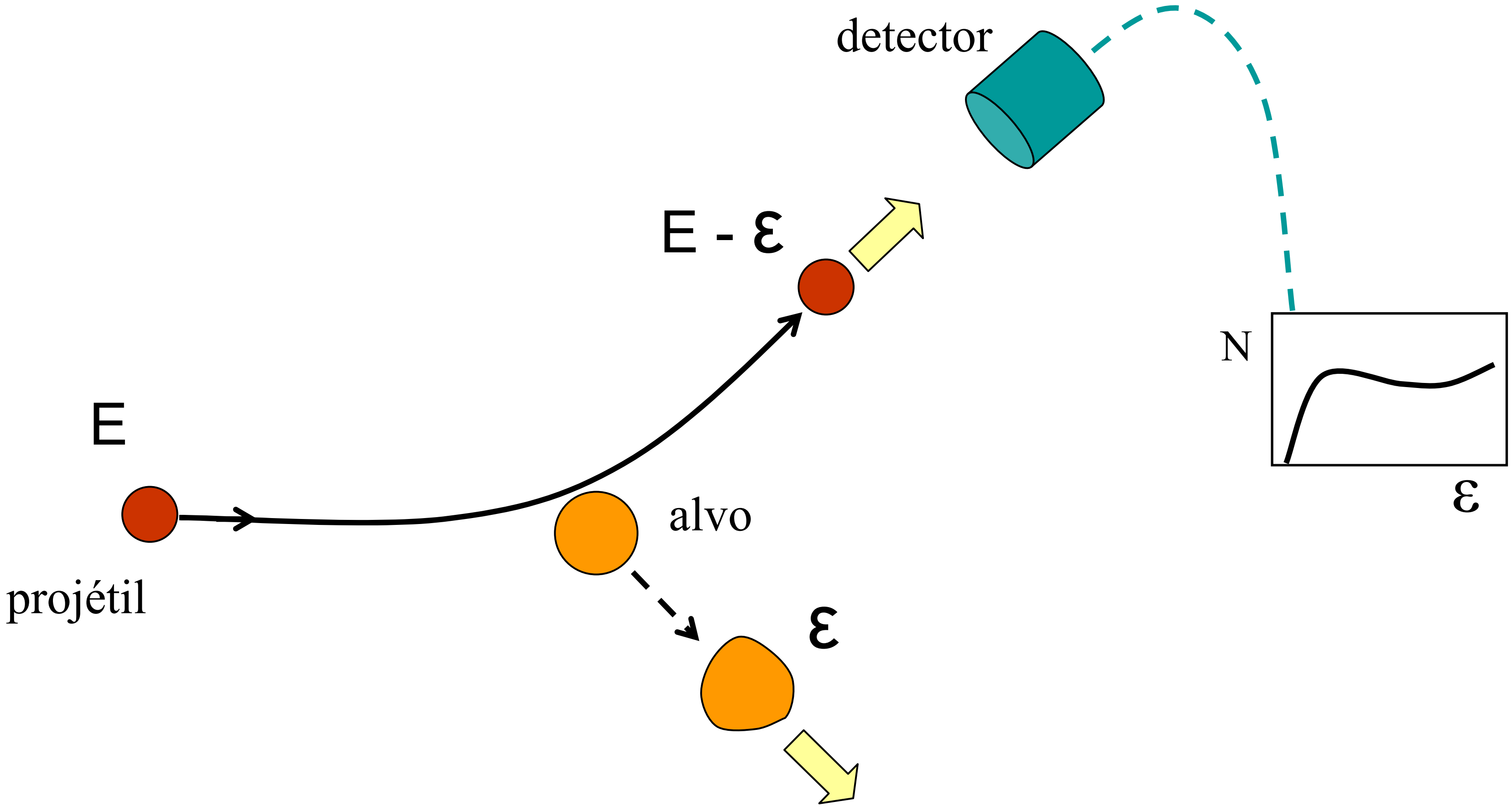
- M. A. Moreira, I. M. Greca, *Uma revisão da literatura sobre estudos relativos ao ensino da mecânica quântica introdutória*, Investigações em Ensino de Ciências, 6 (2001) 29-56.
- I. M. Greca, M. A. Moreira, V.E. Herscovitz, *Uma proposta para o ensino de mecânica quântica*, Revista Brasileira de Ensino de Física, 33 (2001) 444.
- R. Müller, H. Wiesner, *Teaching quantum mechanics on an introductory level*, American Journal of Physics 70 (2002) 200; ver também a discussão em AJP 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

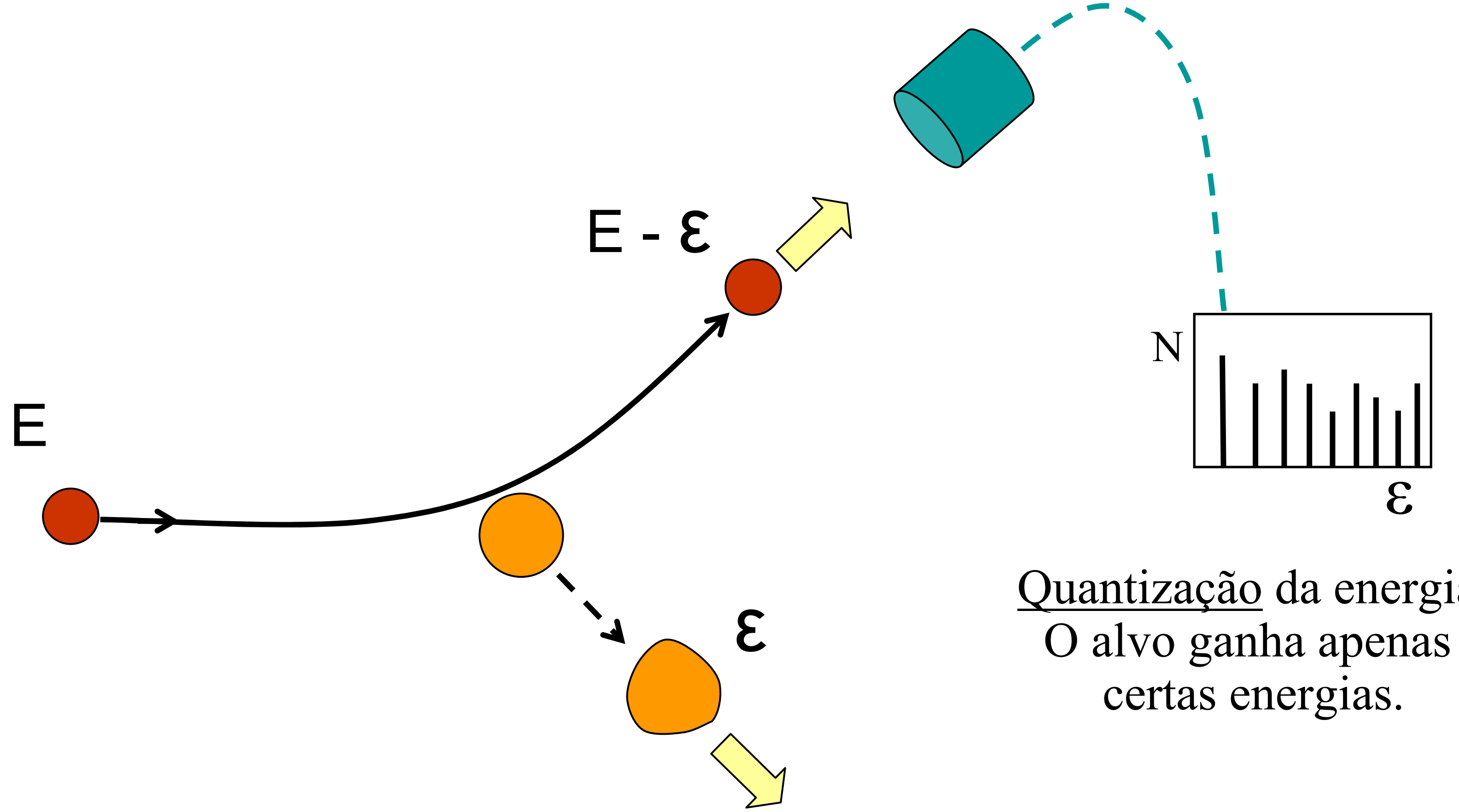
Charles Addams, New Yorker, 1940

A Quantização da Energia

Espalhamento inelástico



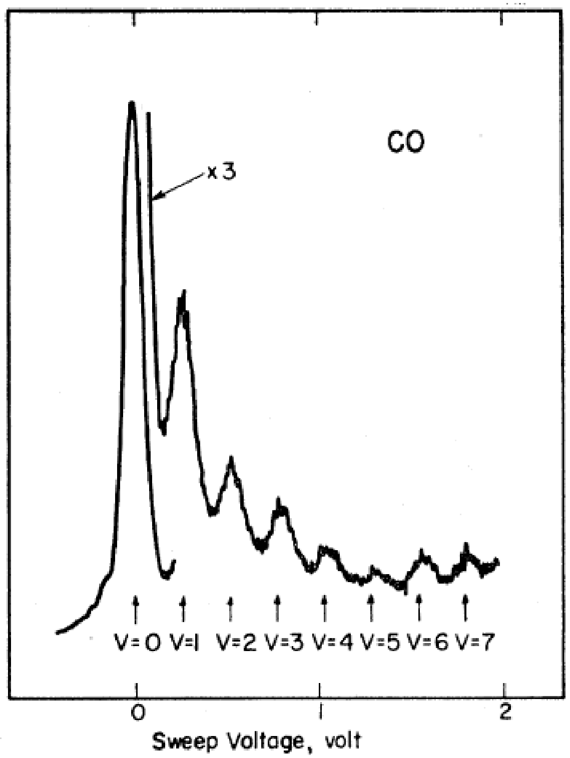
Espalhamento por moléculas, átomos, ...



Quantização da energia.
O alvo ganha apenas certas energias.

Espalhamento inelástico pela molécula de CO

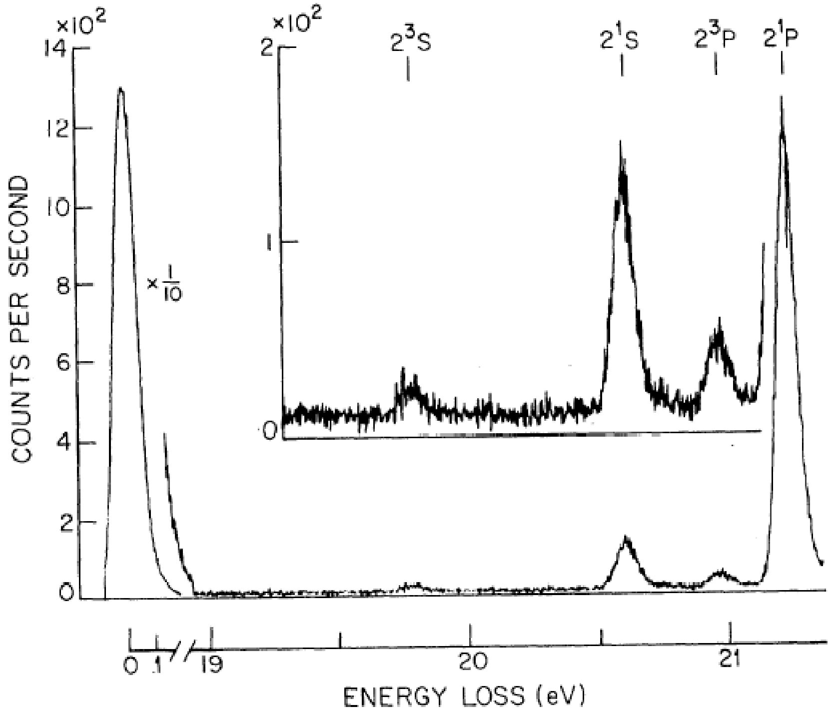
e + CO



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

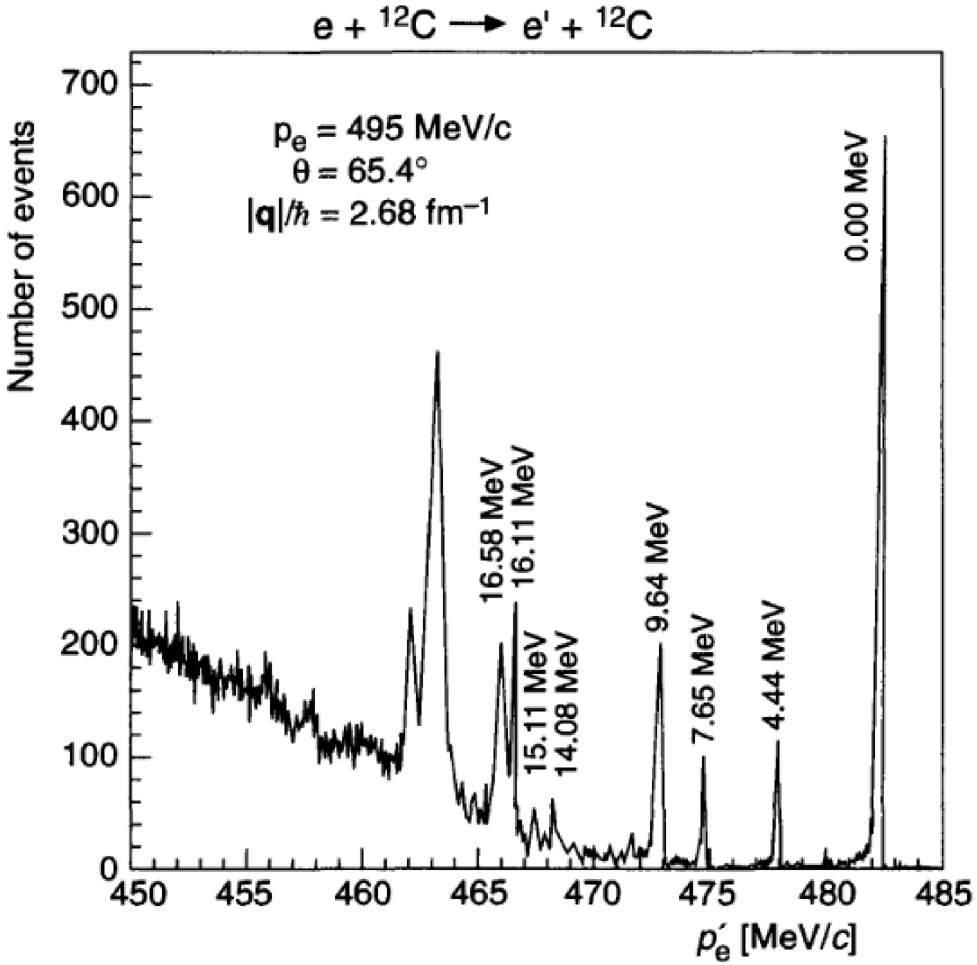
Espalhamento inelástico pelo átomo de He

e + He



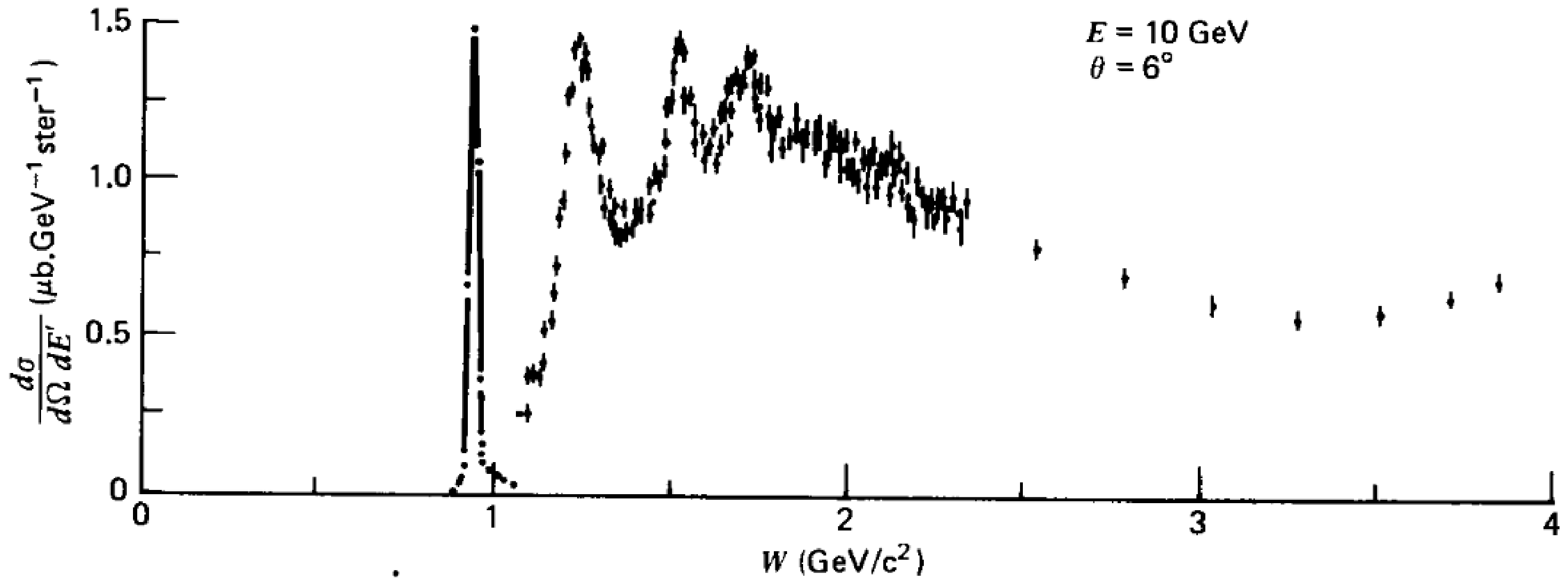
D.G. Truhlar, *Differential and Integral Cross Sections for Excitation of the 2^1P State of Helium by Electron Impact*, Phys. Rev. A 1, 778 (1970)

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

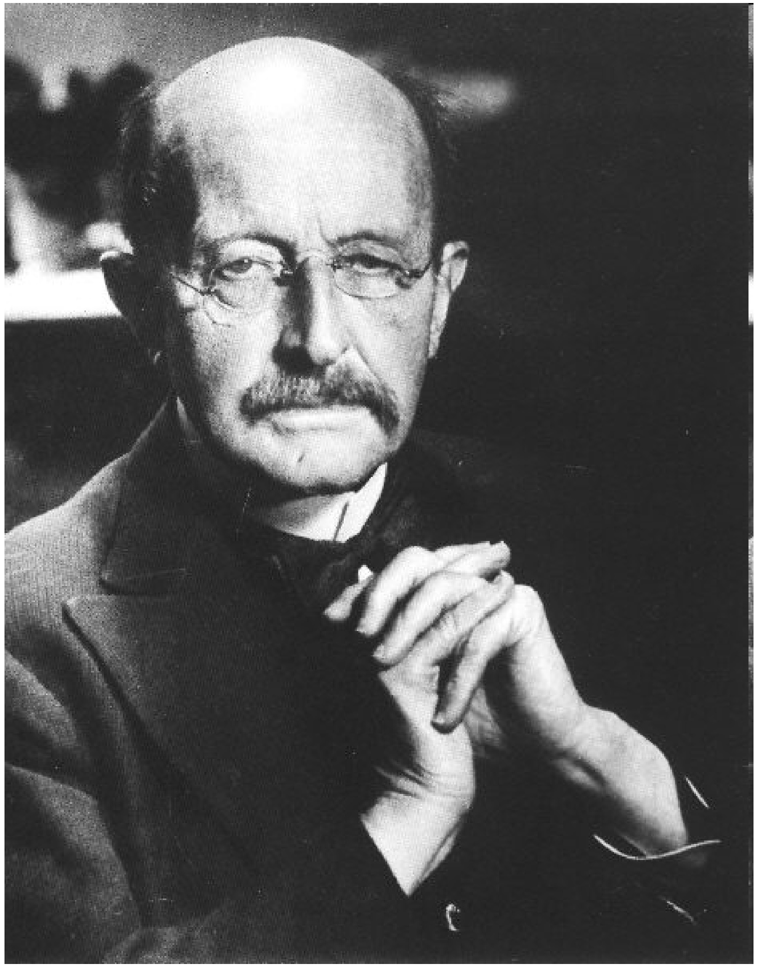
Em suma:

A energia de

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

é *quantizada*.

O quantum de Planck



Max Planck: the reluctant revolutionary

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

O quantum de Planck

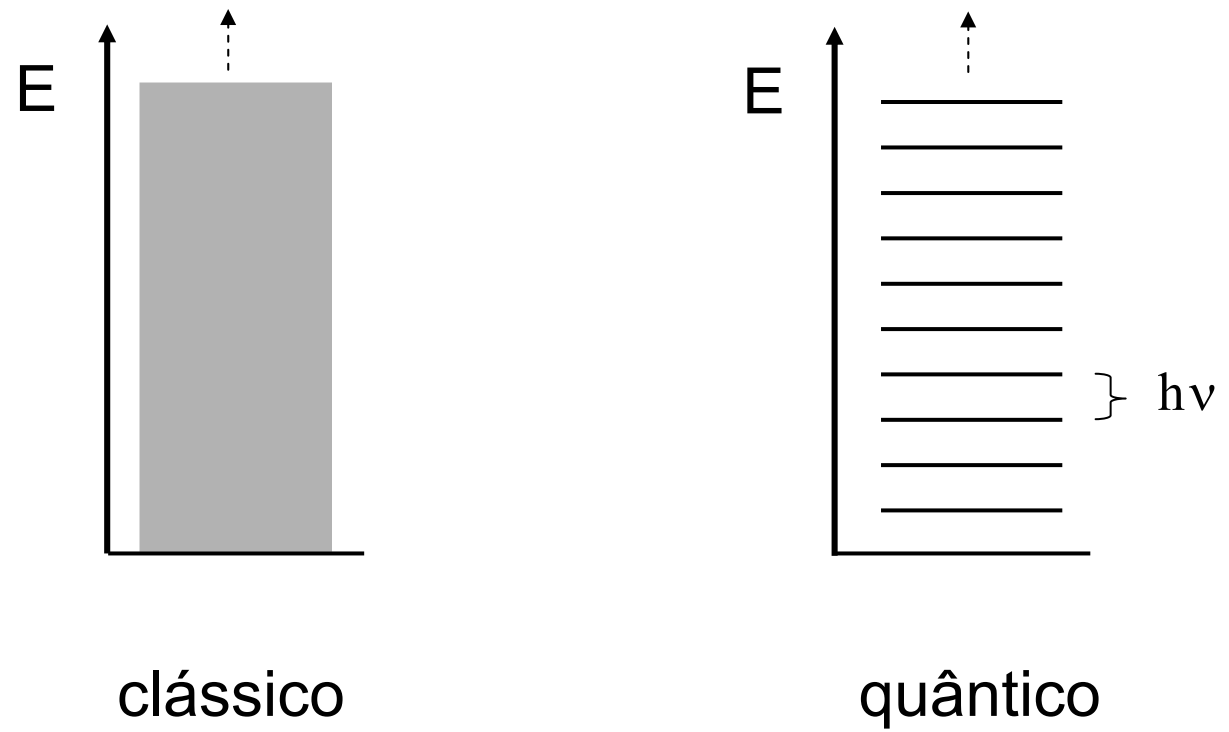
Um *oscilador harmônico* de freqüência ν pode ter apenas as energias

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

$h\nu$ = *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)

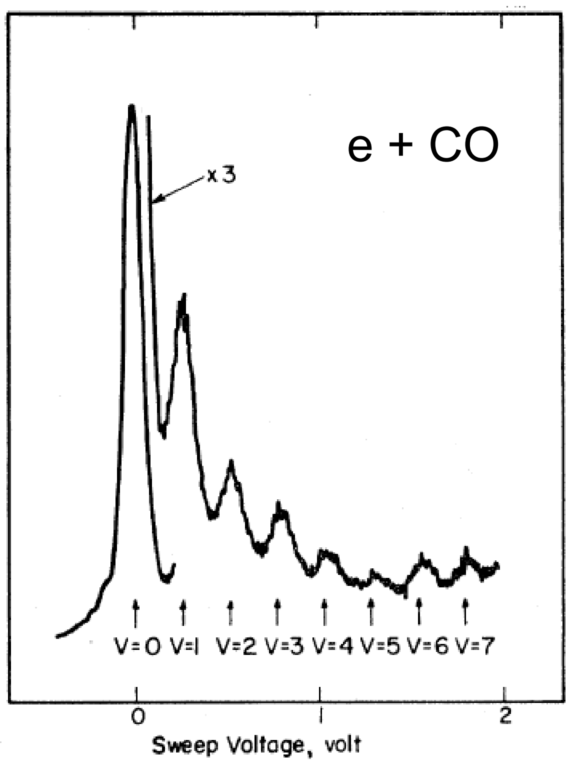
$$\omega = 2\pi\nu \quad \Rightarrow \quad \hbar\omega = h\nu$$

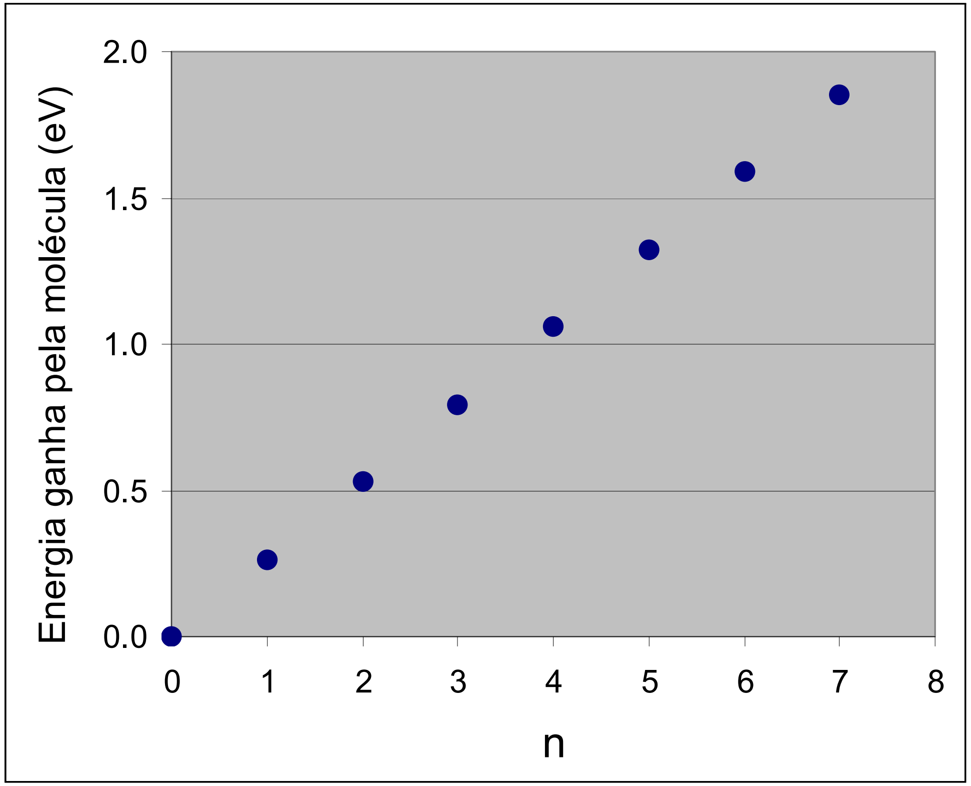
freqüência angular do oscilador (indicada por uma seta apontando para ω)

Osciladores moleculares

CO ↔ 

Planck: $\Delta E = n\,\hbar\omega$

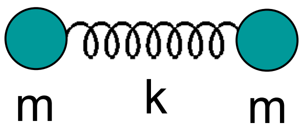




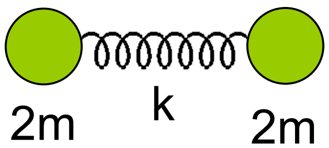
G. J. Schulz, *Vibrational Excitation of N2, CO, and H2 by Electron Impact*, Phys. Rev. 135, A988 (1964)

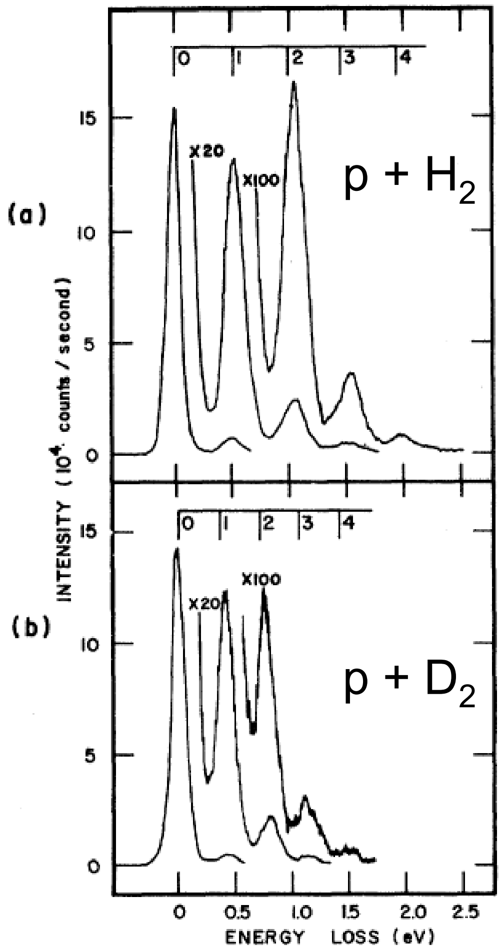
Osciladores moleculares

H_2



D_2





Planck:

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

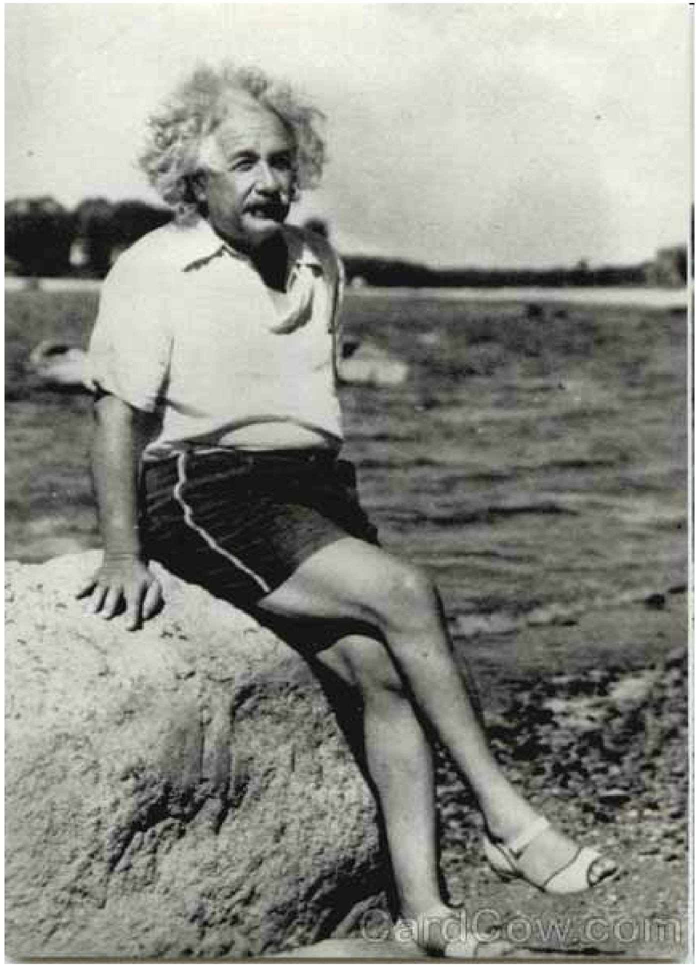
$$\frac{\hbar\omega(D_2)}{\hbar\omega(H_2)} = \sqrt{\frac{m(H)}{m(D)}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \approx 0{,}7$$

Dados:

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

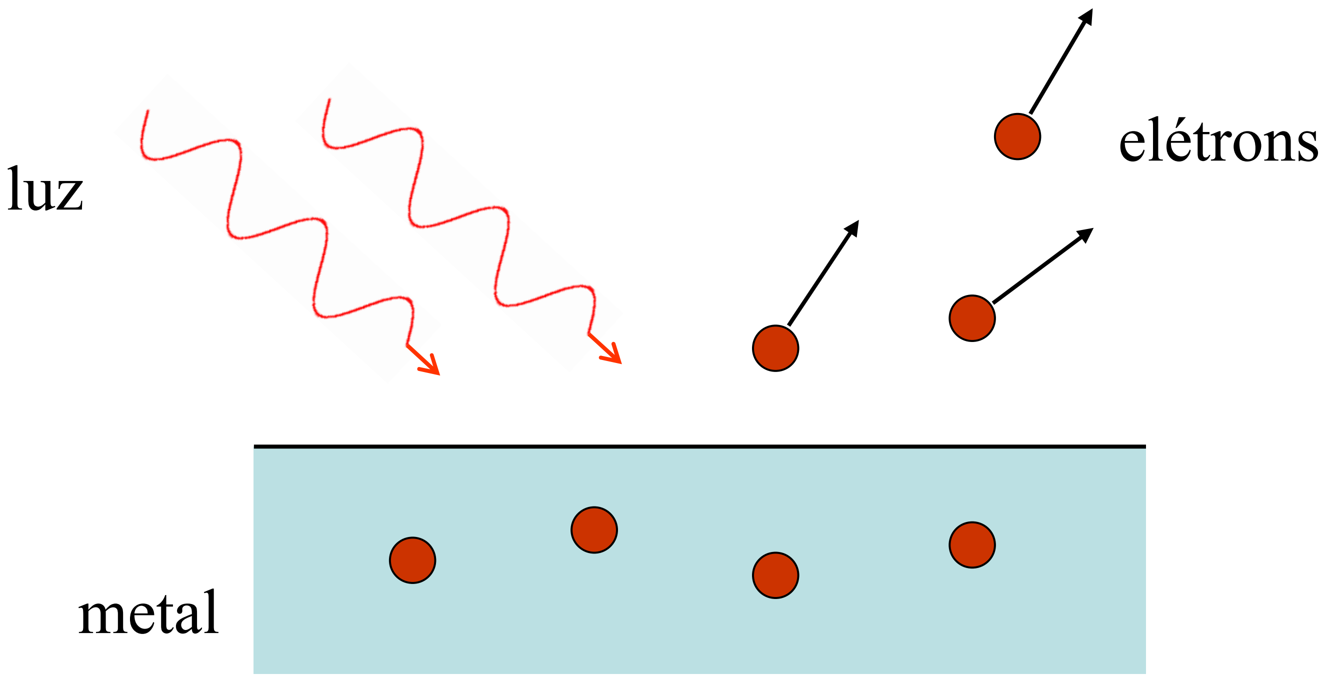
J.H. Moore and J.P. Doering, *Ion-Impact Excitation of Pure Vibrational Transitions in Diatomic Molecules*, Phys. Rev. Lett. 23 564 (1969)

Partículas de luz

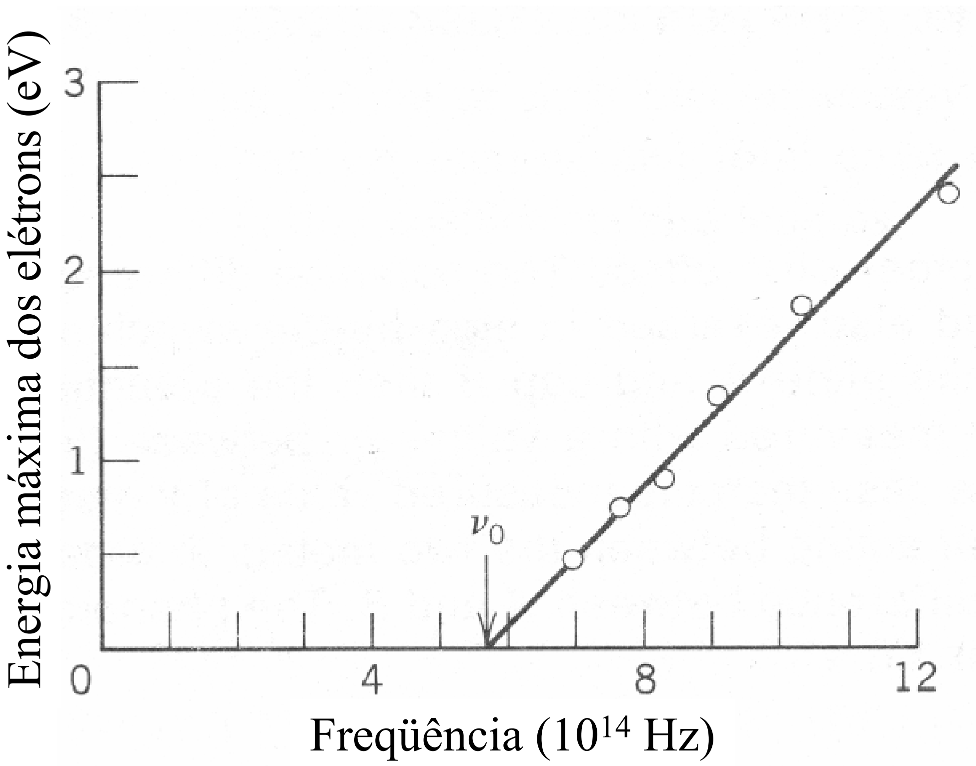


Albert Einstein

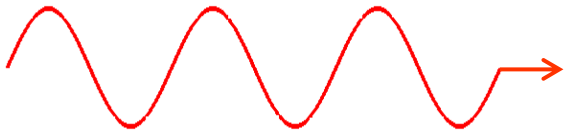
O efeito fotoelétrico



O efeito fotoelétrico

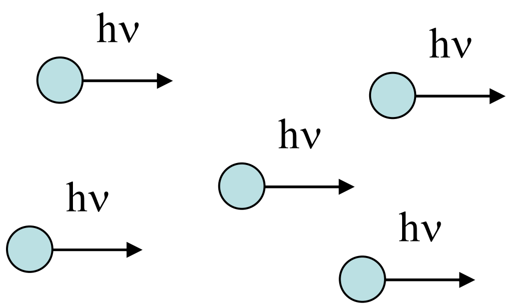


Fótons



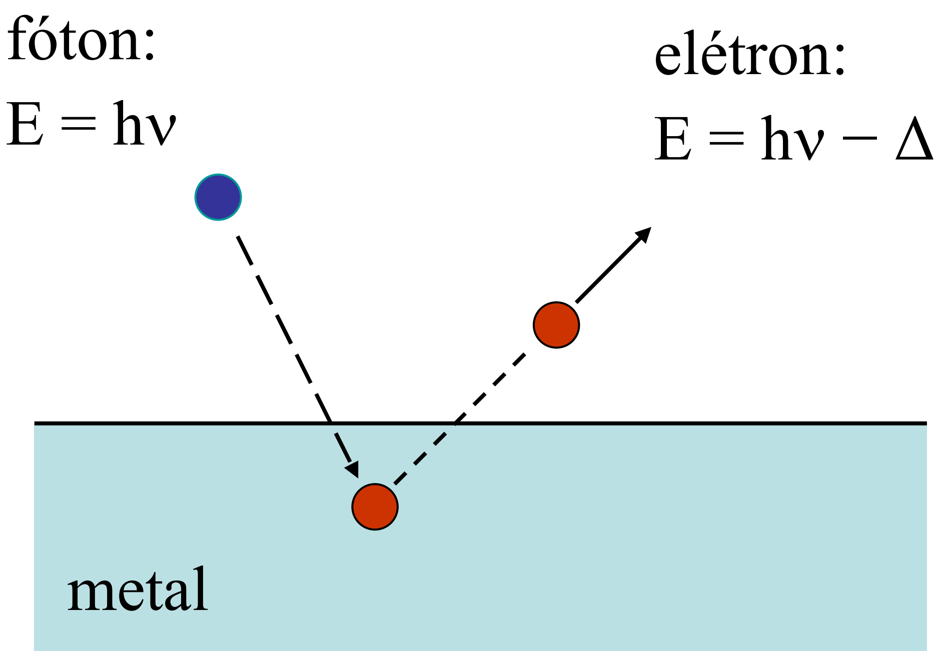
Planck:
oscilador quantizado

$$E = nh\nu$$



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

O efeito fotoelétrico



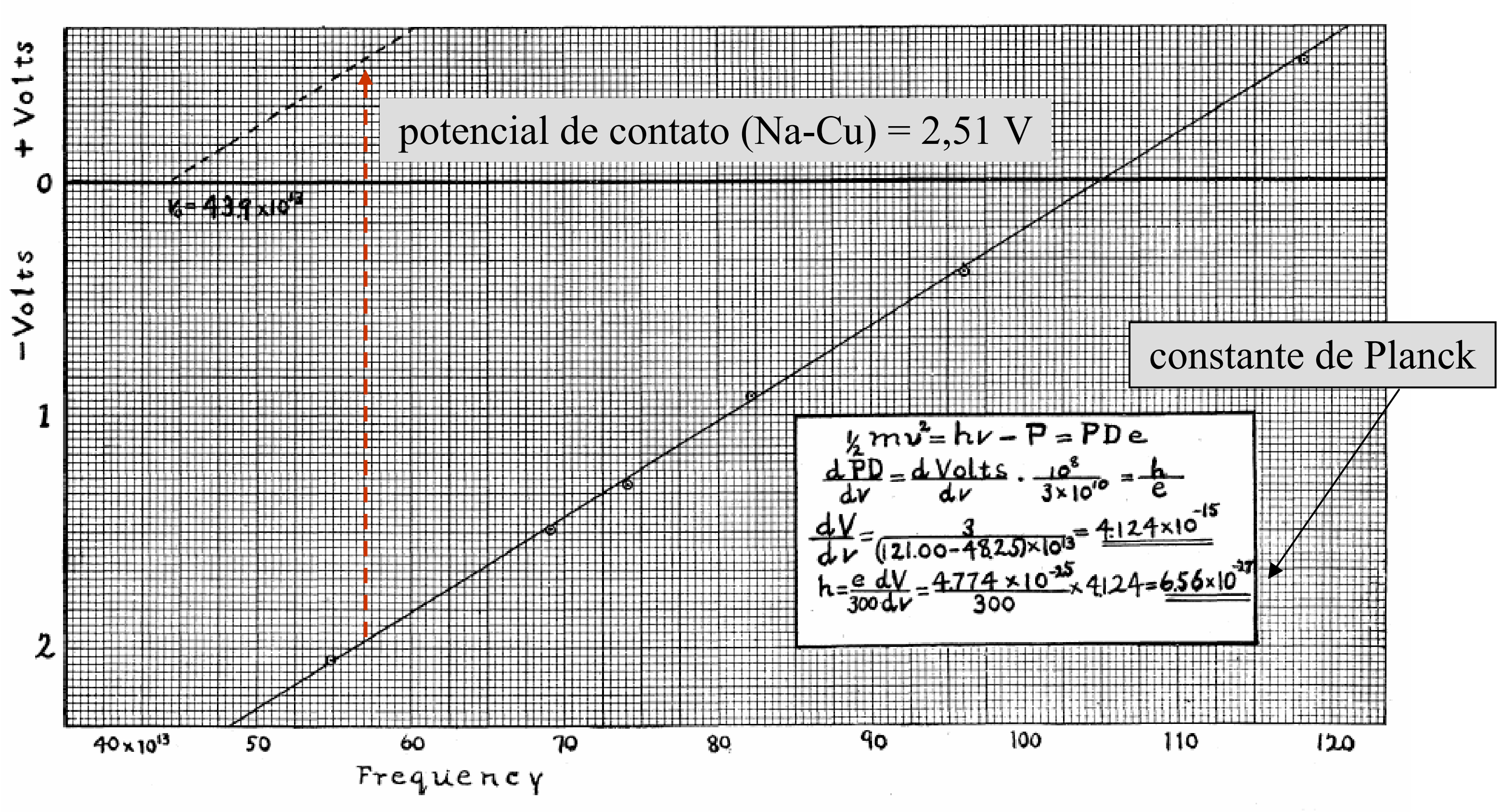
$\Delta_{min} \equiv W \leftrightarrow$ função trabalho ⇨ $E_{max} = h\nu - W$

$\nu_0 = W/h =$ 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

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

$$p = \frac{mv}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

$$E^2 = c^2p^2 + m^2c^4$$

$$v = c \quad \Rightarrow \quad m = 0 \quad \Rightarrow \quad E = cp$$

Momentum do fóton

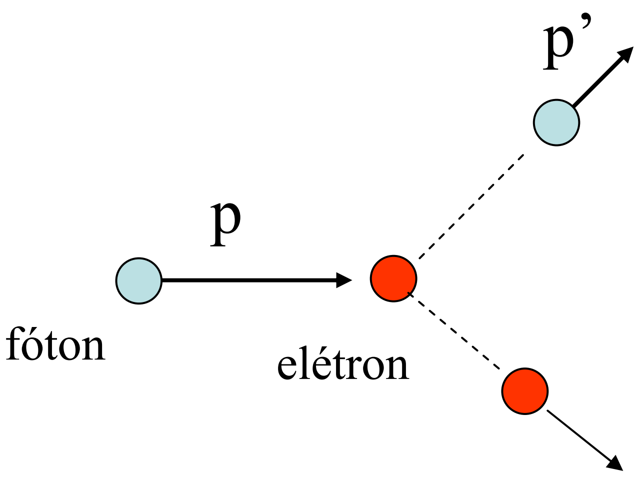
$$p = \frac{E}{c} = h\frac{\nu}{c} \quad \Rightarrow \quad \boxed{p = \frac{h}{\lambda}}$$

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

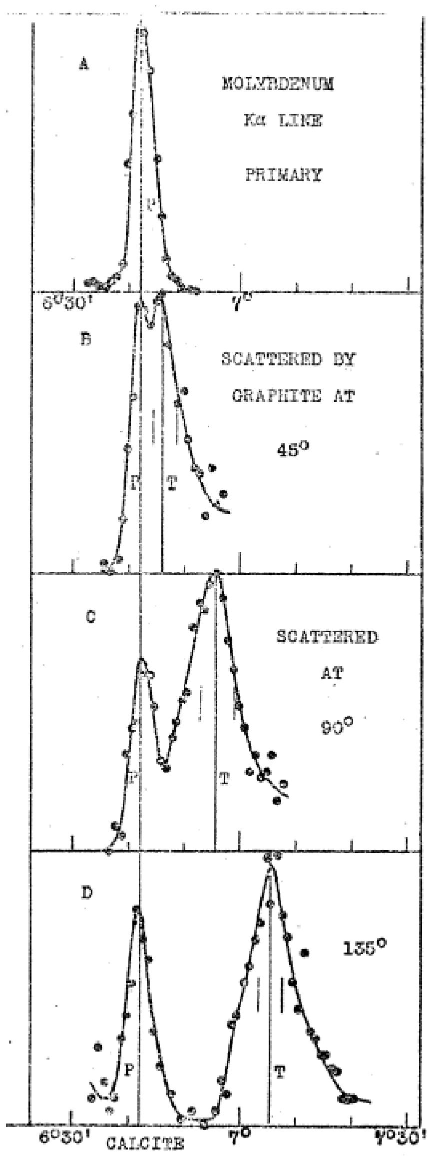
↓

número de onda

O efeito Compton

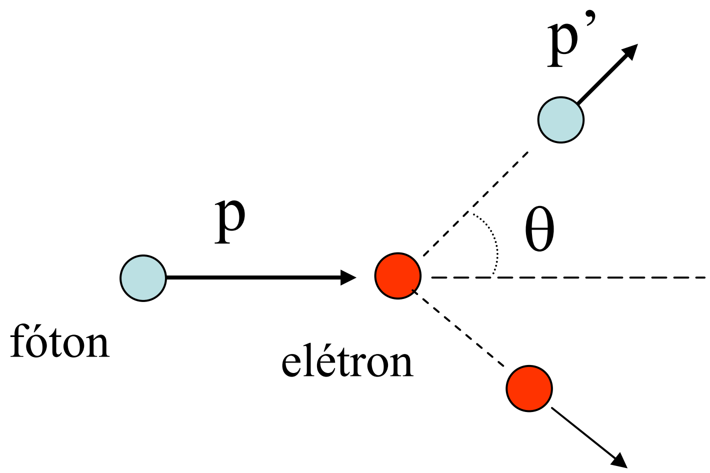


$$p' < p \quad \Rightarrow \quad \lambda' > \lambda$$



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

O efeito Compton



conservação da energia e momentum $\Rightarrow$

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

$h/m_e c$ = 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

ν

λ

→

partícula

$$E = h\nu$$

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

de Broglie (1923)

partícula

E

p

→

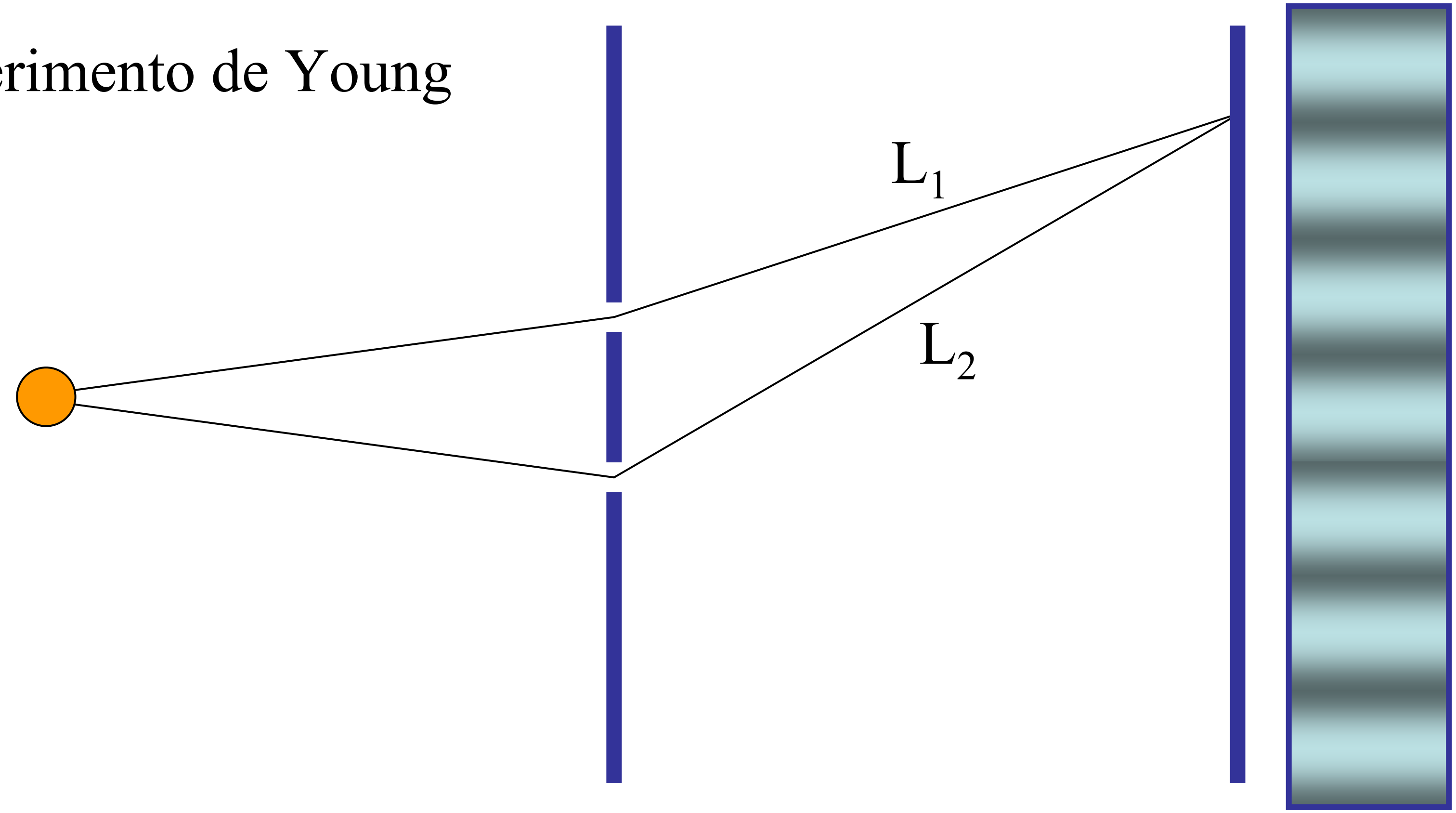
onda

$$\nu = \frac{E}{h}$$

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

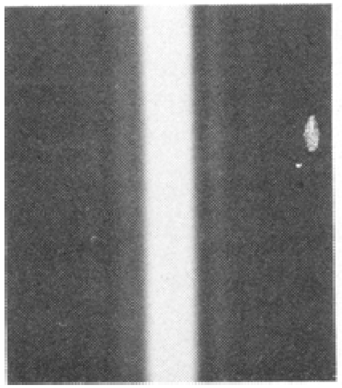
Interferência de partículas

Experimento de Young

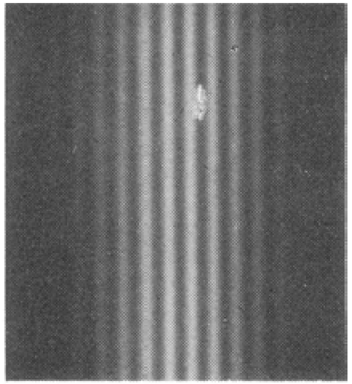


interferência construtiva: $L_1 - L_2 = n\,\lambda$

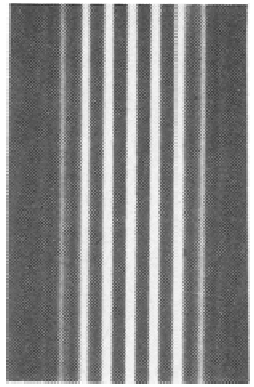
Experimento de Young: elétrons



1 fenda



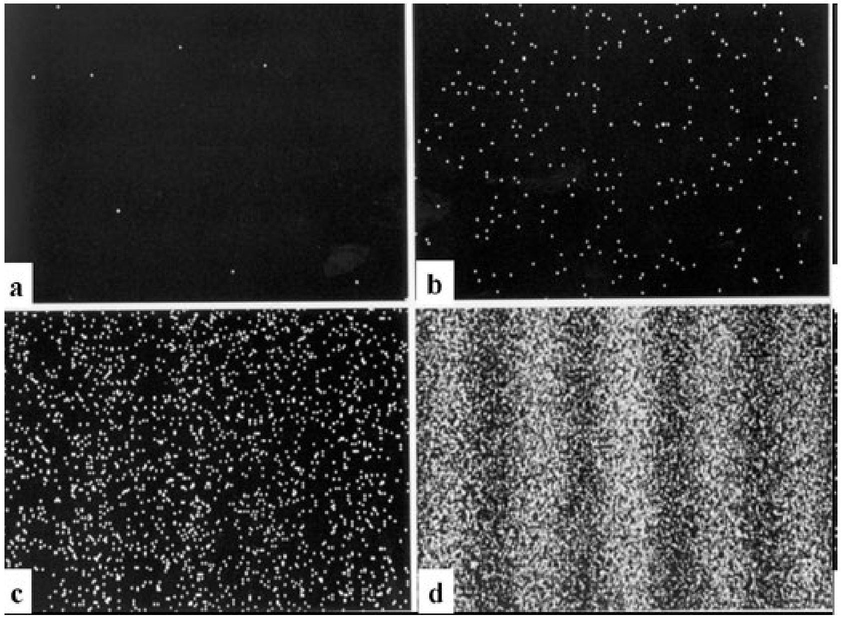
2 fendas



5 fendas

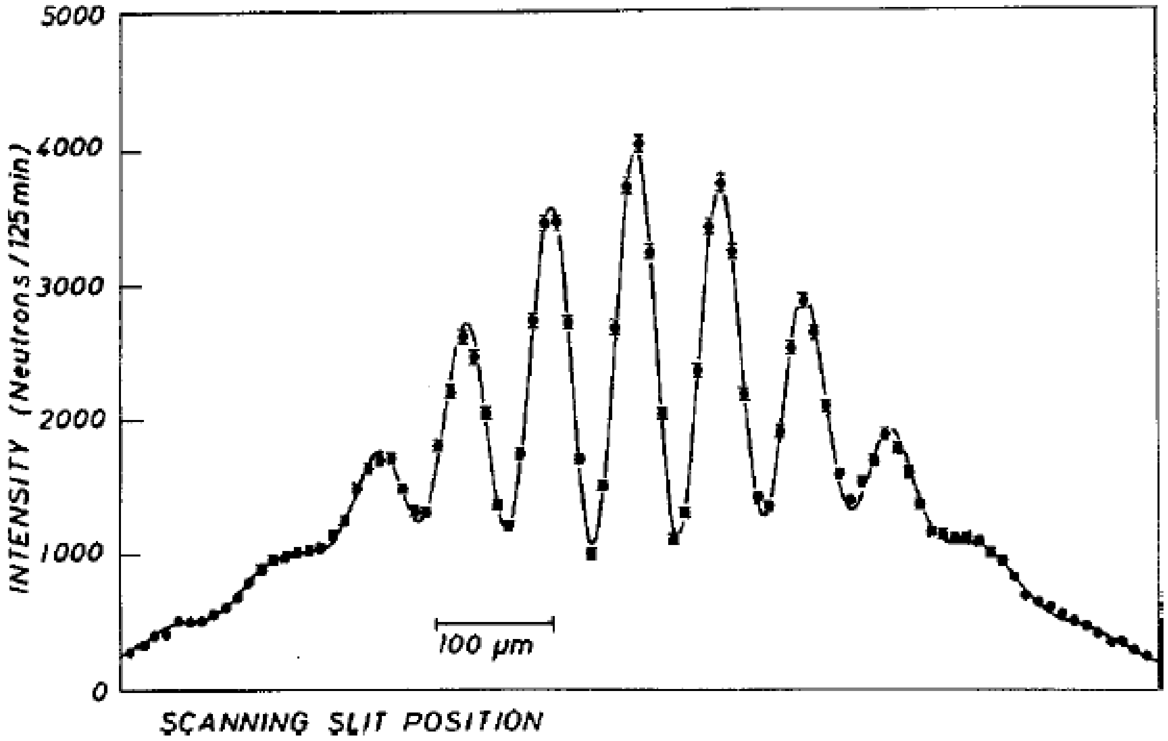
C. Jönsson, *Electron diffraction at multiple slits*, Am. J. Phys. 42, 4 (1974)

Elétrons (um a um)



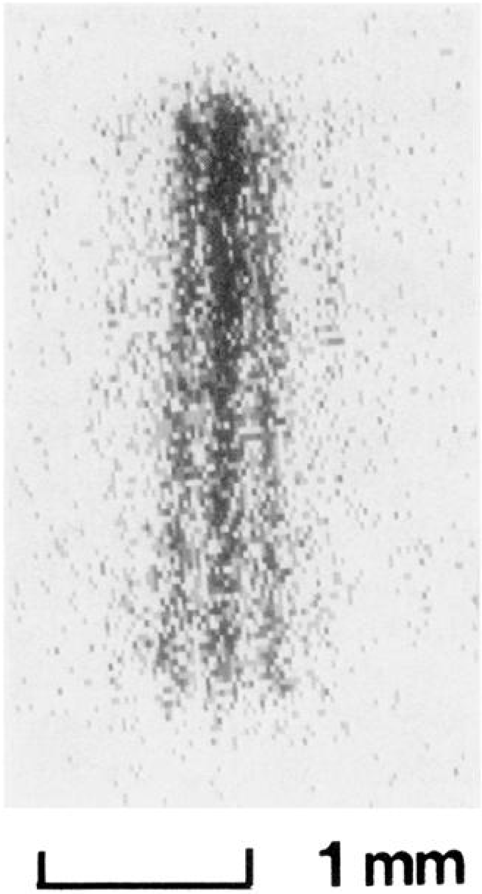
A. Tonomura et al., *Demonstration of single-electron build-up of an interference pattern*, Am. J. Phys. 57, 117 (1989)

Experimento de Young: nêutrons



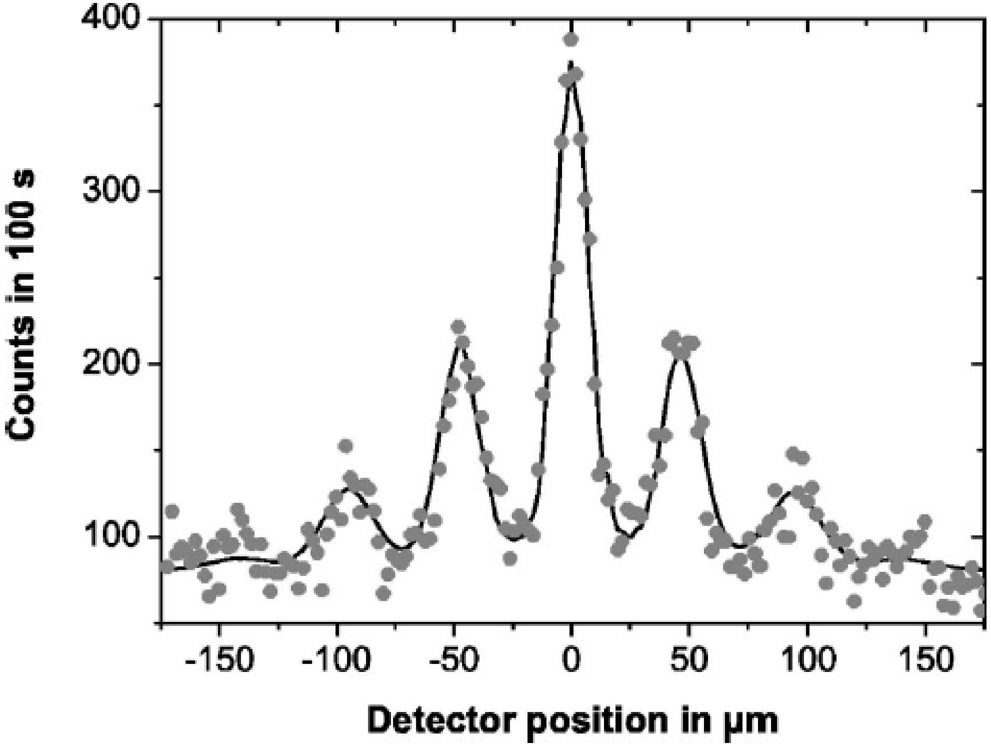
R. Gähler, A. Zeilinger, *Wave-optical experiments with very cold neutrons*, Am. J. Phys. 59, 316 (1991).

Experimento de Young : átomos de neônio



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

Experimento de Young : moléculas de C-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

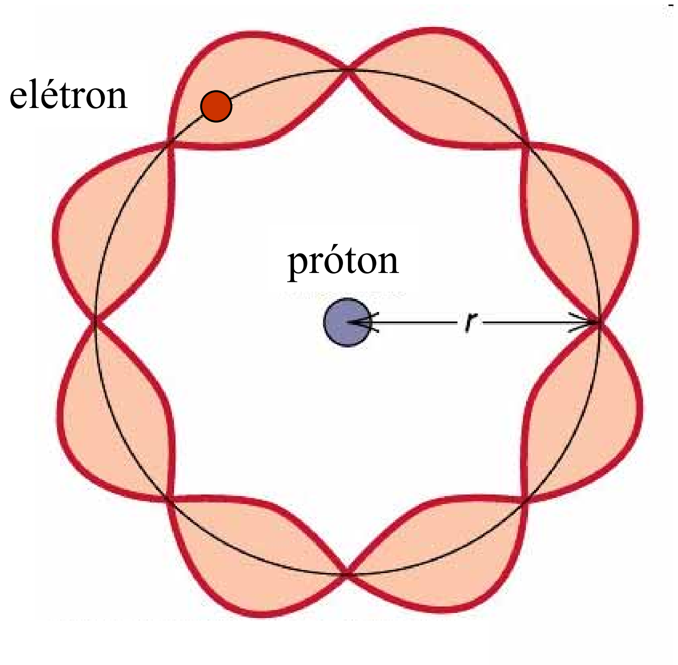
Dois “mistérios”

- Quantização da energia
- Dualidade onda-partícula

Esses dois “mistérios” estão relacionados.

A Dualidade Onda-Partícula e a Quantização

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)

$$L = n\hbar$$

A energia do átomo de hidrogênio

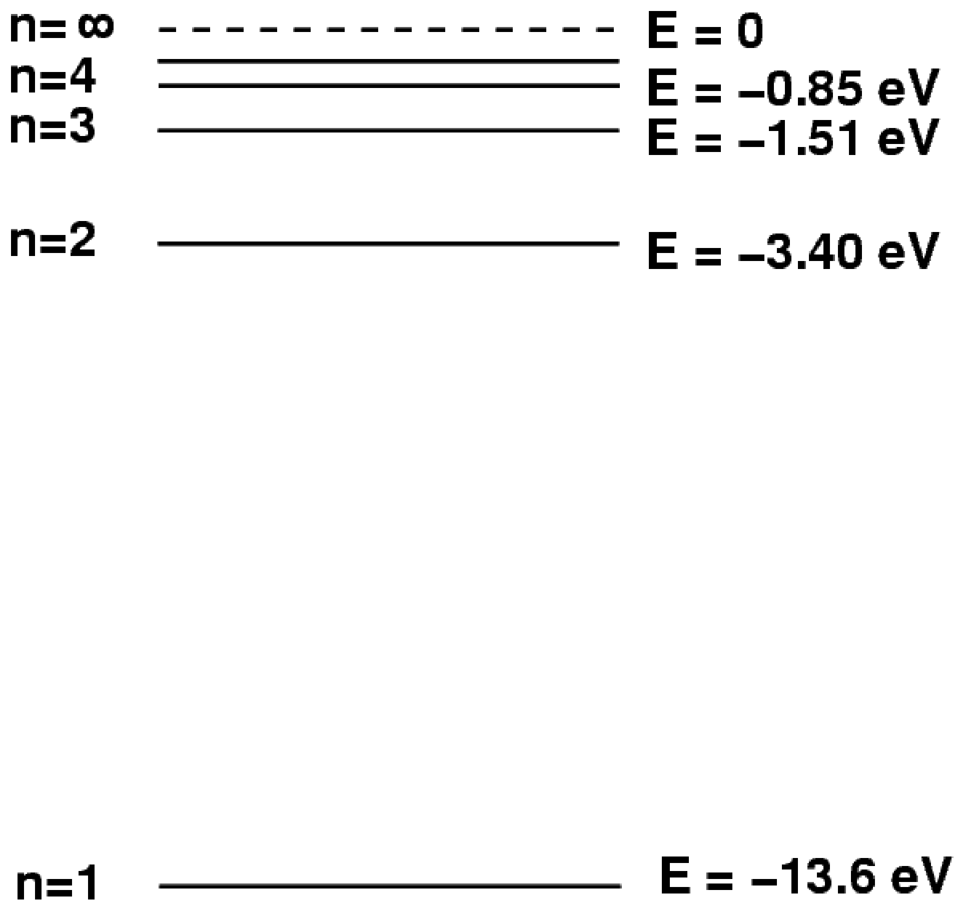
mecânica clássica (F = ma): $m\frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{r^2} \quad \Rightarrow \quad mv^2 r = e^2$

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

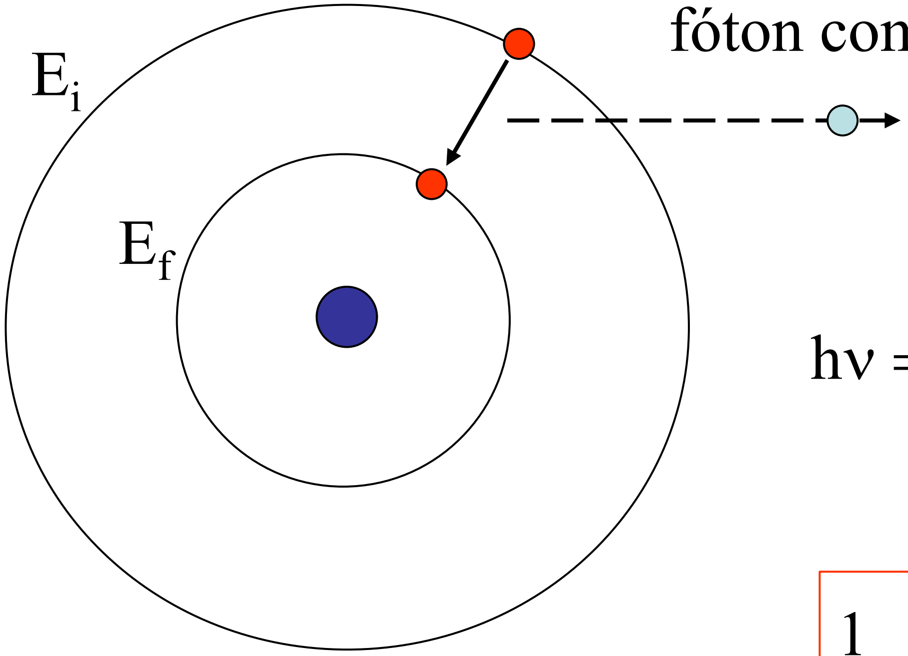
$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{r} \quad \Rightarrow \quad E = -\frac{1}{2}\frac{me^4}{\hbar^2}\frac{1}{n^2}$$

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

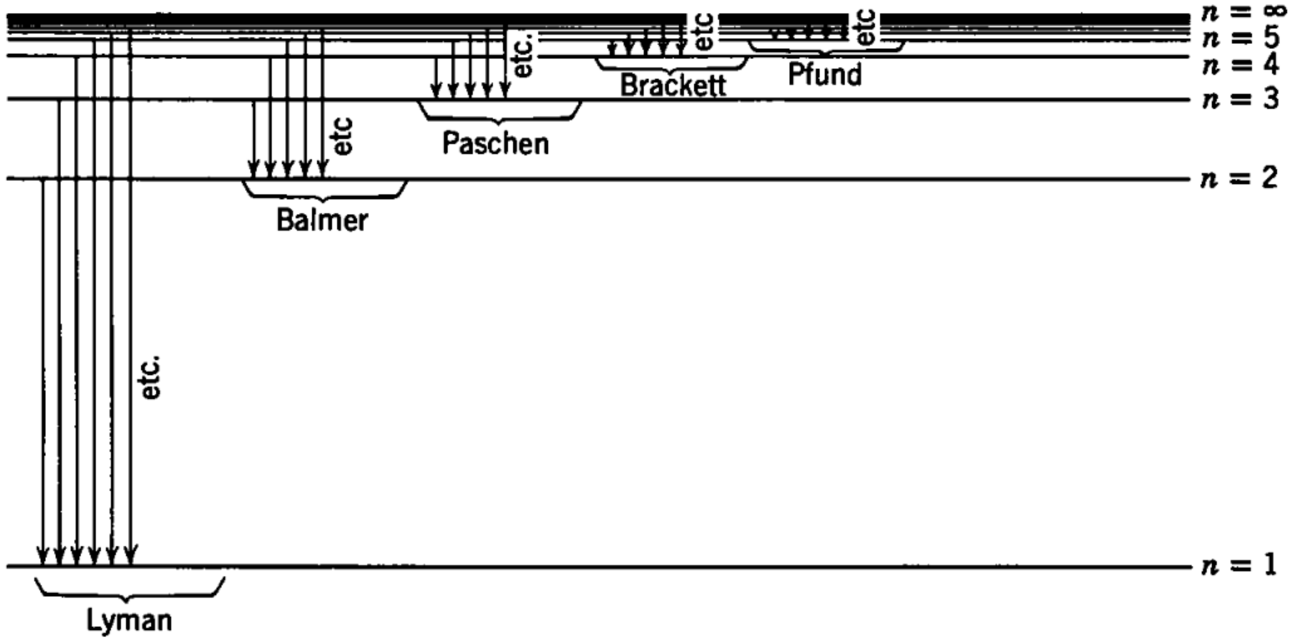
$R_H = 109{,}677\ cm^{-1}$

constante de Rydberg

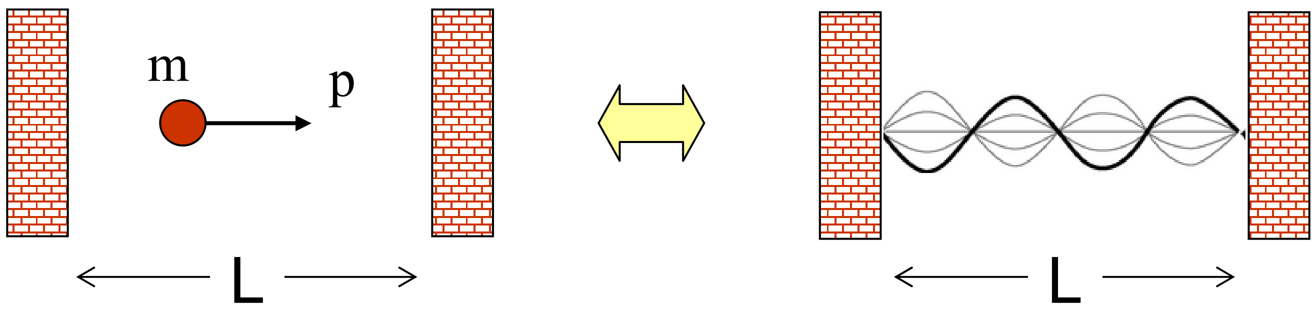
Bohr: $$R_H = \frac{1}{2} \frac{me^4}{\hbar^3 c}$$

m = massa reduzida e-p

O espectro do hidrogênio



Partícula em uma caixa



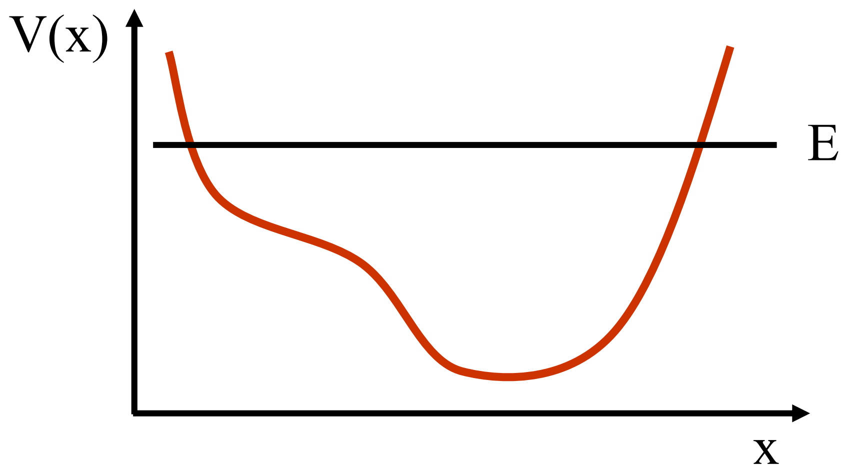
de Broglie: $$p = \frac{h}{\lambda}$$

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

⇨ $$p_n = \frac{h}{2L}n$$

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{h^2}{8mL^2}n^2$$

Partícula em um potencial V(x)

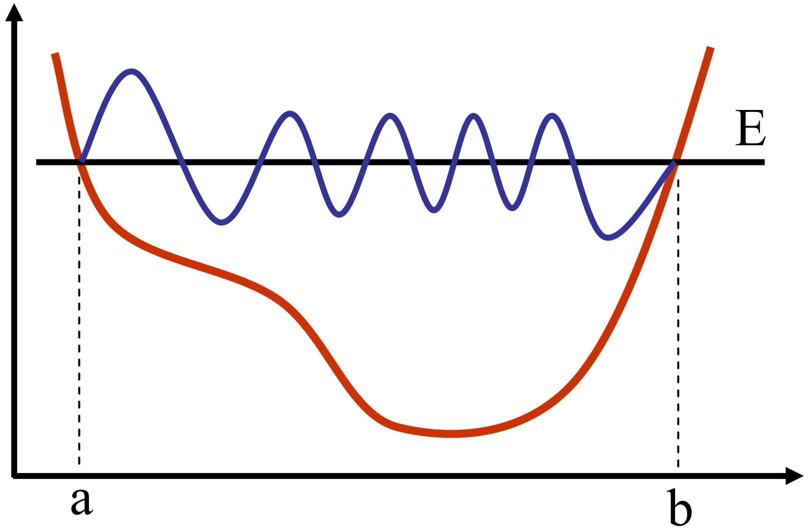


$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

$$p = \pm p(x)$$

$$p(x) = \sqrt{2m[E - V(x)]}$$

Partícula em um potencial V(x)



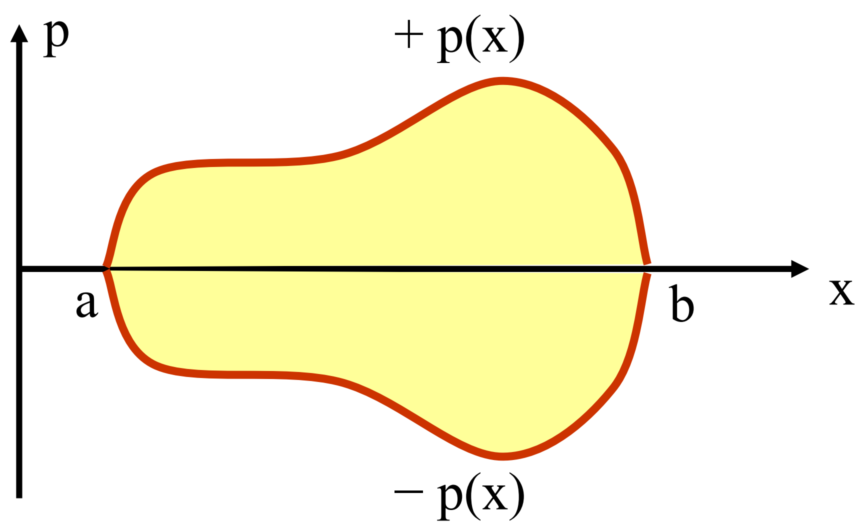
$$\lambda(x) = \frac{h}{p(x)} = \frac{h}{\sqrt{2m[E - V(x)]}}$$

$$k(x) = \frac{p(x)}{\hbar} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]}$$

Caixa: $\frac{L}{\lambda} = \frac{n}{2} \iff kL = n\pi$

Potencial: $\int_a^b \frac{dx}{\lambda(x)} = \frac{n}{2} \iff \int_a^b k(x)\,dx = n\pi$

Regra de quantização de Bohr-Sommerfeld

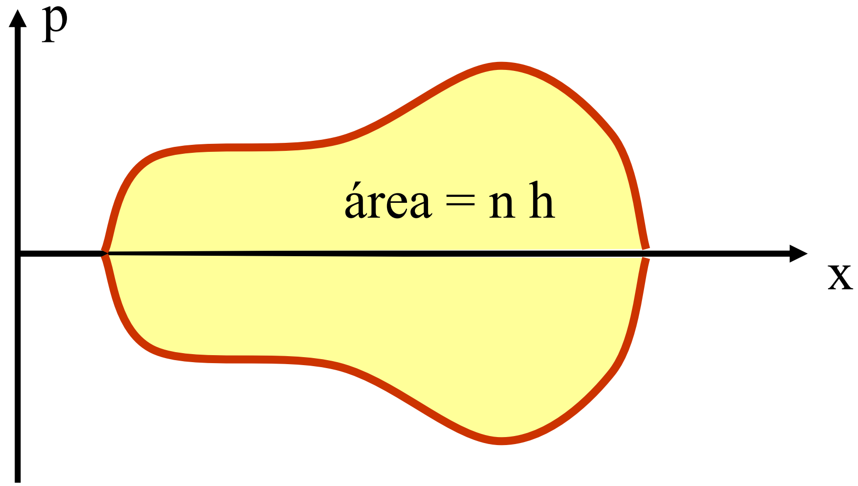


$$\int_a^b k(x)\,dx = n\pi$$

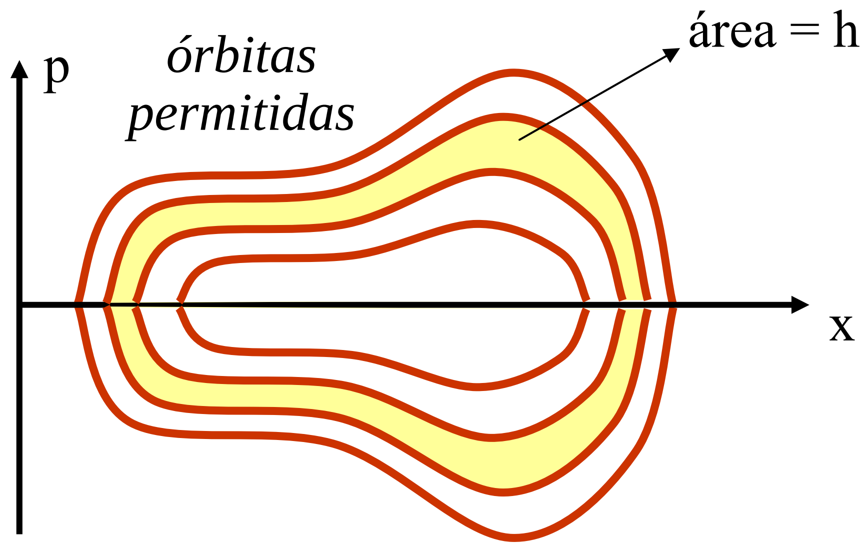
$$\int_a^b p(x)\,dx = n\pi\hbar = \frac{nh}{2}$$

$$\oint p\,dx = nh$$

Regra de quantização de Bohr-Sommerfeld



$$\oint p dx = nh$$



área no espaço
de fase = “ação”

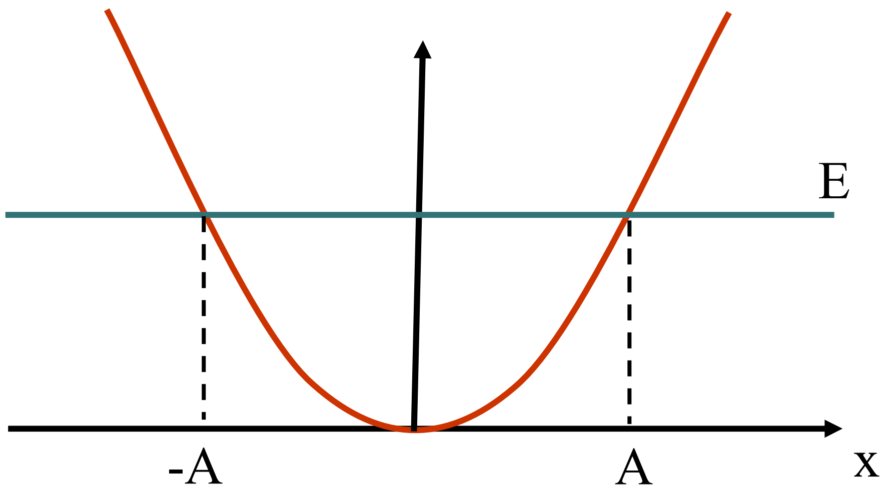
⇩

a ação é quantizada

⇩

h é o quantum de ação

Oscilador harmônico via Bohr-Sommerfeld



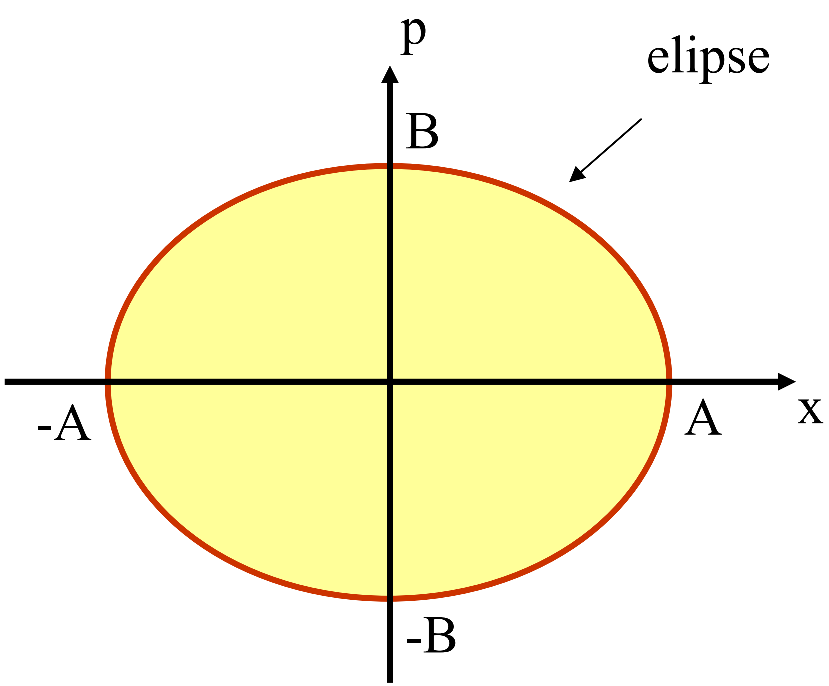
$$V(x) = \frac{1}{2} K x^2$$

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} K x^2$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\frac{p^2}{2mE} + \frac{x^2}{2E/K} = \frac{p^2}{B^2} + \frac{x^2}{A^2} = 1}$$

elipse no espaço de fase

Oscilador harmônico via Bohr-Sommerfeld



$$\oint p dx = nh$$

área da elipse = $\pi\, A\, B = nh$

$$A = \sqrt{2E/K} \qquad B = \sqrt{2mE}$$

⇓

$$\pi \sqrt{\frac{2E}{K}} \sqrt{2mE} = 2\pi \sqrt{\frac{m}{K}} E = nh$$

⇓

postulado de Planck ⟺

$$E = n \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{K}{m}} = n\hbar\omega$$

Momento angular via Bohr-Sommerfeld

$$\oint p\,dq = nh$$

p e *q*: variáveis “conjugadas”

$$\Downarrow$$

$$\oint L\,d\theta = nh$$

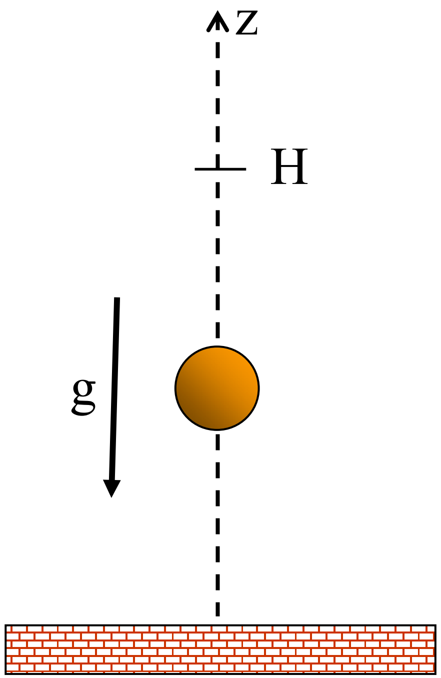
$$\Downarrow$$

$$L \times 2\pi = nh$$

$$\Downarrow$$

$$L = n\hbar \quad \Longleftrightarrow \quad \text{postulado de Bohr}$$

Partícula quicando via Bohr-Sommerfeld



$$E = mgH = \frac{p^2}{2m} + mgz$$

$$\boxed{\oint p\,dz = nh}$$

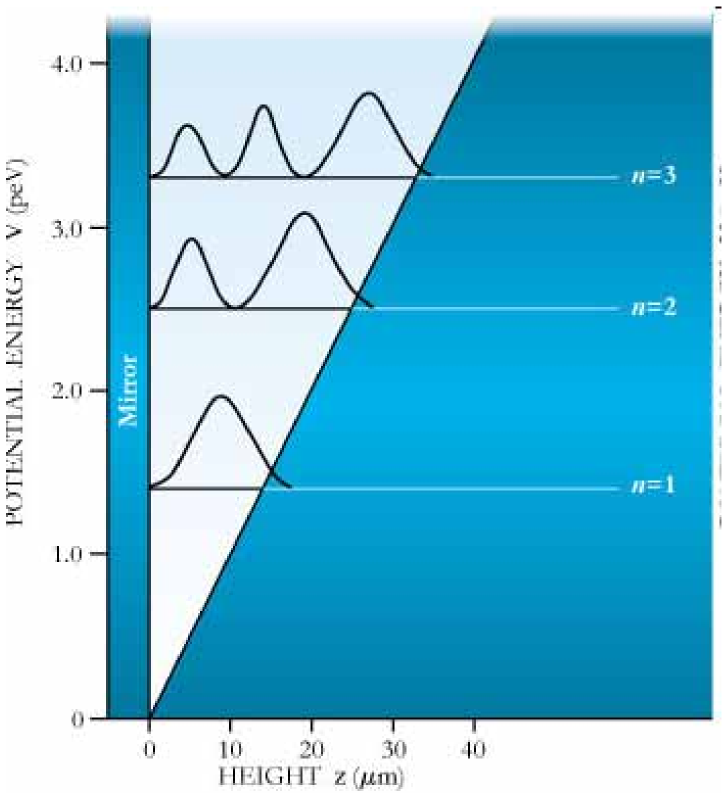
⇓

$$\frac{4}{3}\sqrt{2m^2 g}\, H^{3/2} = nh$$

⇓

$$\boxed{H = \left(\frac{9h}{32m^2 g}\right)^{1/3} n^{1/3}}$$

Nêutrons no campo gravitacional da Terra



$$H = a\,n^{2/3}$$

$$a = \left(\frac{9h^2}{32m^2 g} \right)^{1/3}$$

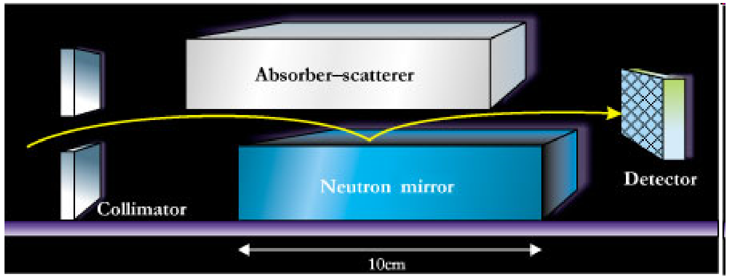
$$a = 16{,}5\ \mu m$$

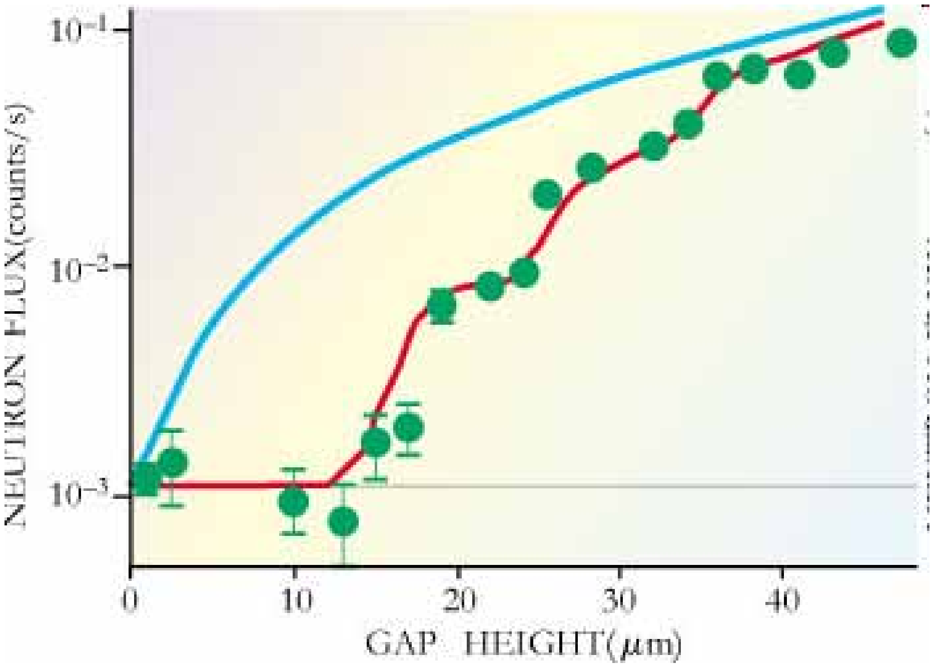
$$H_1 = 16{,}5\ \mu m$$

$$H_2 = 26{,}2\ \mu m$$

$$H_3 = 34{,}3\ \mu m$$

Nêutrons no campo gravitacional da Terra

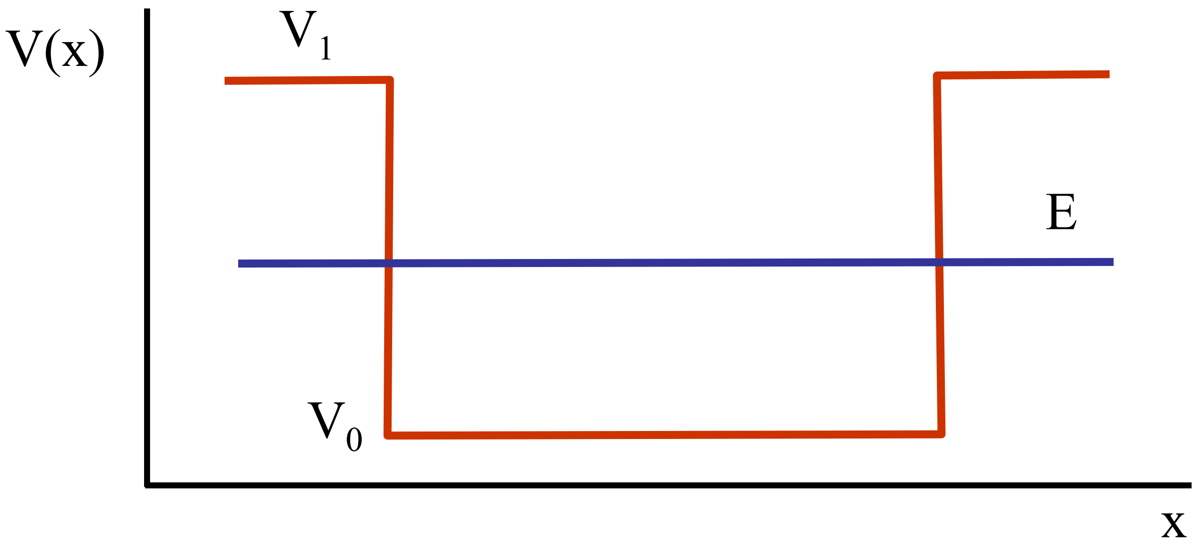




V. V. Nesvizhevsky et al., *Quantum states of neutrons in the Earth's gravitational field*, Nature 415, 297-299 (2002).

Mais Consequências da Dualidade Onda-Partícula

Tunelamento



$$p_0 = \sqrt{2m(E - V_0)}$$

$$p_1 = \sqrt{2m(E - V_1)} = i\sqrt{2m(V_1 - E)}$$

⇨ momentum imaginário, energia cinética negativa: proibido "classicamente"

Tunelamento

$$p_0 = \sqrt{2m(E - V_0)}$$

⇨ $k_0 = \sqrt{2m(E - V_0)} / \hbar$

⇨ onda de de Broglie $= A \,\mathrm{sen}(k_0 x) + B \cos(k_0 x)$

$$p_1 = \sqrt{2m(E - V_1)}$$

⇨ $k_1 = \sqrt{2m(E - V_1)} / \hbar = i\kappa_1 \,, \quad \kappa_1 = \sqrt{2m(V_1 - E)} / \hbar$

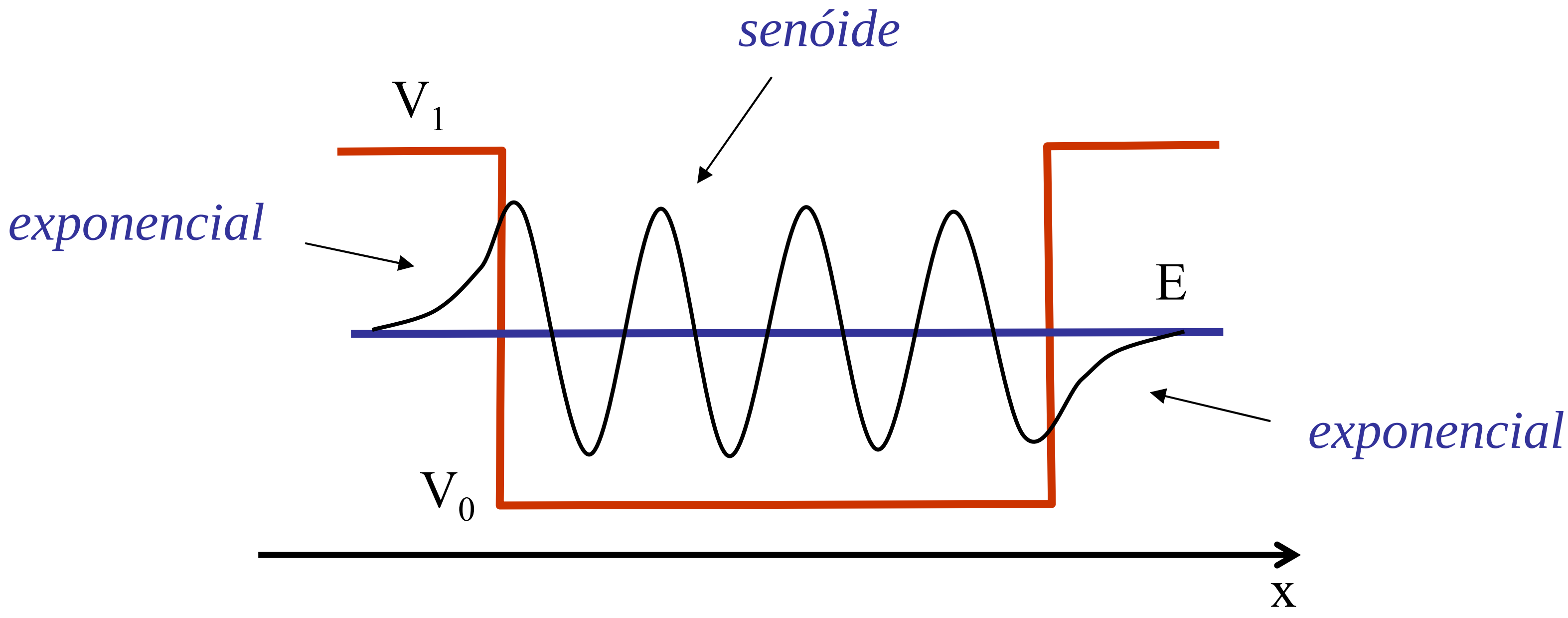
⇨ onda de de Broglie $= A \,\mathrm{sen}(k_1 x) + B \cos(k_1 x)$

$$= A' \exp(ik_1 x) + B' \exp(-ik_1 x)$$

$$= A' \exp(-\kappa_1 x) + B' \exp(\kappa_1 x)$$

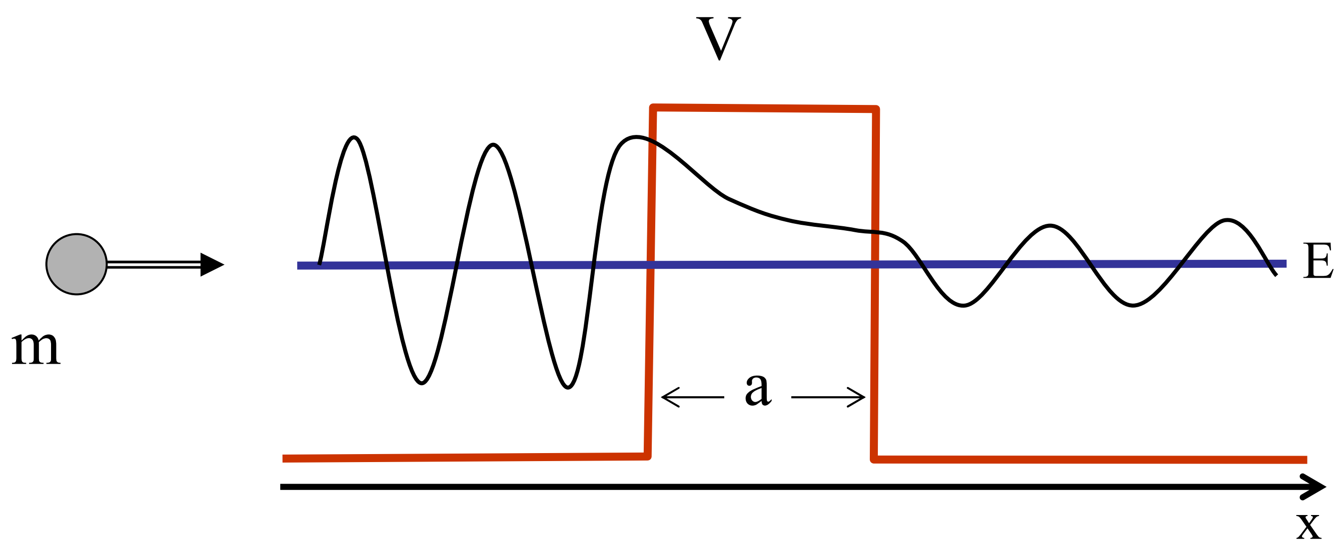
Tunelamento

A onda de de Broglie penetra em regiões onde, pela física clássica, a partícula não poderia ir.



penetração na região classicamente proibida ⇨ $\Delta x = 1/\kappa_1 = \dfrac{\hbar}{\sqrt{2m(V_1 - E)}}$

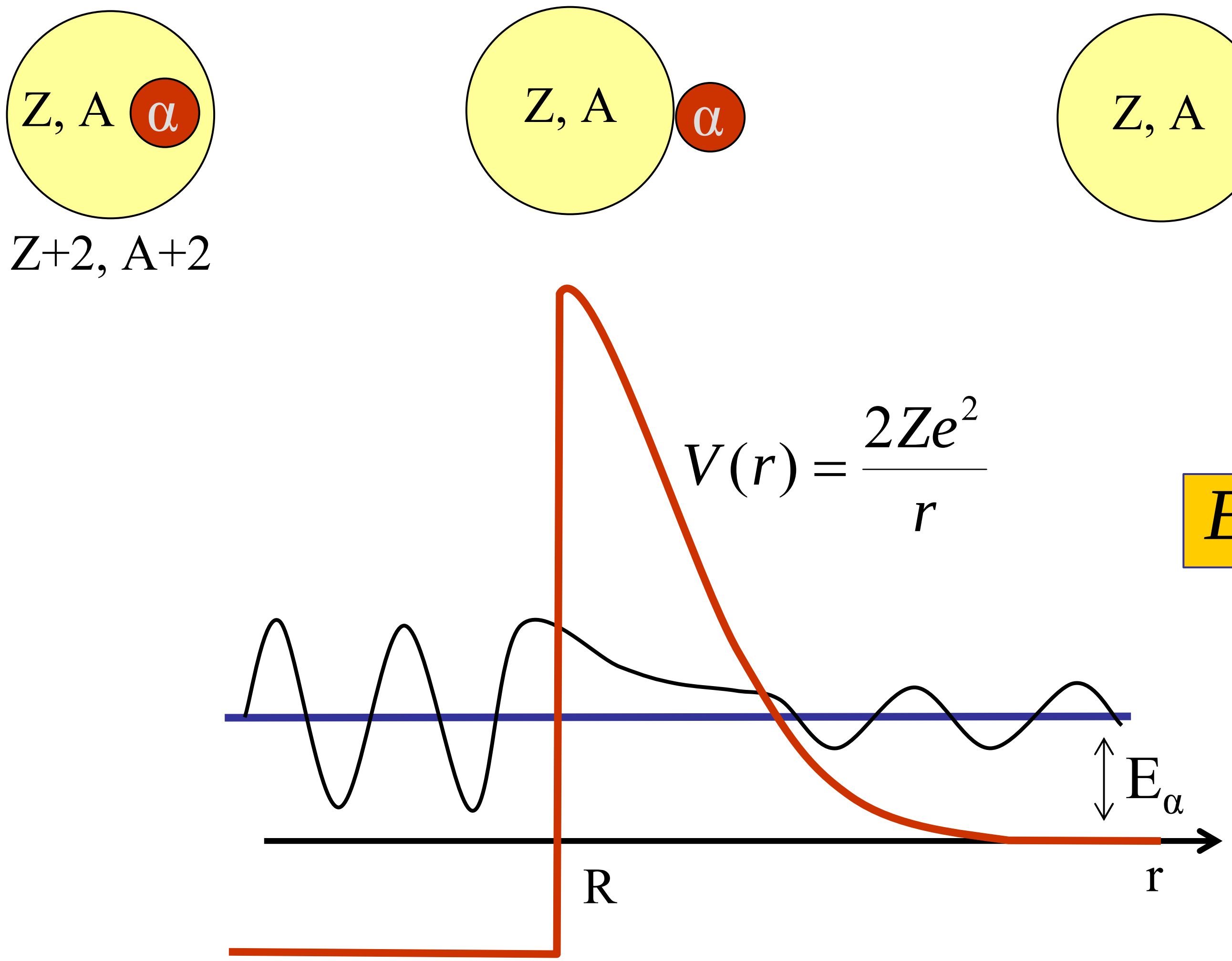
Tunelamento



atenuação da onda
de de Brolglie:

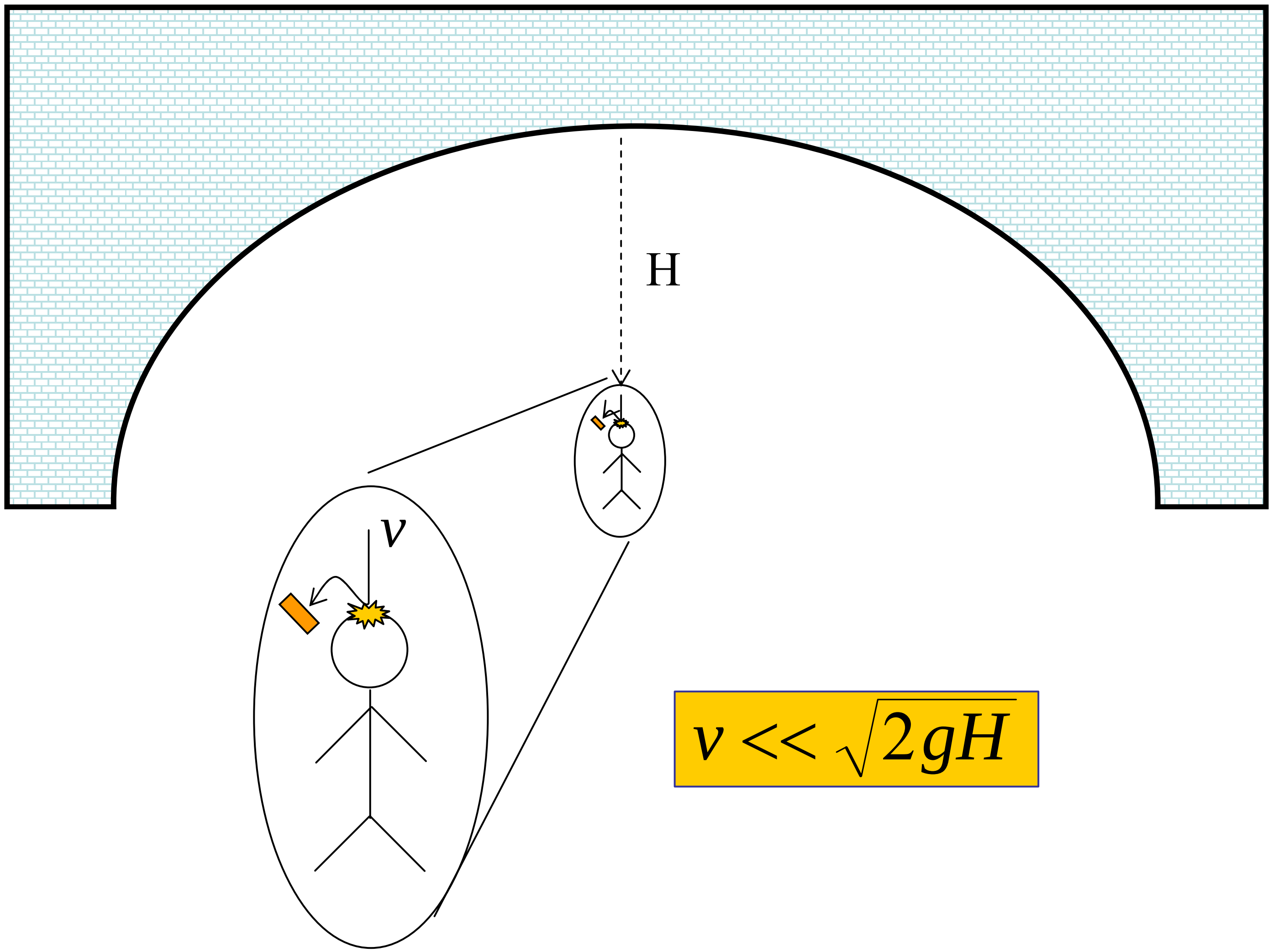
$$\sim \exp(-\kappa a) = \exp\left(-\frac{a\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}\right)$$

Decaimento alfa



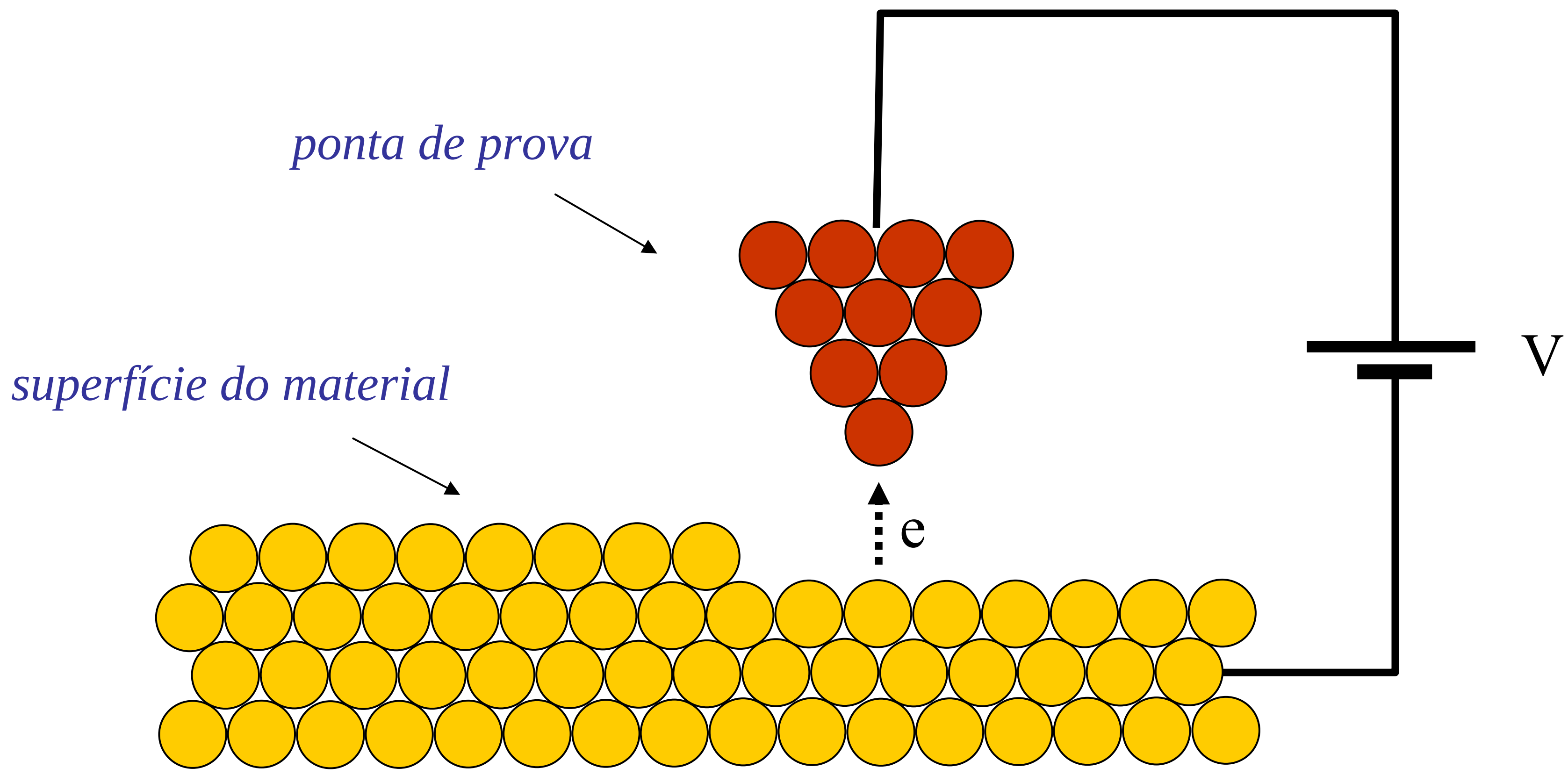
$E_\alpha << V(R)$

Decaimento alfa

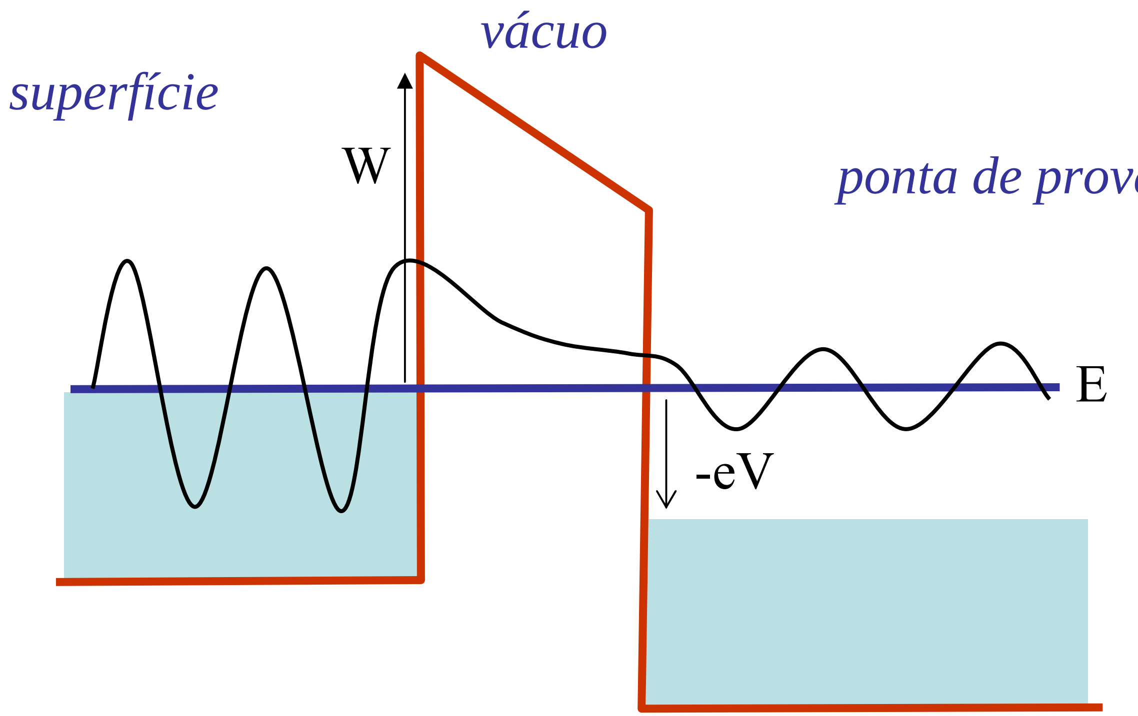


$$v << \sqrt{2gH}$$

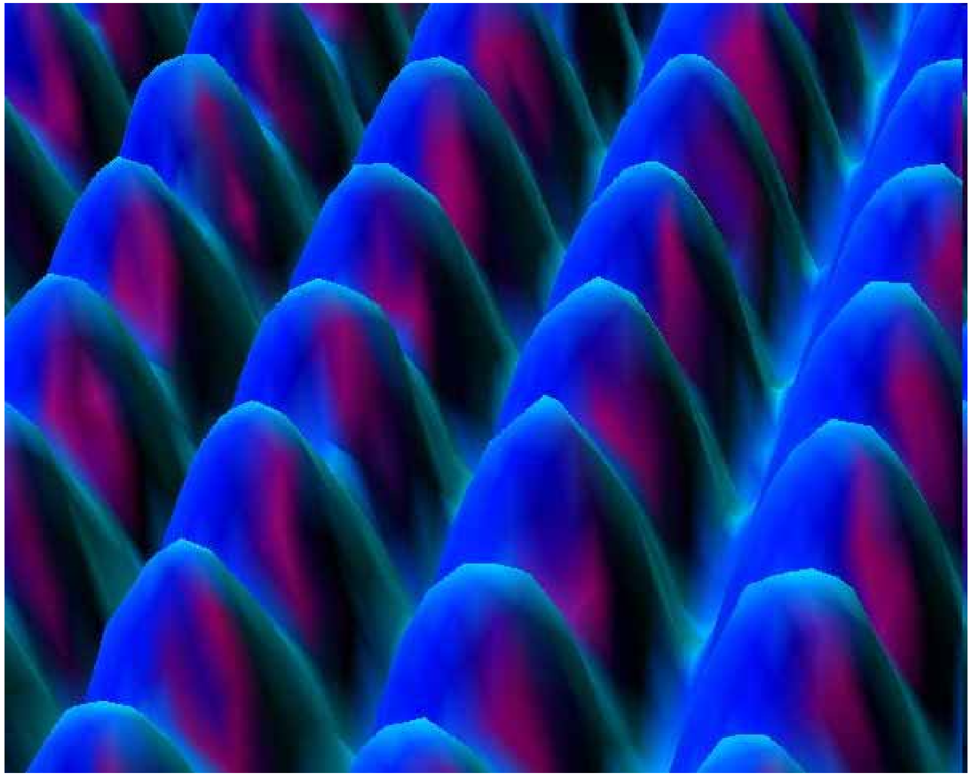
Microscopia de tunelamento



Microscopia de tunelamento



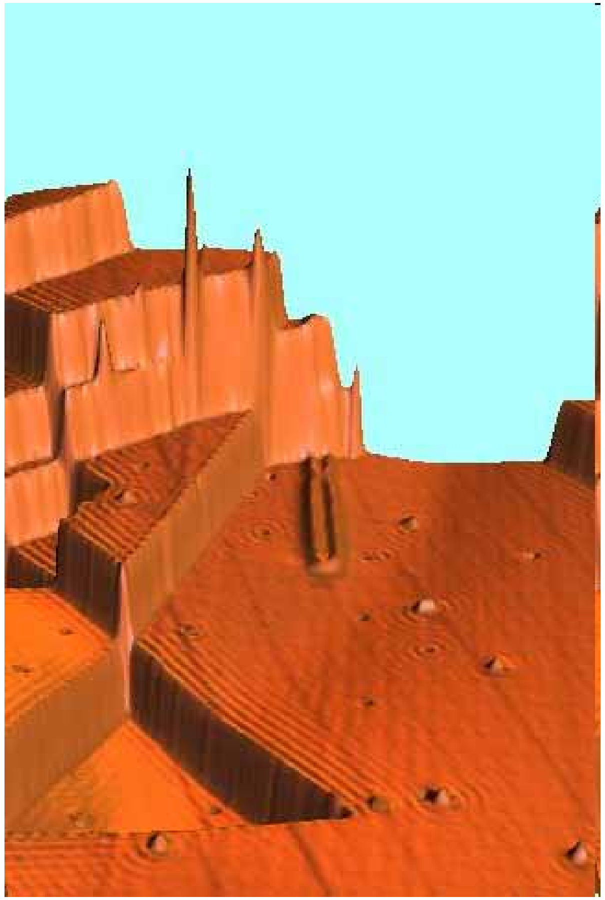
Microscopia de tunelamento



superfície de níquel

http://www.almaden.ibm.com/vis/stm/gallery.html

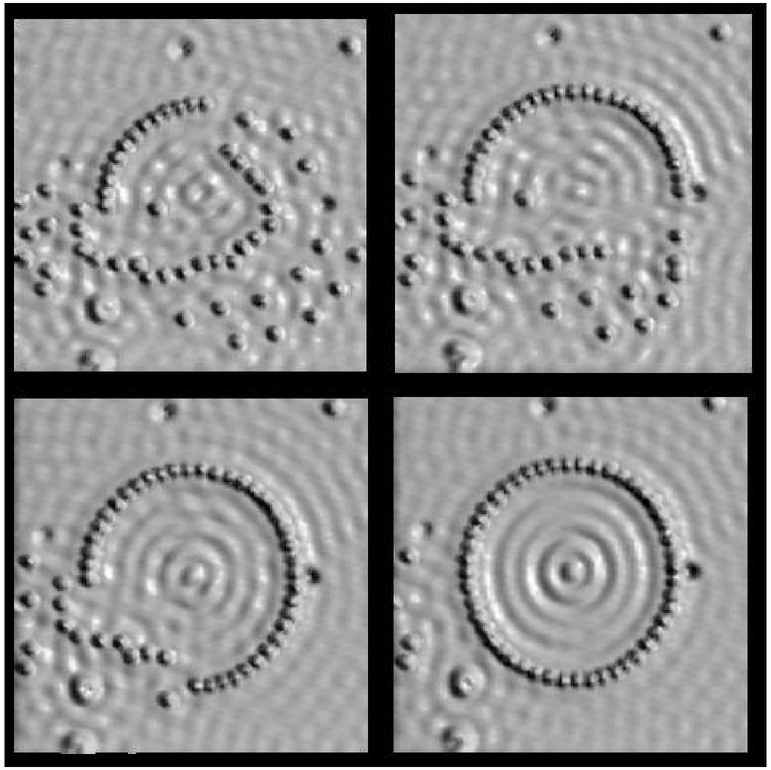
Microscopia de tunelamento

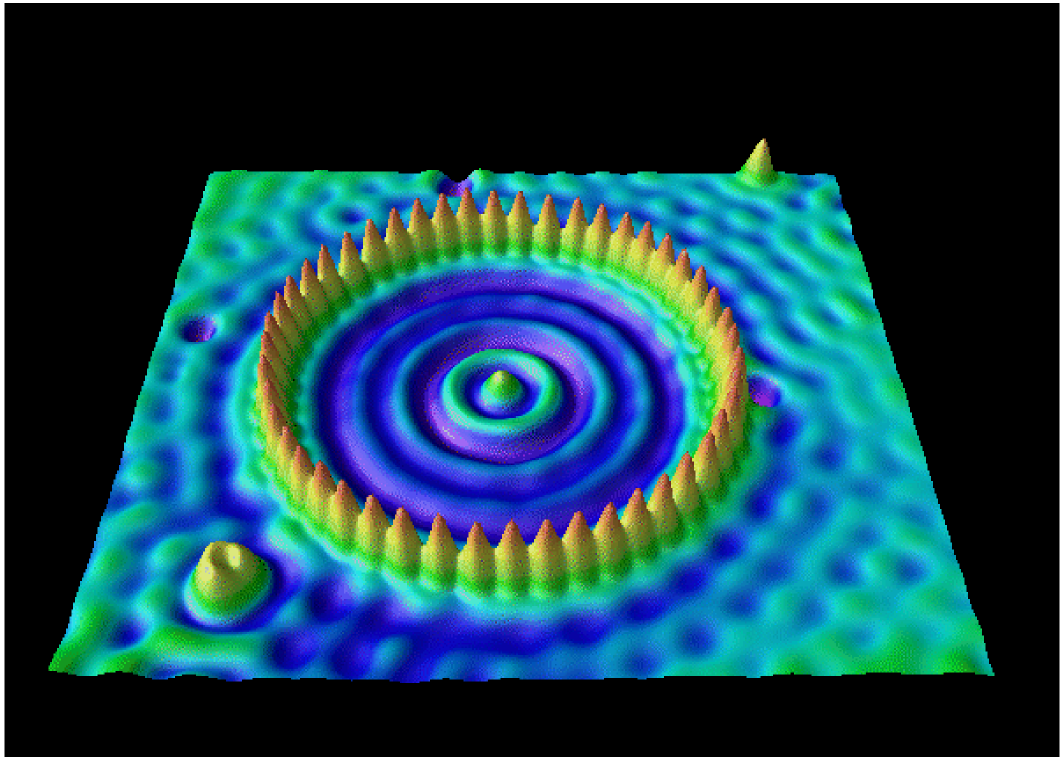


ondas de elétrons em
superfície de cobre

http://www.almaden.ibm.com/vis/stm/gallery.html

Elétrons numa caixa circular

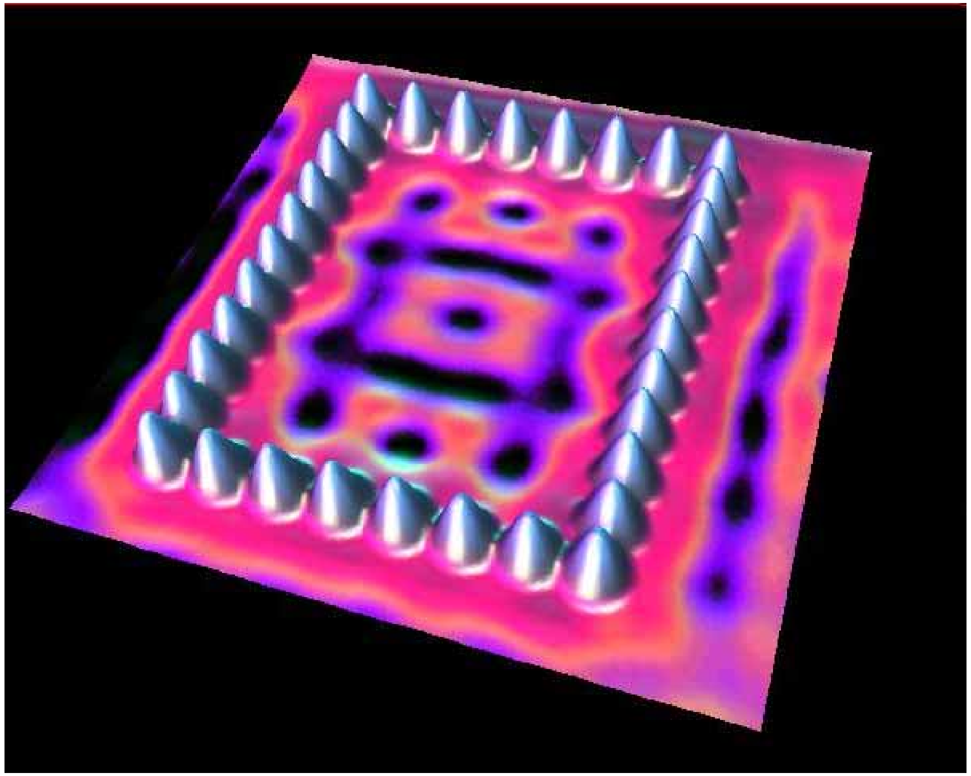




“curral” feito com 48 átomos de ferro sobre uma superfície de cobre

http://www.almaden.ibm.com/vis/stm/gallery.html

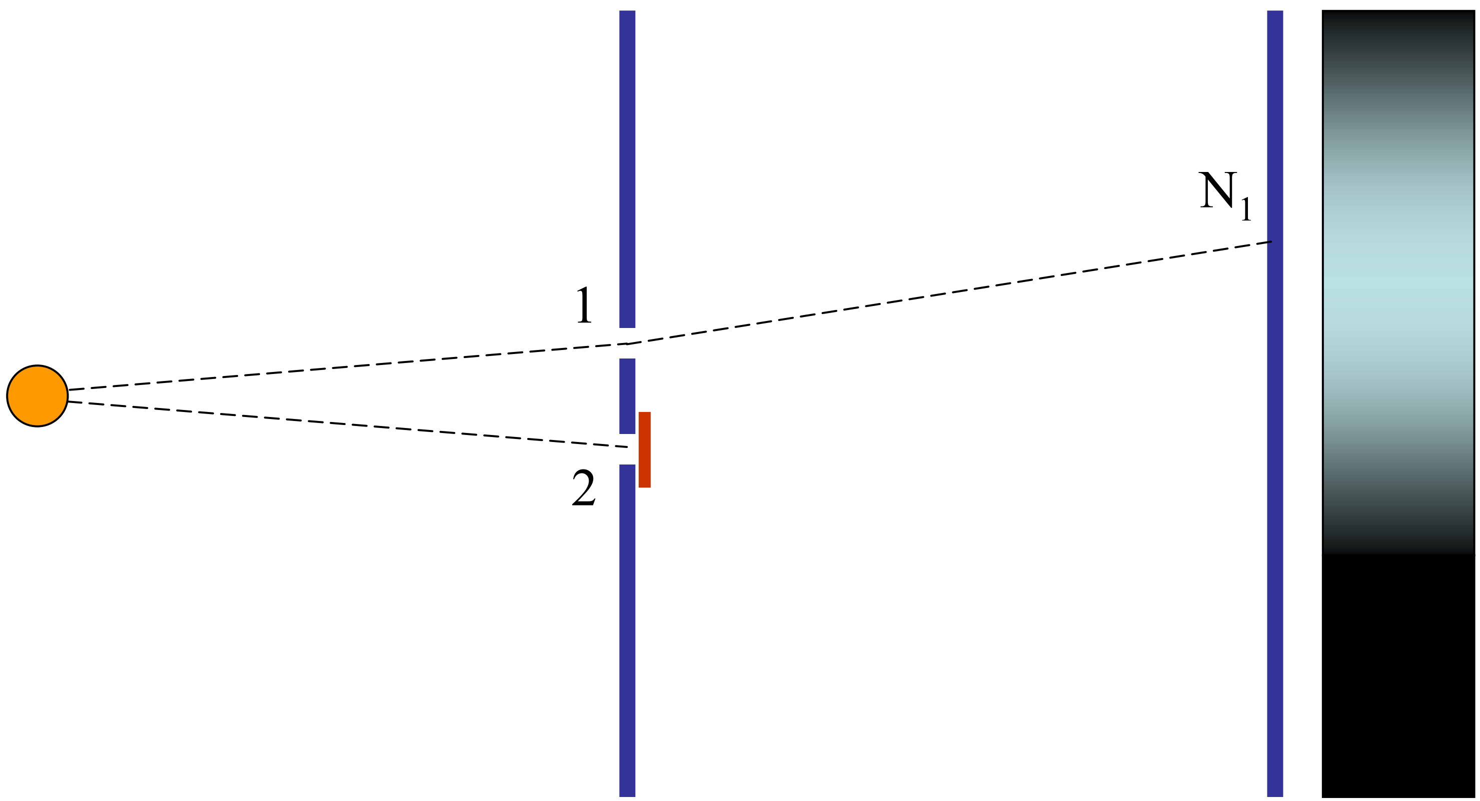
Elétrons numa caixa retangular



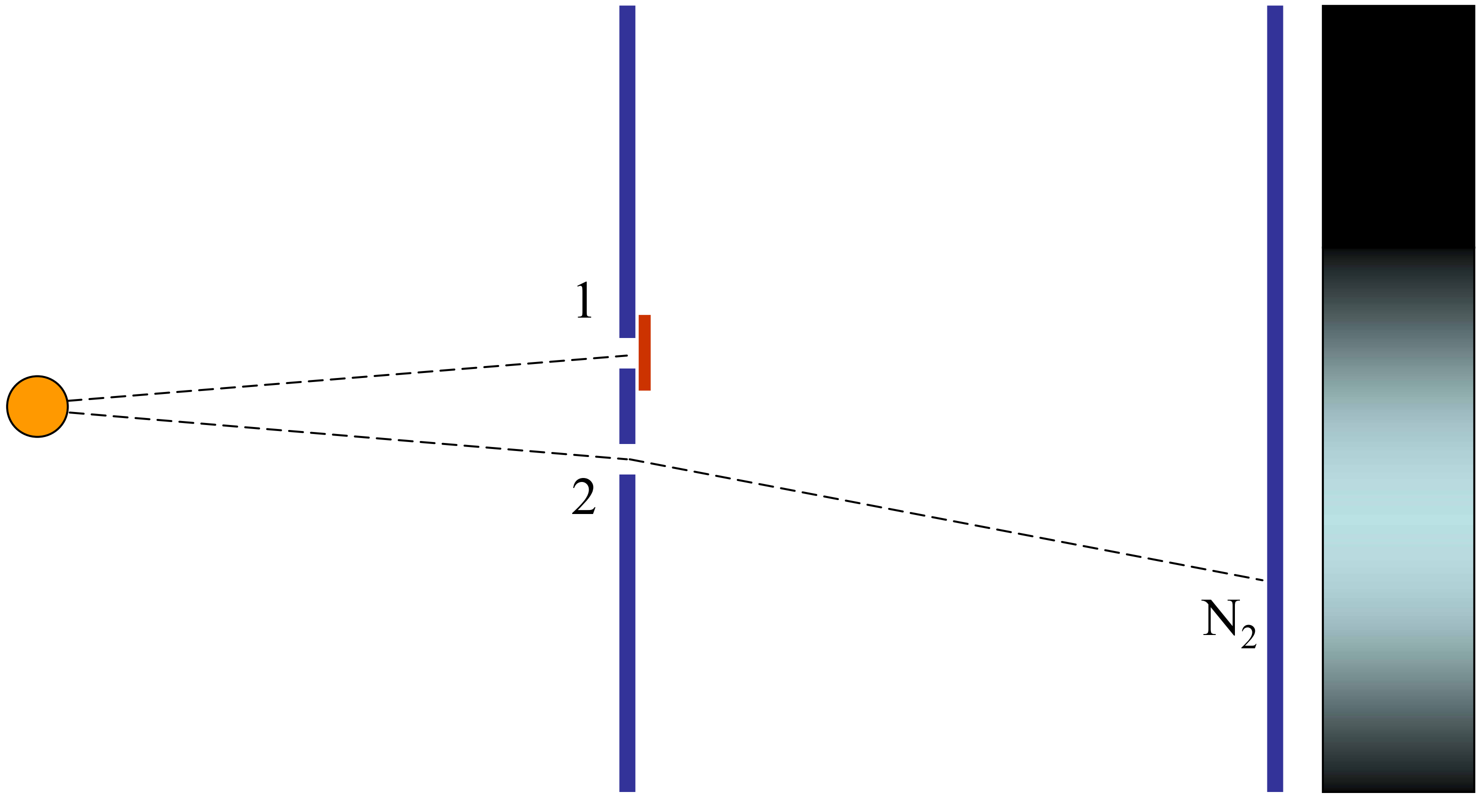
http://www.almaden.ibm.com/vis/stm/gallery.html

O único mistério

Experimento de dupla fenda com partículas

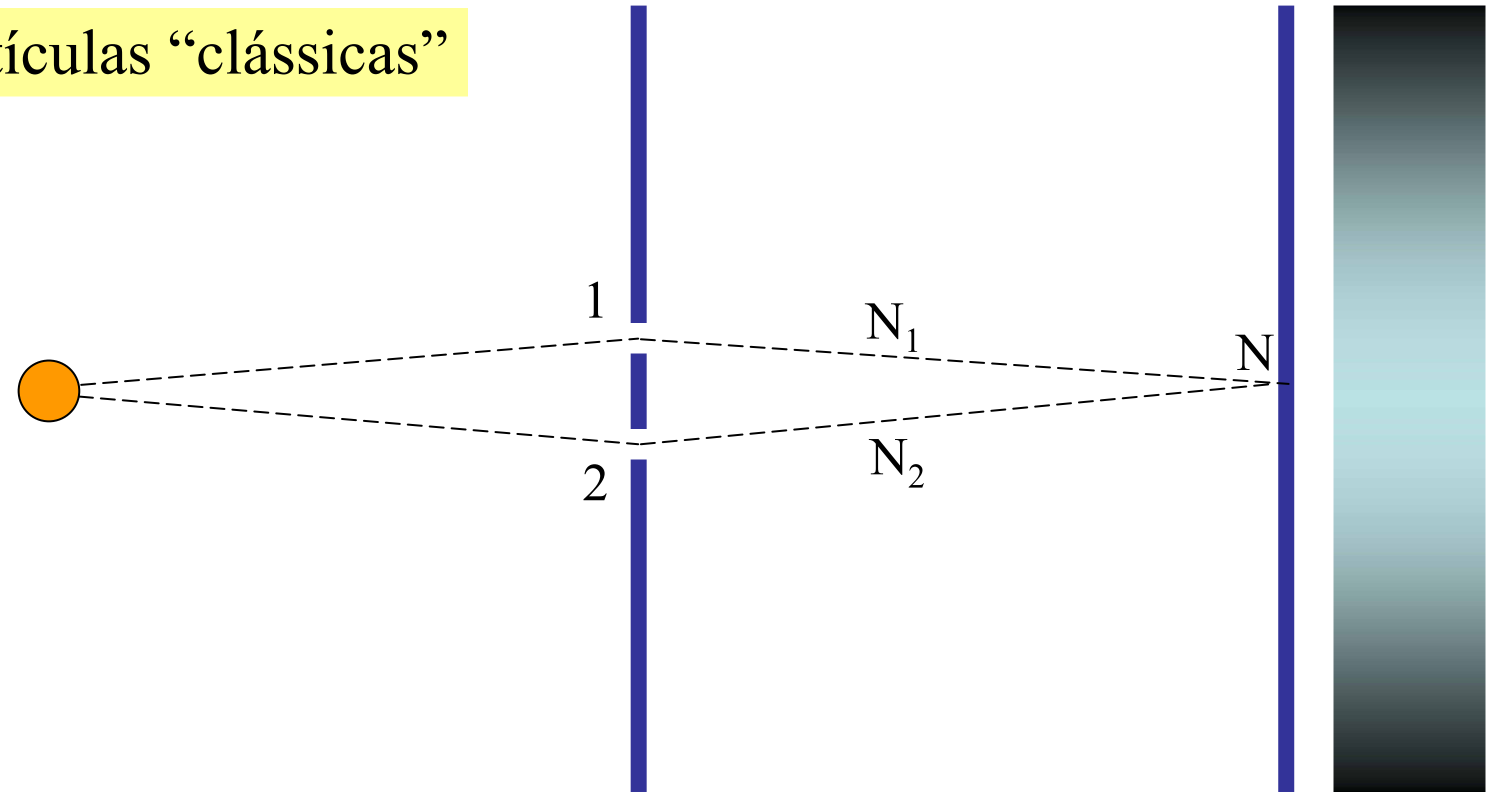


Experimento de dupla fenda com partículas



Experimento de dupla fenda com partículas

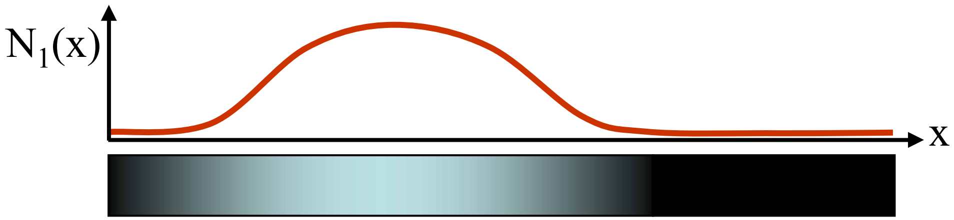
Partículas "clássicas"



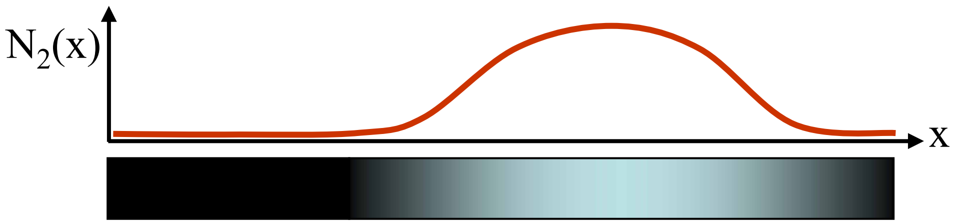
Cada partícula passa *ou* pela fenda 1 *ou* pela fenda 2 $\Rightarrow$ $N = N_1 + N_2$

Partículas clássicas

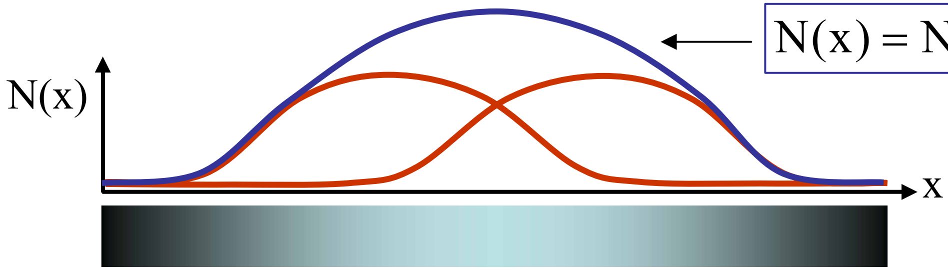
Cada partícula passa *ou* pela fenda 1 *ou* pela fenda 2 $\Rightarrow$ $N = N_1 + N_2$



apenas a fenda 1 aberta



apenas a fenda 2 aberta

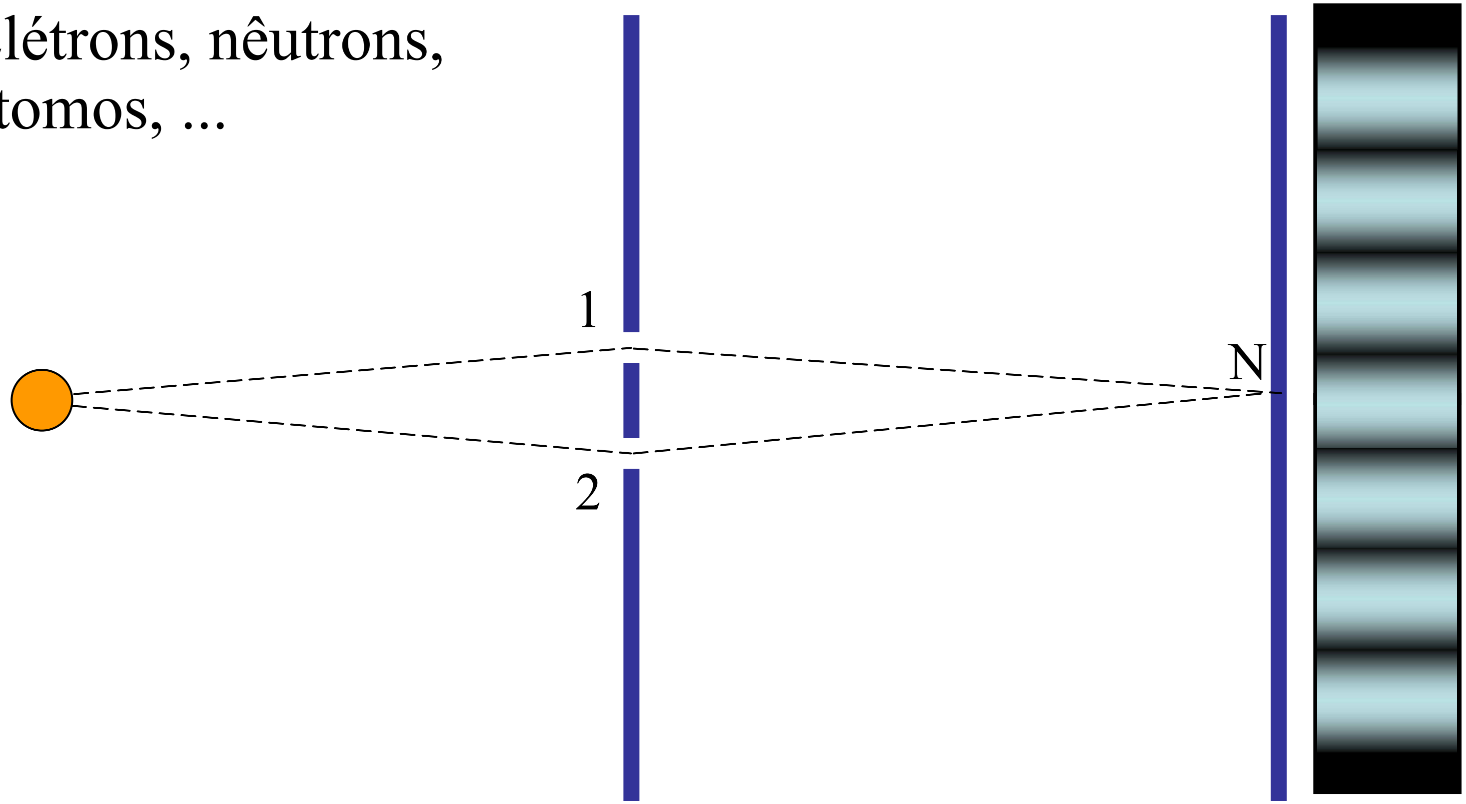


$$N(x) = N_1(x) + N_2(x)$$

fendas 1 e 2 abertas

Experimento de dupla fenda com partículas

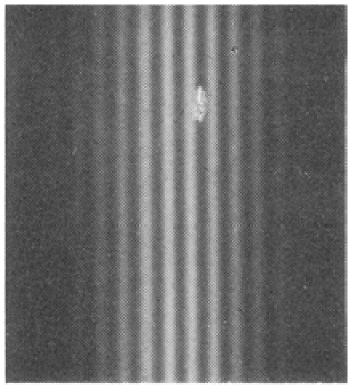
Elétrons, nêutrons, átomos, ...

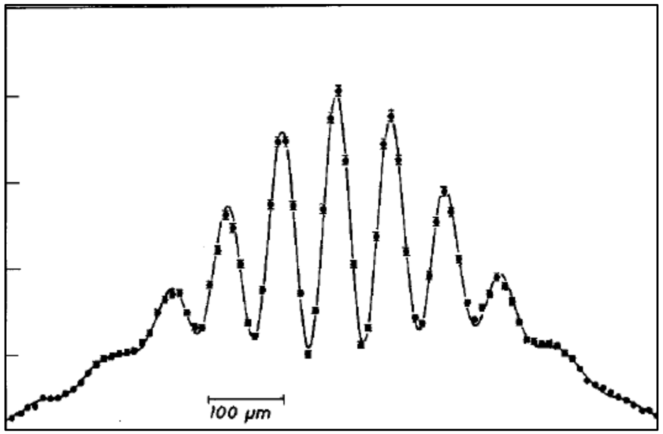


$$N \neq N_1 + N_2$$

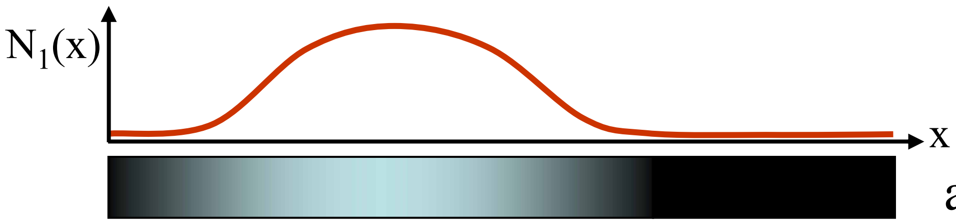
Experimento de dupla fenda com partículas

Elétrons, nêutrons, átomos, ...

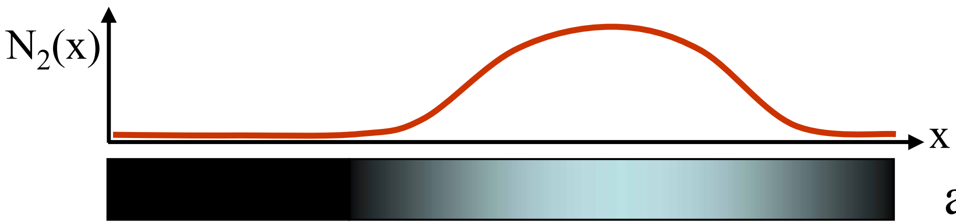




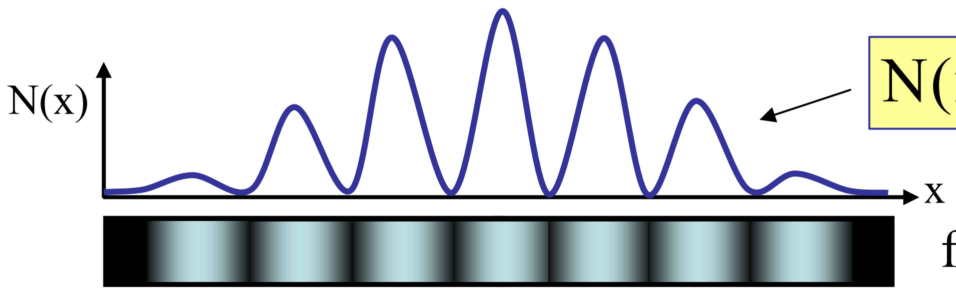
Elétrons, nêutrons, átomos, ...



apenas a fenda 1 aberta



apenas a fenda 2 aberta



$$N(x) \neq N_1(x) + N_2(x)$$

fendas 1 e 2 abertas

Elétrons, nêutrons, átomos, ...

$$N(x) \neq N_1(x) + N_2(x)$$

A afirmativa

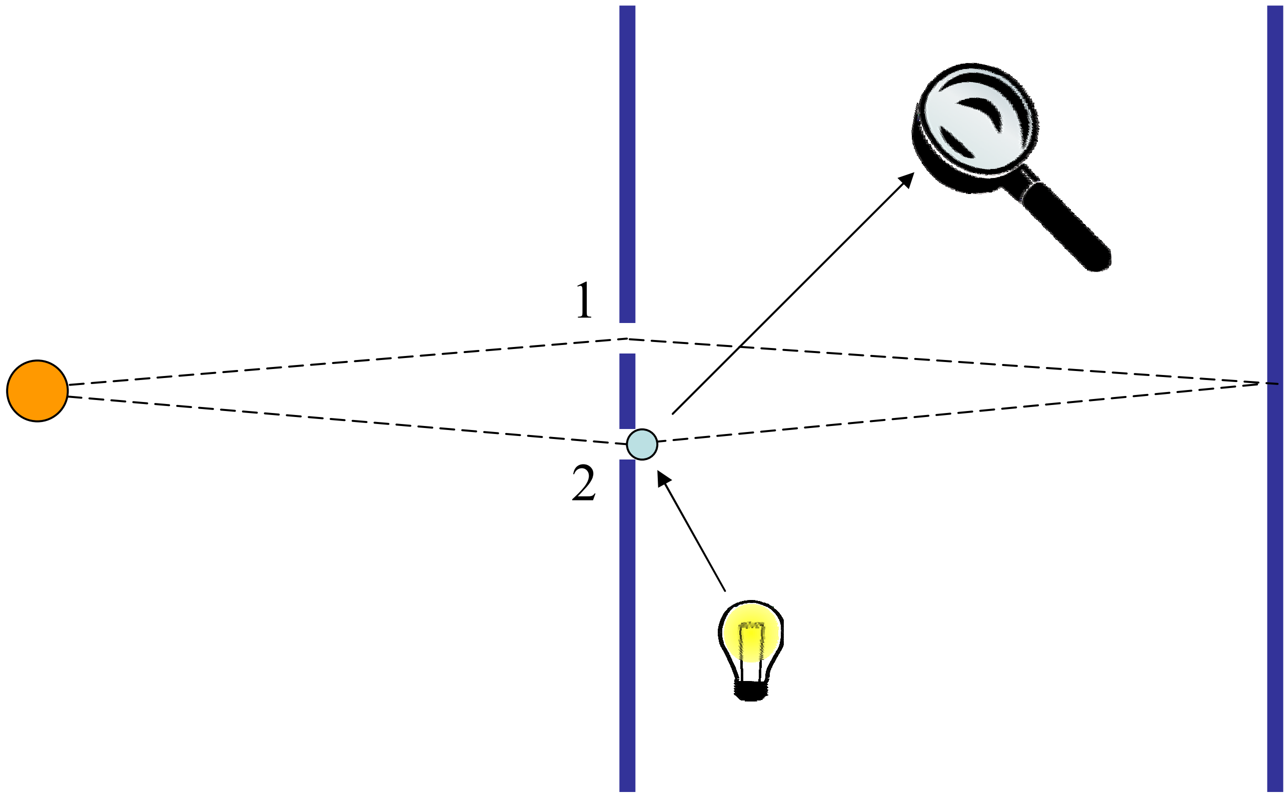
"cada partícula passa ou pela fenda 1 ou pela fenda 2"

é falsa.

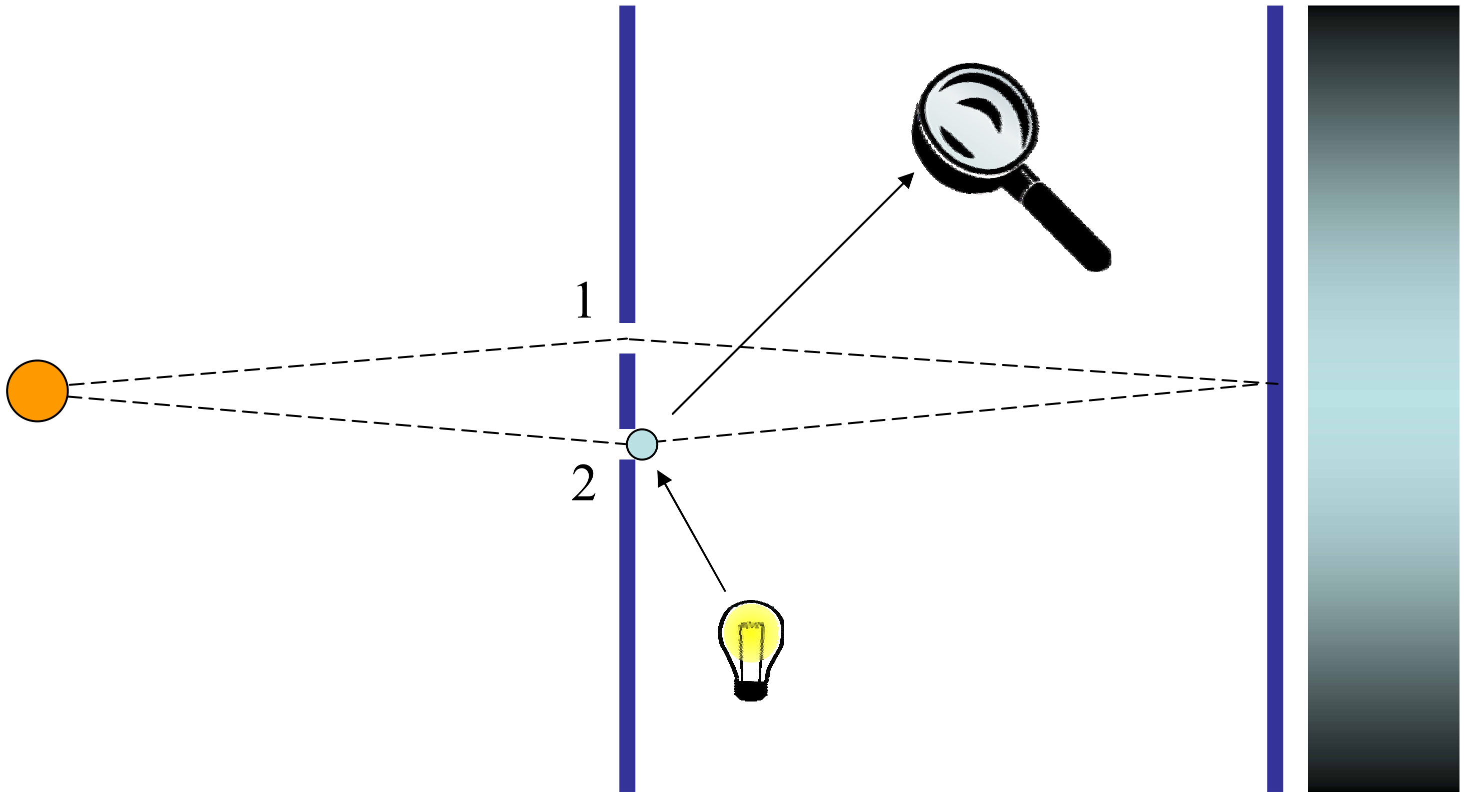
… a phenomenon which is impossible, *absolutely* impossible, to explain in any classical way, and which has in it the heart of quantum mechanics. In reality, it contains the *only* mystery.

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

E se *observarmos* por onde passa a partícula?



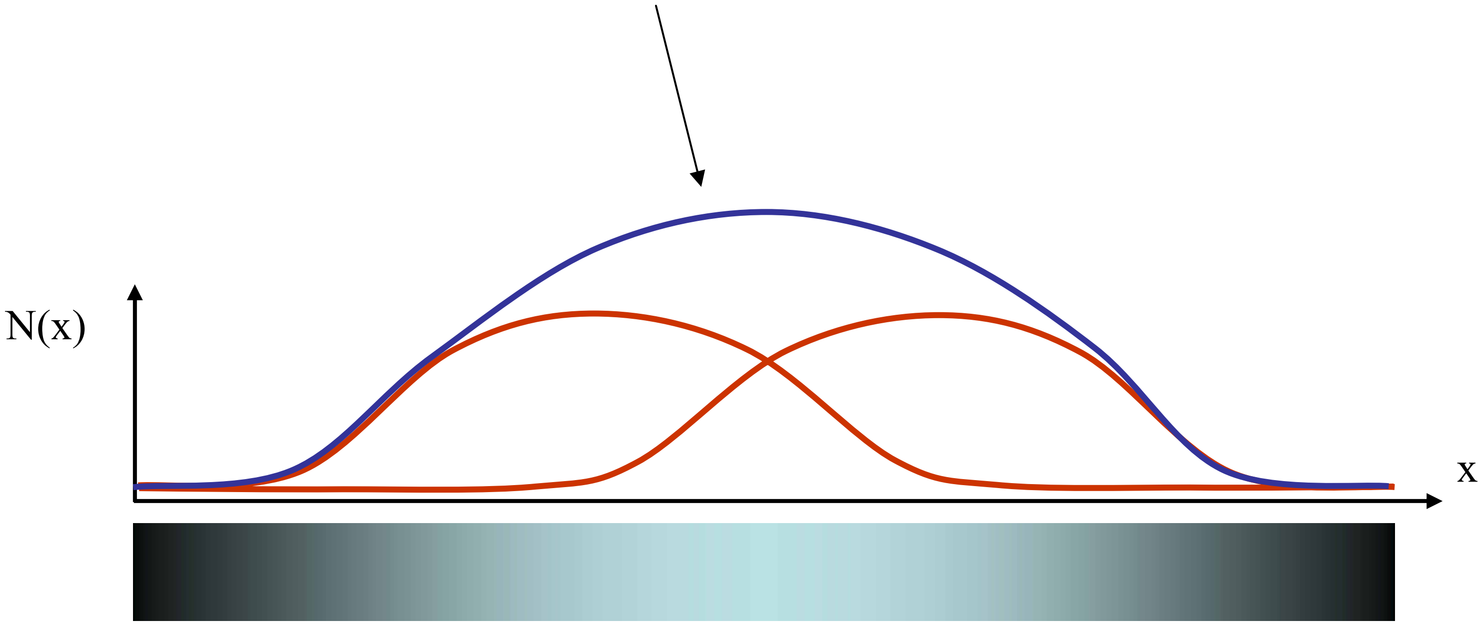
E se *observarmos* por onde passa a partícula?



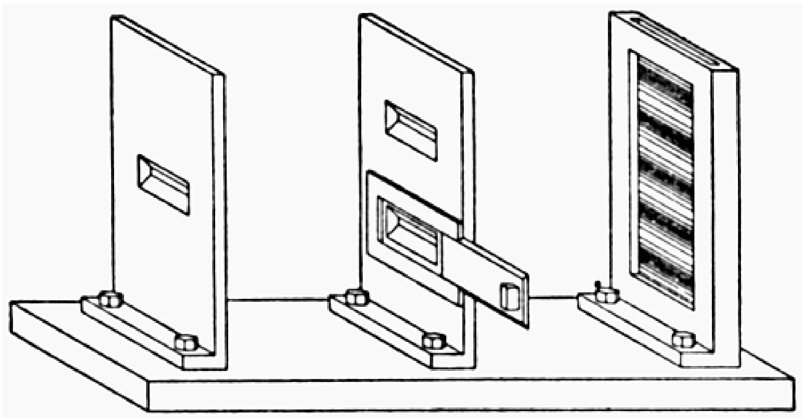
A interferência desaparece!
-- complementaridade --

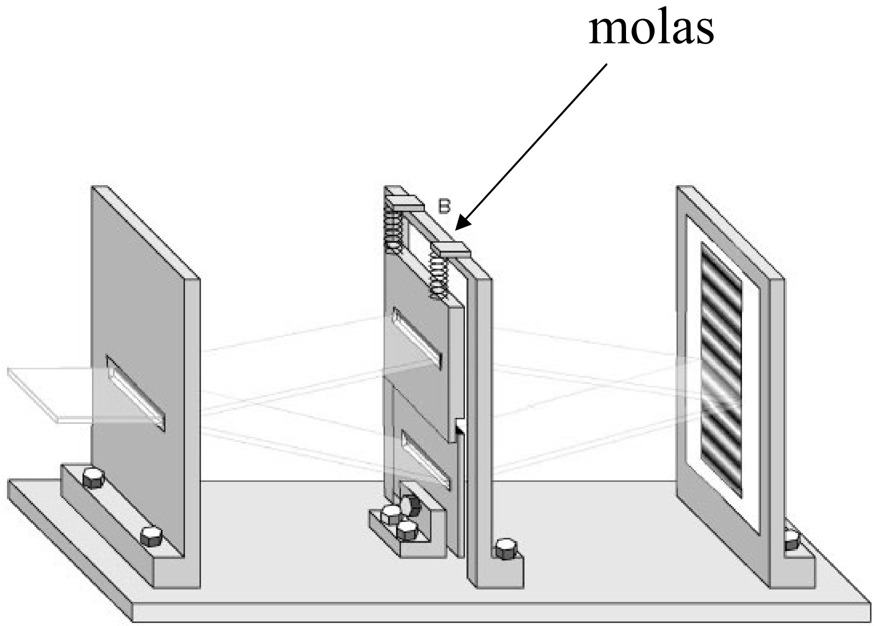
E se *observarmos* por onde passa a partícula?

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



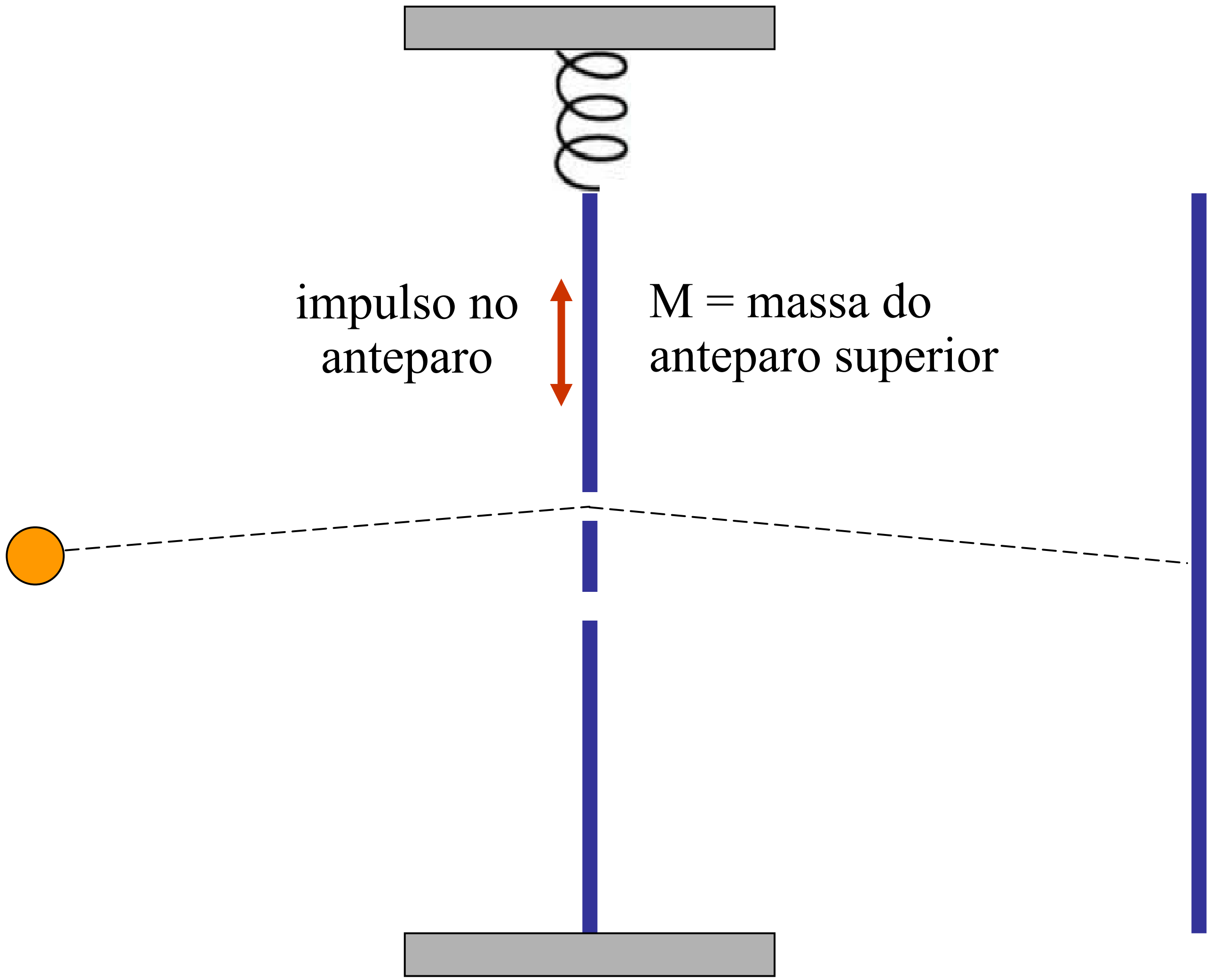
Experimento sobre a complementaridade



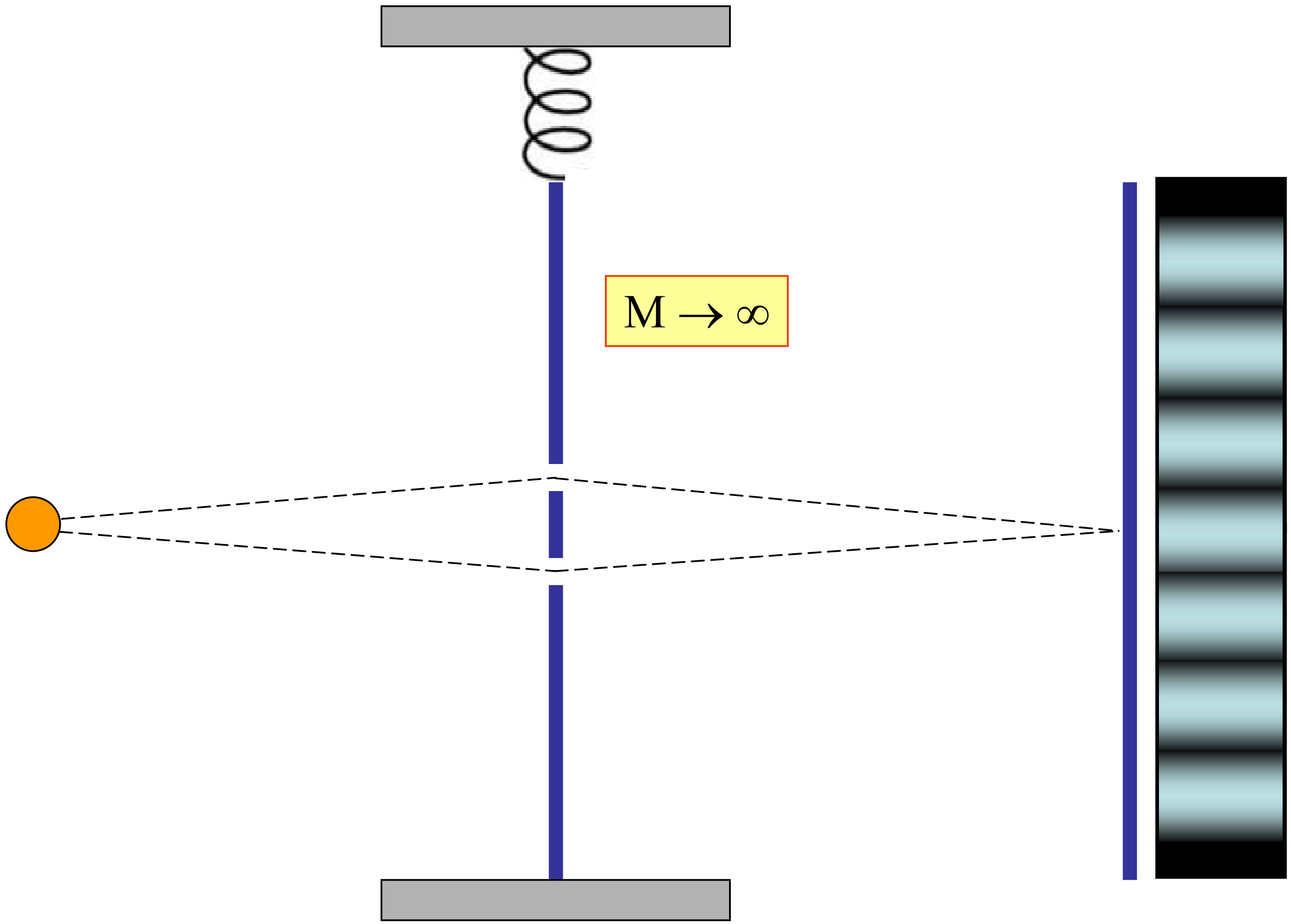


Desenhos: Niels Bohr

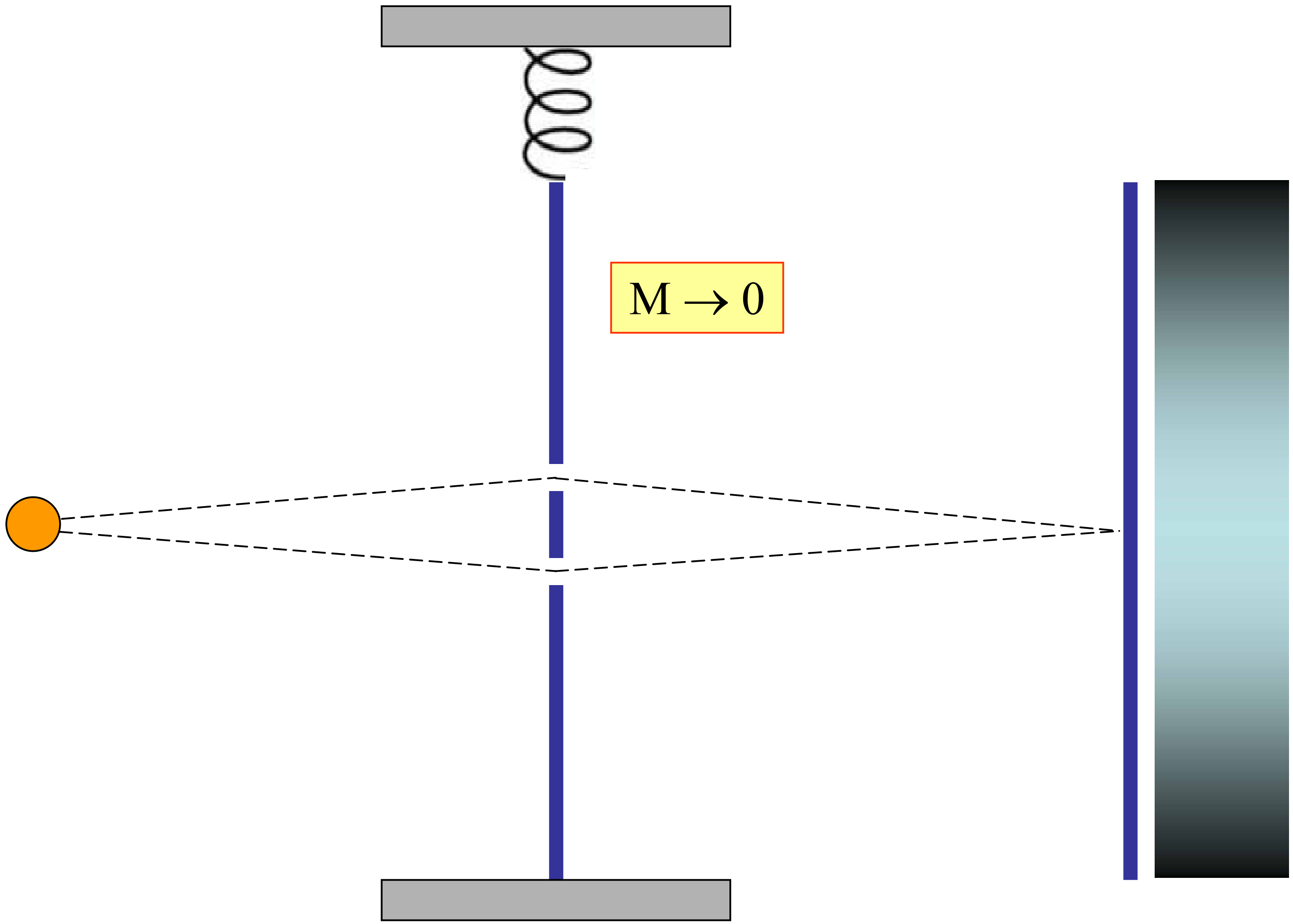
Experimento sobre a complementaridade



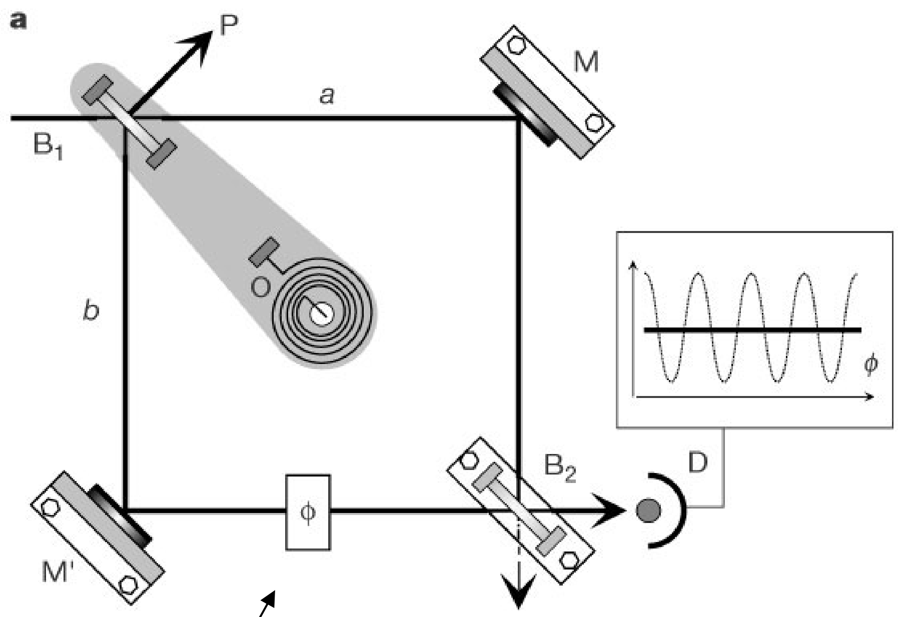
Experimento sobre a complementaridade



Experimento sobre a complementaridade



Experimento sobre a complementaridade

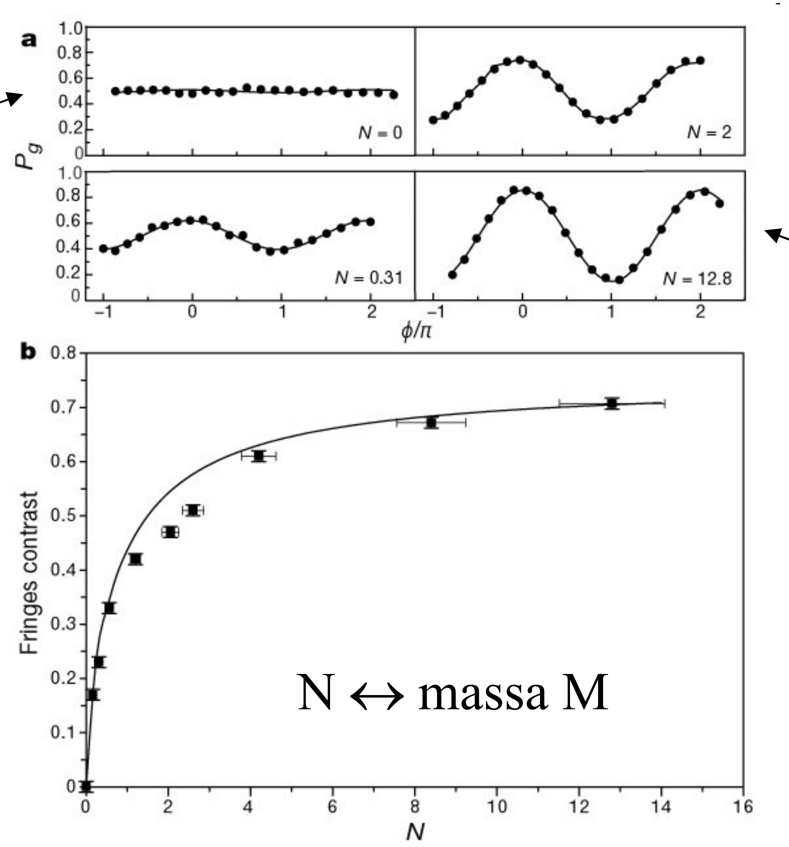


diferença de caminhos (ajustável)

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

Experimento sobre a complementaridade

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

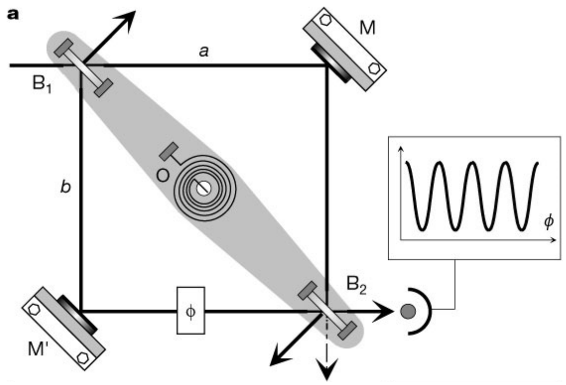


- M → ∞
- caminho não identificado
- padrão de interferência

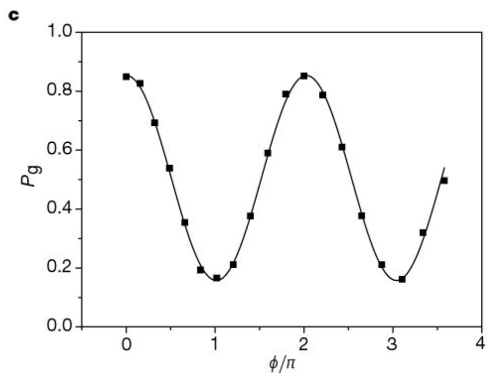
P. Bertet et al., *A complementarity experiment with an interferometer at the quantum-classical boundary*, Nature 411, 166 (2001)

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)

<u>Próximos passos</u> (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.