

# 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.

C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

2

## Leituras recomendadas

- M. Le Bellac, *Quantum Physics*, Cambridge, 2006.
- H.M. Nussenzweig, *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*, Graivá, 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.

C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

3

## 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

C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

5

## A física clássica em dificuldades



Charles Addams, New Yorker, 1940

C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

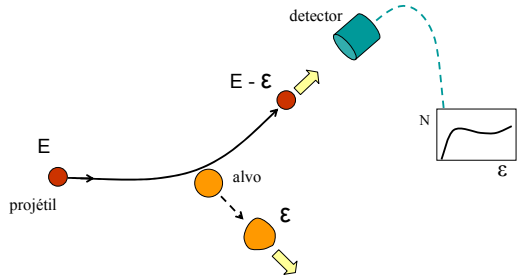
12

## A Quantização da Energia

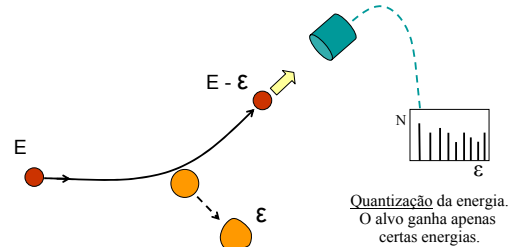
C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

13

### Espalhamento inelástico

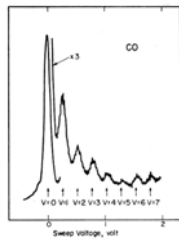
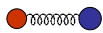


### Espalhamento por moléculas, átomos, ...



### Espalhamento inelástico pela molécula de CO

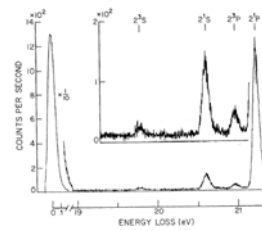
$e + \text{CO}$



G. J. Schulz, *Vibrational Excitation of N<sub>2</sub>, CO, and H<sub>2</sub> by Electron Impact*, Phys. Rev. **135**, A988 (1964)

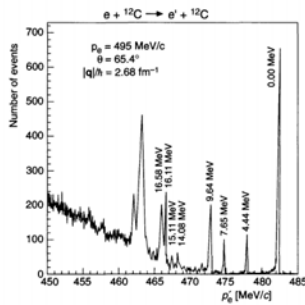
### Espalhamento inelástico pelo átomo de He

$e + \text{He}$



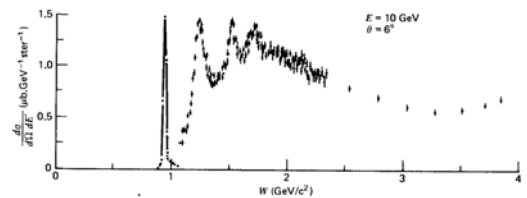
D.G. Truhlar, *Differential and Integral Cross Sections for Excitation of the 2<sup>1</sup>P State of Helium by Electron Impact*, Phys. Rev. A **1**, 778 (1970)

### Espalhamento inelástico pelo núcleo de <sup>12</sup>C



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

### Espalhamento inelástico pelo próton

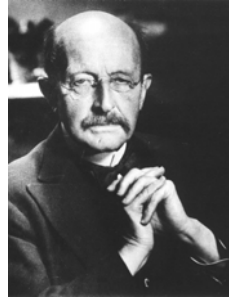


F. Halzen, A.D. Martin, *Quarks and Leptons* (Wiley, 1984) p.180

### 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>

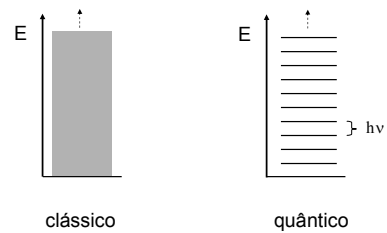
### O quantum de Planck

Um *oscilador harmônico* de frequência  $\nu$  pode ter apenas as energias

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

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

### O quantum de Planck



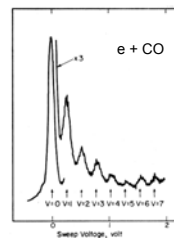
### h-cortado

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

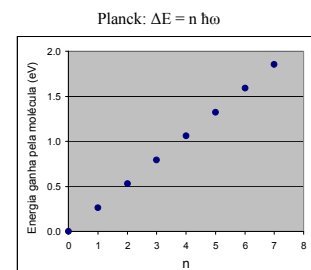
$$\omega = 2\pi \nu \quad \Rightarrow \quad \hbar\omega = h\nu$$

↑  
frequência angular do oscilador

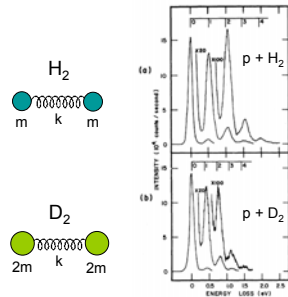
### Osciladores moleculares



G. J. Schulz, *Vibrational Excitation of N<sub>2</sub>, CO, and H<sub>2</sub> by Electron Impact*, Phys. Rev. **135**, A988 (1964)



## Osciladores moleculares



Planck:

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

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

Dados:

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

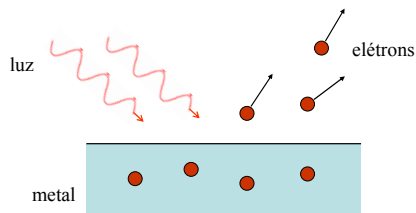
J.H. Moore and J.P. Doering, *Ion-Impact Excitation of Pure Vibrational Transitions in Diatomic Molecules*, Phys. Rev. Lett. **23**:554 (1969)

## Partículas de luz

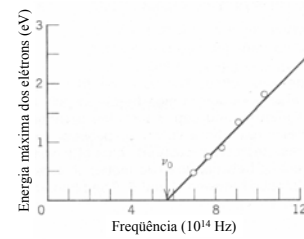


Albert Einstein

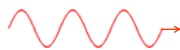
## O efeito fotoelétrico



## O efeito fotoelétrico

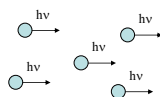


## Fótons



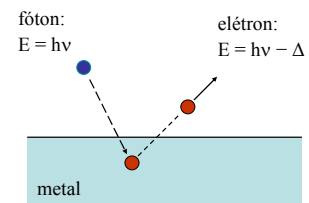
Planck:  
oscilador quantizado

$$E = nh\nu$$



Einstein:  
n = número de fótons  
hv = energia de um fóton

## O efeito fotoelétrico

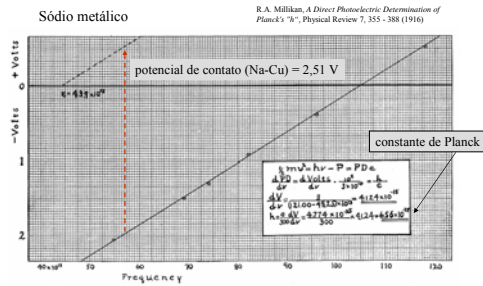


$\Delta_{\min} \equiv W \leftrightarrow$  função trabalho

$$E_{\max} = hv - W$$

$\nu_0 = W/h =$  frequência de corte

## O efeito fotoelétrico



C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

37

## Massa do fóton

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

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

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

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

C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

38

## Momentum do fóton

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

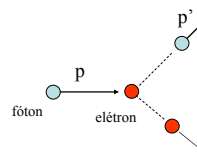
$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \Rightarrow p = \hbar k$$

número de onda

C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

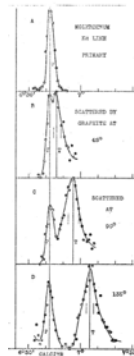
39

## O efeito Compton



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

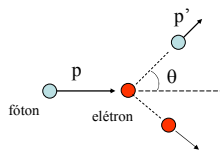
A. H. Compton, The Spectrum of Scattered X-Rays, Physical Review 22, 409 (1923)



C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

40

## O efeito Compton



conservação da energia e momentum

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

$$h/m_e c = \text{comprimento de onda Compton} = 0,024 \text{ \AA}$$

C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

41

## Ondas de matéria

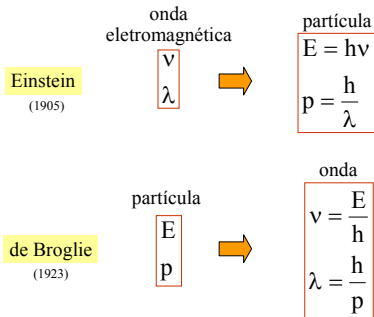


Louis de Broglie  
(Louis-Victor-Pierre-Raymond,  
7º duque de Broglie)

C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

42

## Relações de de Broglie

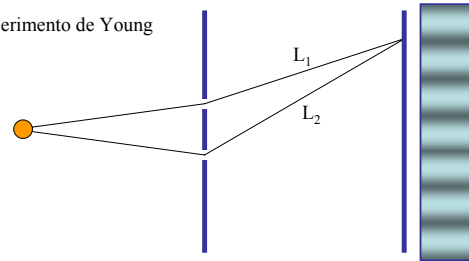


C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

44

## Interferência de partículas

Experimento de Young

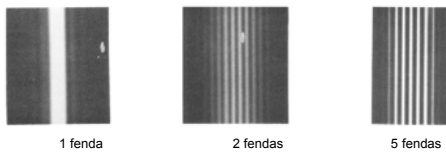


interferência construtiva:  $L_1 - L_2 = n\lambda$

C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

45

## Experimento de Young: elétrons

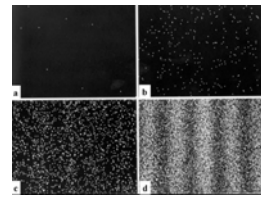


C. Jönsson, *Electron diffraction at multiple slits*, Am. J. Phys. **42**, 4 (1974)

C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

46

## Elétrons (um a um)

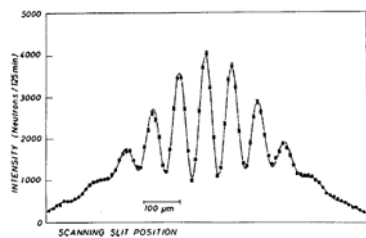


A. Tonomura et al., *Demonstration of single-electron build-up of an interference pattern*, Am. J. Phys. **57**, 117 (1989)

C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

47

## Experimento de Young: nêutrons

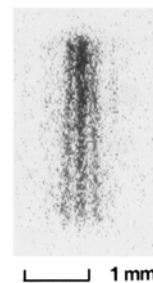


R. Gähler, A. Zeilinger, *Wave-optical experiments with very cold neutrons*, Am. J. Phys. **59**, 316 (1991).

C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

48

## Experimento de Young : átomos de neônio

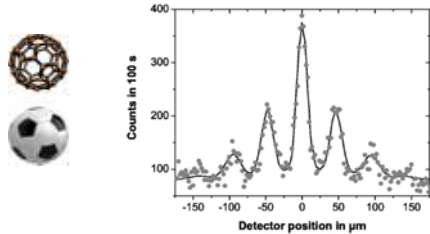


F. Shimizu et al., *Double-slit interference with ultracold metastable neon atoms*, Phys. Rev. A **46**, R17 (1992)

C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

49

## 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

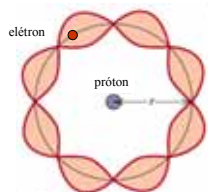
## Dois “mistérios”

- 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)

$$\Leftrightarrow L = n\hbar$$

## A energia do átomo de hidrogênio

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

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

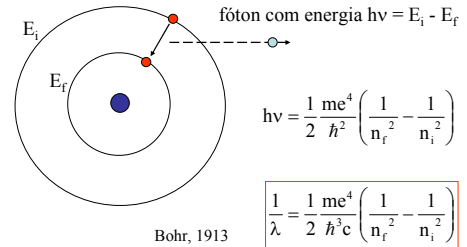
$$E = \frac{1}{2} mv^2 - \frac{e^2}{r} \Rightarrow E = -\frac{1}{2} \frac{me^4}{\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

### A energia do átomo de hidrogênio

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

$n = \infty$	-----	$E = 0$
$n = 4$	=====	$E = -0,85 \text{ eV}$
$n = 3$	=====	$E = -1,51 \text{ eV}$
$n = 2$	=====	$E = -3,40 \text{ eV}$
$n = 1$	-----	$E = -13,6 \text{ eV}$

### O espectro do hidrogênio



### O espectro do hidrogênio

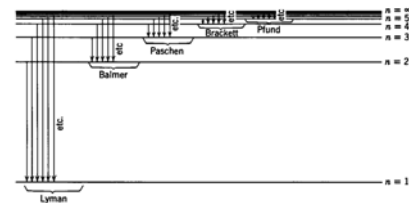
espectro visível



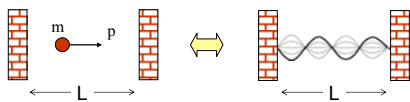
Balmer:  $\frac{1}{\lambda} = R_H \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$   $R_H = 109,677 \text{ cm}^{-1}$   
constante de Rydberg

Bohr:  $R_H = \frac{1}{2} \frac{me^4}{\hbar^3 c}$   $m = \text{massa reduzida e-p}$

### O espectro do hidrogênio



### Partícula em uma caixa



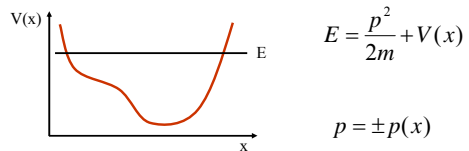
de Broglie:  $p = \frac{h}{\lambda}$

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

$$p_n = \frac{h}{2L} n$$

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

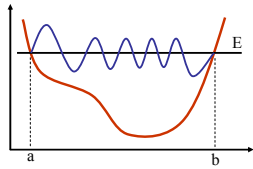
### Partícula em um potencial V(x)



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



### Partícula em um potencial V(x)



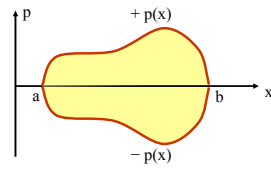
$$\lambda(x) = \frac{h}{p(x)} = \frac{h}{\sqrt{2m[E - V(x)]}}$$

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

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

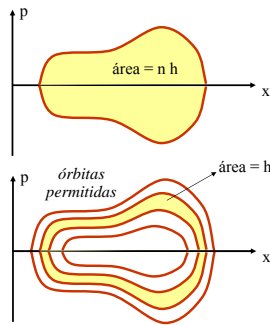


$$\int_a^b k(x) dx = n\pi$$

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

$$\oint p dx = nh$$

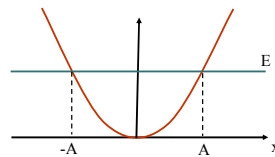
### Regra de quantização de Bohr-Sommerfeld



$$\oint p dx = nh$$

área no espaço de fase = "ação"  
 a ação é quantizada  
 h é o quantum de ação

### Oscilador harmônico via Bohr-Sommerfeld



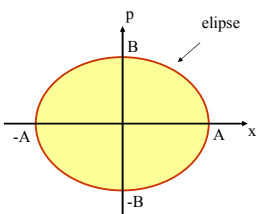
$$V(x) = \frac{1}{2} Kx^2$$

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

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

elipse no espaço de fase

### Oscilador harmônico via Bohr-Sommerfeld



$$\oint p dx = nh$$

área da elipse =  $\pi A B = nh$

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

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

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

### Momento angular via Bohr-Sommerfeld

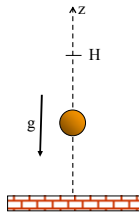
$$\oint p dq = nh \quad p \text{ e } q: \text{ variáveis "conjugadas"}$$

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

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

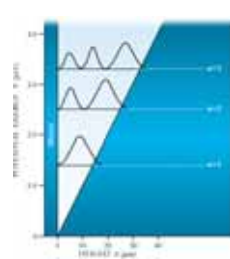
$$L = n\hbar \iff \text{postulado de Bohr}$$

### Partícula quicando via Bohr-Sommerfeld



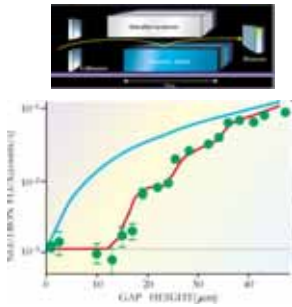
$E = mgH = \frac{p^2}{2m} + mgz$   
 $\oint pdz = nh$   
 $\frac{4}{3}\sqrt{2m^2 g} H^{3/2} = nh$   
 $H = \left(\frac{9h^2}{32m^2 g}\right)^{1/3} n^{1/3}$

### Nêutrons no campo gravitacional da Terra



$H = a n^{2/3}$   
 $a = \left(\frac{9h^2}{32m^2 g}\right)^{1/3}$   
 $a = 16,5 \mu\text{m}$   
 $H_1 = 16,5 \mu\text{m}$   
 $H_2 = 26,2 \mu\text{m}$   
 $H_3 = 34,3 \mu\text{m}$

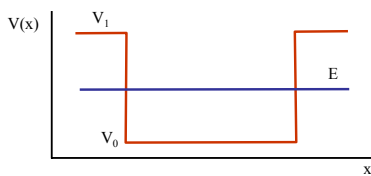
### Nêutrons no campo gravitacional da Terra



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



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

$p_1 = \sqrt{2m(E - V_1)} = i\sqrt{2m(V_1 - E)}$   $\Rightarrow$  momentum imaginário, energia cinética negativa: proibido "classicamente"

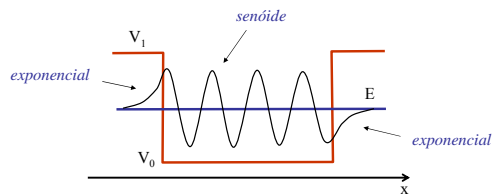
### Tunelamento

$p_0 = \sqrt{2m(E - V_0)}$   
 $\Rightarrow k_0 = \sqrt{2m(E - V_0)} / \hbar$   
 $\Rightarrow$  onda de de Broglie =  $A \sin(k_0 x) + B \cos(k_0 x)$

$p_1 = \sqrt{2m(E - V_1)}$   
 $\Rightarrow k_1 = \sqrt{2m(E - V_1)} / \hbar = i\kappa_1, \quad \kappa_1 = \sqrt{2m(V_1 - E)} / \hbar$   
 $\Rightarrow$  onda de de Broglie =  $A \sin(k_1 x) + B \cos(k_1 x)$   
 $= A' \exp(ik_1 x) + B' \exp(-ik_1 x)$   
 $= A' \exp(-\kappa_1 x) + B' \exp(\kappa_1 x)$

## Tunelamento

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

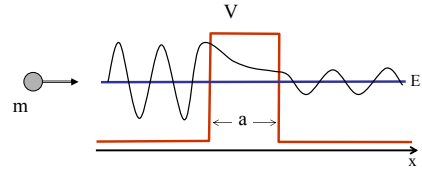


penetração na região classicamente proibida  $\Rightarrow \Delta x = 1/\kappa_1 = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_1 - E)}}$

C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

76

## Tunelamento

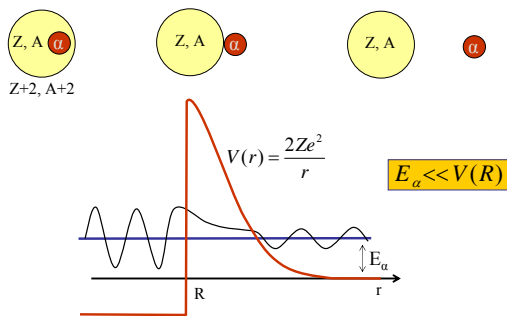


atenuação da onda de de Broglie:  $\sim \exp(-\kappa a) = \exp\left(-\frac{a\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}\right)$

C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

77

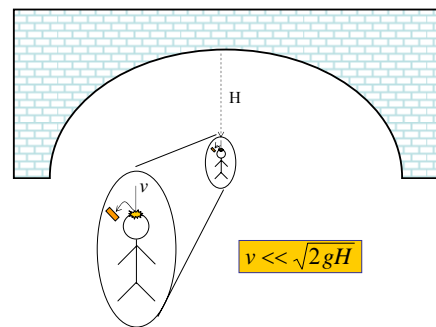
## Decaimento alfa



C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

78

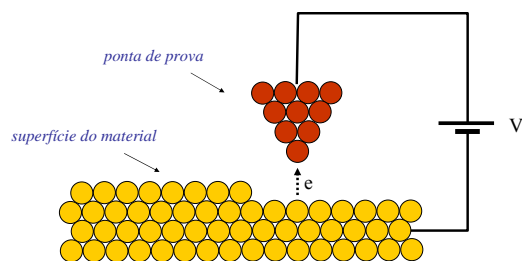
## Decaimento alfa



C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

79

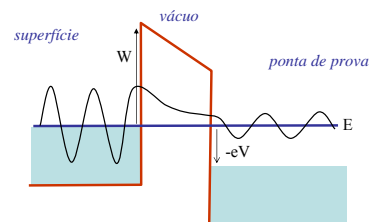
## Microscopia de tunelamento



C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

80

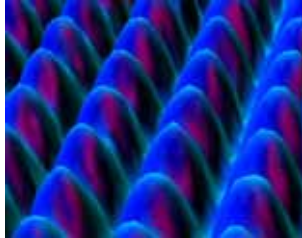
## Microscopia de tunelamento



C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

81

### Microscopia de tunelamento



superfície de níquel

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

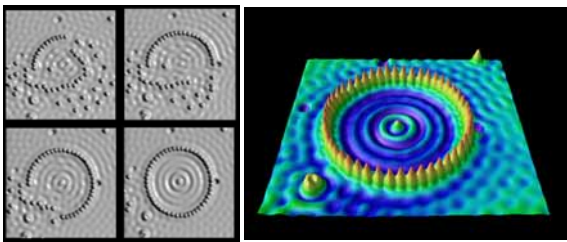
### Microscopia de tunelamento



ondas de elétrons em superfície de cobre

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

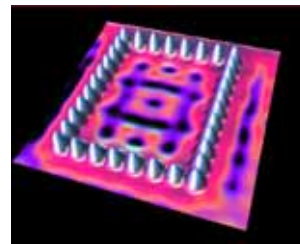
### Elétrons numa caixa circular



"curral" feito com 48 átomos de ferro sobre uma superfície de cobre

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

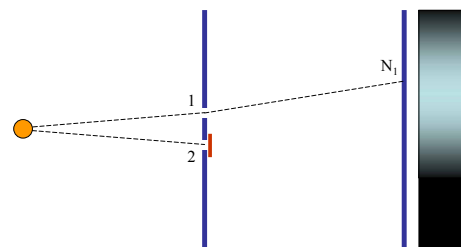
### Elétrons numa caixa retangular



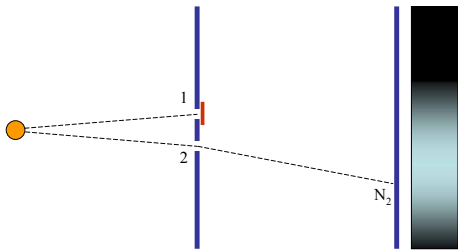
<http://www.almaden.ibm.com/vis/stm/gallery.html>

### O único mistério

### Experimento de dupla fenda com partículas



### Experimento de dupla fenda com partículas

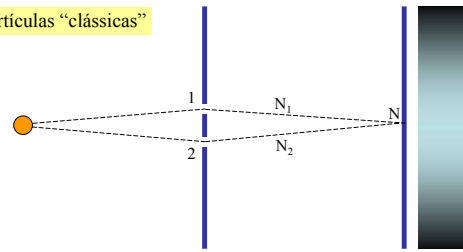


C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

90

### Experimento de dupla fenda com partículas

Partículas "clássicas"



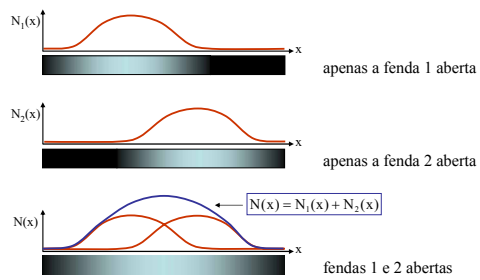
Cada partícula passa *ou* pela fenda 1 *ou* pela fenda 2  $\Rightarrow N = N_1 + N_2$

C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

91

### Partículas clássicas

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

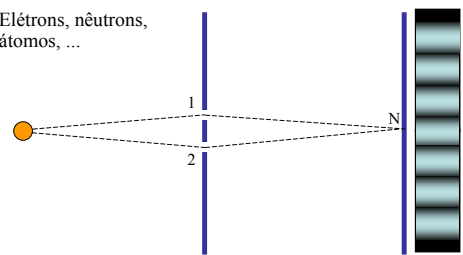


C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

92

### Experimento de dupla fenda com partículas

Elétrons, nêutrons, átomos, ...



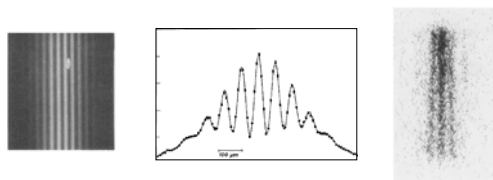
$N \neq N_1 + N_2$

C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

93

### Experimento de dupla fenda com partículas

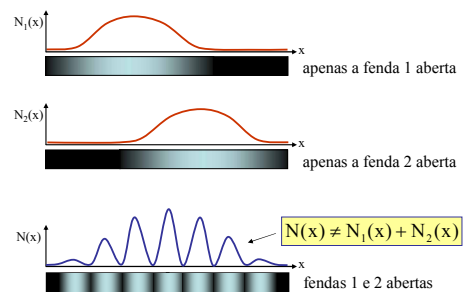
Elétrons, nêutrons, átomos, ...



C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

94

### Elétrons, nêutrons, átomos, ...



C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

95

### Elétrons, nêutrons, átomos, ...

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



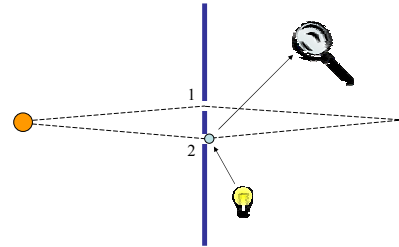
A afirmativa

“cada partícula passa ou pela fenda 1 ou pela fenda 2”  
é falsa.

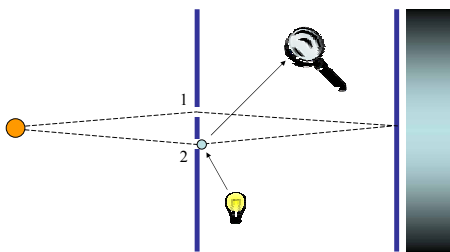
... a phenomenon which is impossible, *absolutely* impossible, to explain in any classical way, and which has in it the heart of quantum mechanics. In reality, it contains the *only* mystery.

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

### E se observarmos por onde passa a partícula?



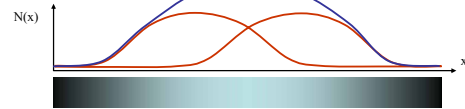
### E se observarmos por onde passa a partícula?



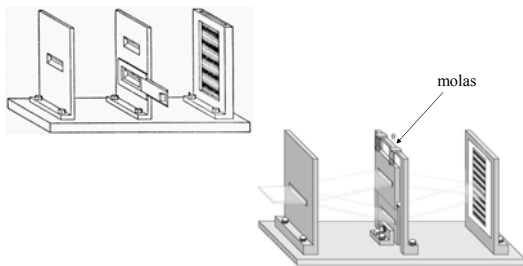
A interferência desaparece!  
-- complementaridade --

### E se observarmos por onde passa a partícula?

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

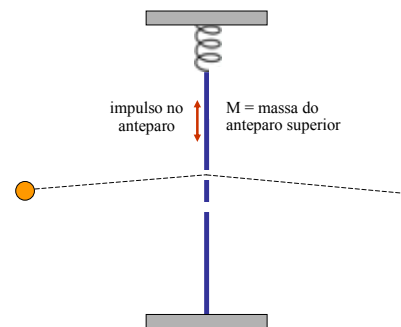


### Experimento sobre a complementaridade

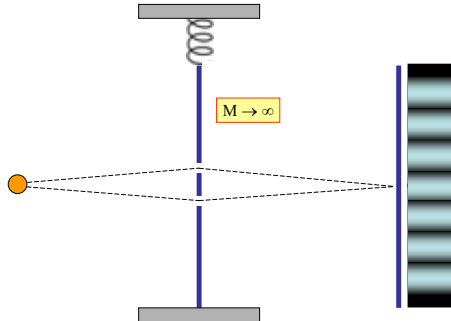


Desenhos: Niels Bohr

### Experimento sobre a complementaridade



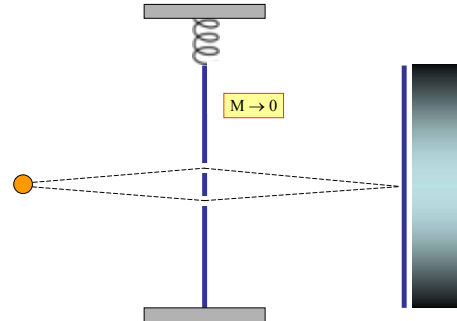
### Experimento sobre a complementaridade



C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

102

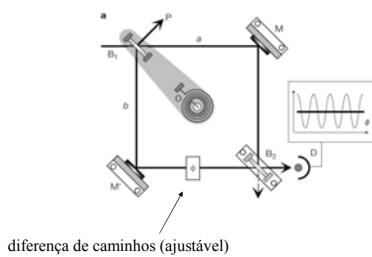
### Experimento sobre a complementaridade



C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

103

### Experimento sobre a complementaridade

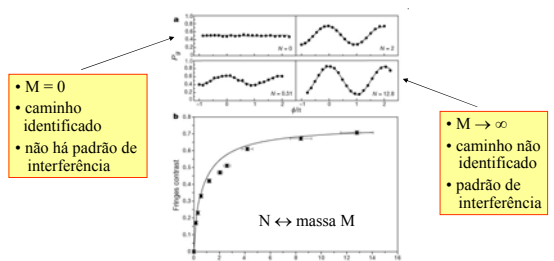


P. Bertet et al., A complementarity experiment with an interferometer at the quantum-classical boundary, Nature **411**, 166 (2001)

C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

104

### Experimento sobre a complementaridade



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

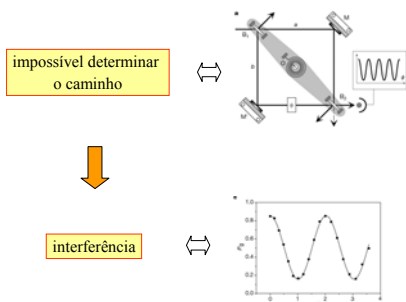
•  $M \rightarrow \infty$   
• caminho não identificado  
• padrão de interferência

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

C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

106

### Experimento sobre a complementaridade



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

C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

107

### 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.

C.E. Aguiar / Mecânica Quântica / 2010

108