

A Mecânica Quântica

A Mecânica Quântica tem um papel fundamental no entendimento e descrição de fenômenos naturais. Porque?

- Fenômenos quânticos existem! E a Mecânica Quântica os explica!
- Muitos deles manifestam-se macroscopicamente. O mundo microscópico precisa ser estudado para melhor compreendê-los.
- Onde? Física – Química – Biologia – Engenharia de Materiais, etc.



- Descrição de átomos, moléculas, sólidos, líquidos, plasmas, etc. (estruturas eletrônicas e consequente entendimento de suas propriedades microscópicas e macroscópicas em baixas e altas temperaturas).
- Interações matéria/matéria (reações químicas em geral).
- Interações matéria/onda eletromagnética (espectroscopia, lasers, etc.)
- Química da vida (DNA, proteínas, etc)!
- Fabricação (e nano fabricação) de (novos) materiais com propriedades macroscópicas (mecânicas, elétricas e magnéticas) específicas (desenhadas!).

Um pouco de história

A Mecânica Quântica contribui para unificação de teorias. No caso, tratando partículas materiais e radiação da mesma forma (eletrodinâmica quântica):

No final do século 19: {

- movimento das partículas: Leis de Newton.
- radiação: Equações de Maxwell.
- interação entre radiação e matéria: força de Lorentz.

Tudo parecia ir bem até se mostrar que: {

- Leis clássicas não funcionam para corpos que viajam em altas velocidades (comparadas com a velocidade da luz, c).
- Leis clássicas não funcionam na escala atômica e subatômica.

Não abandonem a Mecânica Clássica. Ela será útil em várias aproximações e funciona para baixas velocidades ($v \ll c$) e para grandes objetos ($\hbar/m \approx 0$).

No momento, não existe uma teoria satisfatória unificando Mecânica Quântica e Relatividade. Entretanto, a maioria dos fenômenos listados na caixa verde do slide 1 são bem explicados pela Mecânica Quântica não-Relativística (com auxílio de teoria de perturbação).

Isso será objeto de nosso curso de 1 ano (F689 e F789)!

Estratégia Inicial

O que vai acontecer nesse capítulo?

Estudaremos: $\left\{ \begin{array}{l} \text{A) idéias quânticas básicas} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \bullet \text{ dualidade partícula/onda.} \\ \bullet \text{ processos de medidas.} \end{array} \right. \\ \text{(com auxílio de experimentos de ótica)} \\ \text{B) partículas} \rightarrow \text{Equação de Schrödinger, relação de incerteza} \\ \text{de Heisenberg, pacotes de ondas e sua evolução temporal.} \\ \text{C) alguns casos simples de efeitos quânticos típicos.} \end{array} \right.$

Um pouco de história da luz:

- Newton \rightarrow Luz \equiv feixe de partículas que se chocavam contra espelhos.
- 1^a metade do século 19 \rightarrow Luz \equiv onda eletromagnética (explica difração e interferência), onde o caráter vetorial do campo elétrico da luz ganha papel importante.

Experimentos não explicados

A. Ondas Eletromagnéticas e Fótons

1. Quantum de luz e as relações de Planck-Einstein (motivadas por problemas!)

Os Problemas:

- *Radiação de corpo negro* (lembrem do que se trata?)

$f(\lambda, T)d\lambda \equiv \left\{ \begin{array}{l} \text{fração da densidade de energia radiante de comprimento } \lambda \\ \text{no intervalo } d\lambda \text{ de um corpo negro à temperatura } T. \end{array} \right.$

Os problemas (radiação de corpo negro – continuação)

Previsão Clássica

$$f(\lambda, T) = 8\pi \frac{kT}{\lambda^4} \Rightarrow \begin{cases} \text{Lei de Rayleigh-Jeans que deu origem à chamada} \\ \text{catástrofe ultravioleta } \lambda \ll 1 \text{ (para } \lambda \gg 1 \text{ funciona).} \end{cases}$$

Previsão Quântica

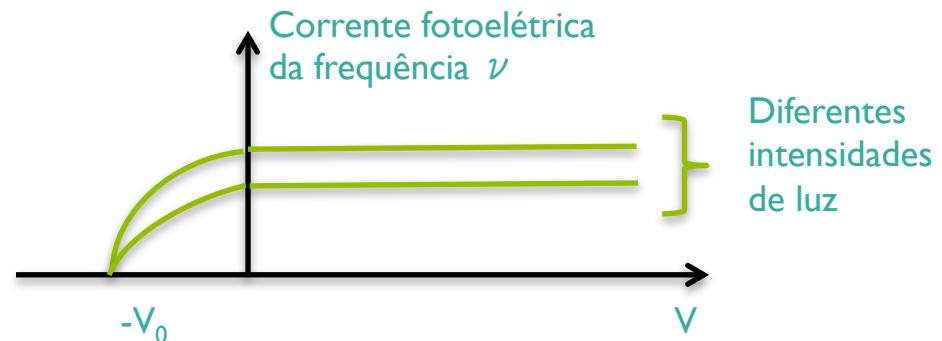
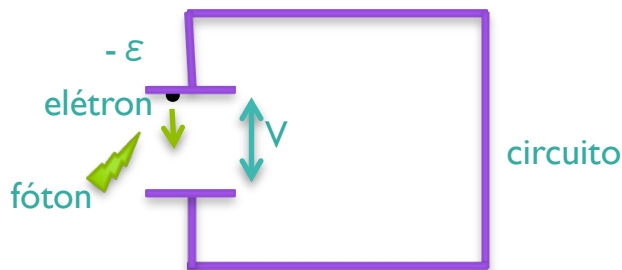
A explicação de Planck envolve energias quantizadas $E = nh\nu$, com $h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ J.s}$ ajustado experimentalmente, para obter:

$$f(\lambda, T) = \frac{8\pi hc\lambda^{-5}}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1}$$

Confirma experimentos!

- *Efeito fotoelétrico.*

Em 1905, Einstein propõe a volta da luz como partícula (fóton) e explica o fenômeno fotoelétrico.



Einstein: diferentes intensidades da luz significa diferentes quantidades de fótons, mas todos com a mesma energia $h\nu$

Inesperado: o fato de V_0 independe da intensidade da luz

Os problemas (espalhamento luz/elétrons)

- *Efeito Compton* – 1924 (Espalhamento de raio X por elétrons livres.)

Previsão Clássica (onda eletromagnética).

Quando a onda incide em um material contendo carga, as cargas oscilam com essa frequência e re-irradiam ondas eletromagnéticas com a mesma frequência

Previsão Quântica (fótons).

Compton propôs para colisão entre um fóton e um elétron:

- (1) Usar conservação de energia e momento.
- (2) O elétron absorve energia devido ao recuo e a luz emitida tem frequência menor que a incidente.

E conclui:

A interação entre onda eletromagnética e matéria ocorre por meio de processos elementares onde a radiação parece ser composta por fótons

Onde ao fóton foi atribuído $\left\{ \begin{array}{l} \text{energia: } E = h\nu = \hbar\omega \rightarrow \omega = 2\pi\nu. \\ (h = 2\pi\hbar = 6,626 \times 10^{-34} \text{ J.s}) \\ \text{momento: } p = \hbar k. \end{array} \right.$

Durante cada processo elementar a energia e momento precisam conservar!

Dualidade partícula/onda da luz

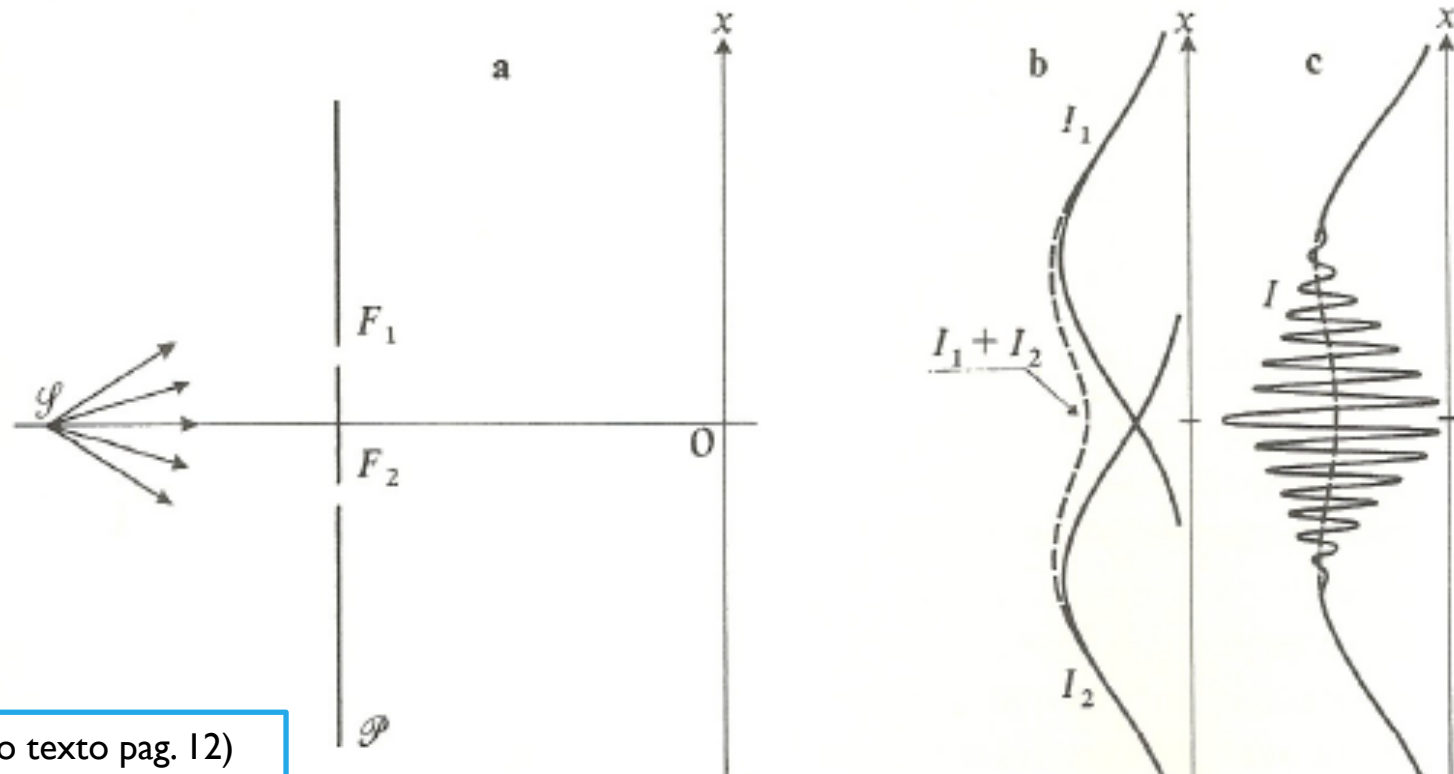


Figura 1 (livro texto pag. 12)

Diagrama do experimento de interferência de dupla fenda de Young (fig. a). Cada uma das fendas F_1 e F_2 produz um padrão de difração na tela ϵ . As intensidades correspondentes são $I_1(x)$ e $I_2(x)$ (linhas sólidas da figura b). Quando as duas fendas são abertas simultaneamente, a intensidade $I(x)$ observada na tela não é a soma $I_1(x) + I_2(x)$ (linha tracejada nas figuras b e c), mas mostram oscilações devido à interferência entre os campos elétricos por F_1 e F_2 (curva figura c).

O que esperar, se: (1) bloquear F_2 ; (2) bloquear F_1 ; (3) ambas abertas (partículas); (4) ambas abertas (partícula/onda - caso real)?

Descrição do experimento de dupla fenda de Young

Como explicar isso, considerando luz como feixe de partículas?

- A existência de difração da luz poderia ser explicada por um fenômeno de borda
- A curva de interferência, talvez pudesse ser explicada como sendo fruto da interação entre fótons

Ataquemos o problema da interferência. A hipótese de interação entre fótons leva-nos a acreditar que se diminuíssemos a intensidade da fonte, a curva de interferência diminuiria até desaparecer. Antes de discutir o que ocorre, lembremos que:

A teoria ondulatória explica muito bem o fenômeno de interferência.

Como: $I \propto E^2 \Rightarrow$ e como no anteparo $E(x) = E_1(x) + E_2(x)$, temos:

$$I(x) = |E(x)|^2 = |E_1(x) + E_2(x)|^2 \neq |E_1(x)|^2 + |E_2(x)|^2$$

↳ Origem da interferência

Note que a teoria ondulatória prediz que se I diminui, a interferência continua (embora, diminua de intensidade).

De volta ao experimento: O que acontece quando a fonte emite fótons um por um? Nenhuma das duas teorias explica tudo por si só.

Descrição do experimento de dupla fenda de Young

- Coloque um filme fotográfico no anteparo, aguarde tempo suficiente e as franjas de interferência aparecerão. Como foi um fóton por vez, temos que descartar a hipótese de que elas são devido à interferência entre fótons.
- Diminua a intensidade e revele o filme em intervalos curtos de tempo. Cada fóton produz uma marca localizada no anteparo e não uma franja de interferência. Descarte a hipótese pura ondulatória.

Quando muitos fótons acertam o anteparo, o seguinte acontece:

- Cada um faz uma marca localizada.
- O grande número de marcas mostra a figura de interferência (regiões escuras e claras).

Cabe aqui uma pergunta: Dentro do contexto corpuscular, porque o fenômeno muda drasticamente dependendo se só uma ou ambas as fendas estão abertas? Para melhor entender o problema, note que até agora não procuramos determinar por onde o fóton passou na experiência de interferência. Para tanto, podemos imaginar detectores em F_1 e F_2 .

Descrição do experimento de dupla fenda de Young

Nessas condições, se um fóton for lançado contra a fenda dupla, o sinal é recolhido por um dos detetores ou por nenhum deles e NUNCA por ambos. Em outras palavras, quando o fóton passa, ele, de fato, passa por uma delas.

Importante: *o fóton absorvido pelo detetor não chega no anteparo.*

Se mantivéssemos o detetor apenas em F_2 , a figura que formaria no anteparo não é de interferência (e sim a de difração proveniente de F_1). Isto permite concluir:

O fato de termos certeza por onde o fóton passou (no caso, pela F_1 , pois todos que passariam pela F_2 são detetados e não chegam ao anteparo) tem sérias consequências. Essa certeza destrói a figura de interferência!

Em seguida construímos a visão quântica do experimento de dupla fenda.

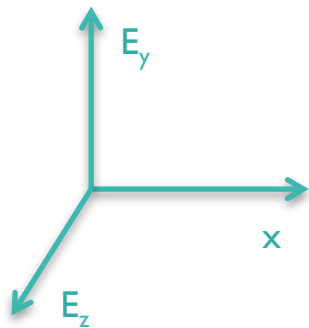
Unificação quântica destes dois aspectos (onda e partícula) da luz

- Os dois parecem incompatíveis.
- Um novo aspecto deve ser considerado: *Quando alguém faz uma medida em um sistema microscópico, ele perturba o sistema de forma fundamental.* No mundo macroscópico isso pode ser evitado.
- Reconsideremos o aparente paradoxo: *O fóton que passa por uma fenda se comporta diferentemente dependendo se a outra fenda está aberta ou fechada.*
- No experimento apresentado, se tentarmos medir se um fóton passou ou não pela fenda, impedimos que ele chegue no anteparo.
- É impossível obter a curva de interferência e ao mesmo tempo medir em qual fenda os fótons passaram. *Um conceito clássico se balança: o da trajetória.*
- Todos os fótons são emitidos dentro das mesmas condições. No entanto, não é possível dizer a priori onde na tela eles vão se chocar. *Outro conceito clássico é destruído: Condições iniciais definem completamente o movimento subsequente da partícula.*

Quando um fóton é emitido, a única coisa que podemos prever é a probabilidade dele atingir o anteparo em x . Ela é proporcional à $I(x) = |E(x)|^2$.

Dualidade partícula/onda - sumário

- Os aspectos de partícula e de onda da luz são inseparáveis. A parte ondulatória permite o cálculo probabilístico da manifestação do fóton como partícula.
- Previsões sobre o comportamento futuro do fóton: só probabilidades!
- Evolução temporal \rightarrow Equação de Maxwell para $\vec{E}(\vec{r}, t)$, e com isso obter probabilidades $\propto |\vec{E}(\vec{r}, t)|^2$.



- A amplitude respeita a equação:

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} = \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 E_y}{\partial t^2}$$

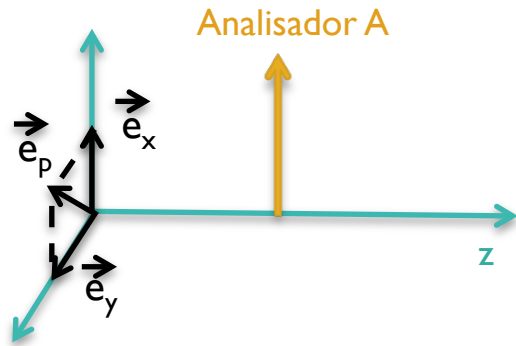
- Lembre que a equação de onda é dada por:

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 y}{\partial t^2}$$

- Note a linearidade: Se \vec{E}_1 e \vec{E}_2 são soluções $\Rightarrow \vec{E} = \lambda_1 \vec{E}_1 + \lambda_2 \vec{E}_2$ também é solução. A interferência fica caracterizada em $|\vec{E}|^2$.
- Existe uma analogia entre: $\vec{E}(\vec{r}, t) \leftrightarrow \psi(\vec{r}, t)$, com ψ podendo ser complexo.

Princípio da decomposição espectral

Um outro experimento: luz polarizada



O analisador $\left\{ \begin{array}{l} \text{Deixa passar na direção } x \\ \text{Absorve luz polarizada na direção } y \end{array} \right.$

- Descrição clássica

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = E_0 \vec{e}_p e^{i(kz - \omega t)} \quad \text{onde } I \propto |E_0|^2$$

$$\text{Depois de passar por } A \Rightarrow \vec{E}'(\vec{r}, t) = E'_0 \vec{e}_x e^{i(kz - \omega t)} \quad \text{onde } I' \propto |E'_0|^2$$

$$\text{Lei de Malus: } I' = I \cos^2 \theta$$

- Idéia quântica: Um fóton por vez e um detetor atrás do analisador. O que acontece?
 - (1) O detetor não registra frações de fótons (duas opções: ou o fóton passa pelo analisador ou é absorvido por ele).
 - (2) Em geral não podemos prever com exatidão se um certo fóton vai passar ou não. Sabemos apenas as probabilidades.
 - (3) Se mandarmos um grande número de fótons, $N \cos^2 \theta$ passarão.

Princípio da decomposição espectral

Observe os seguintes aspectos:

- (i) O analisador fornece apenas dois tipos de resultados: $\left\{ \begin{array}{l} \rightarrow \text{“passou”} \\ \text{ou} \\ \rightarrow \text{“não passou”} \end{array} \right.$

Estamos diante da “quantização” dos possíveis resultados da medida.

Os valores possíveis são conhecidos por auto-valores ou valores próprios.

Note que na descrição clássica a luz passava sempre com intensidade $I \cos^2 \theta$.

- (ii) Cada um destes auto-valores corresponde à um auto-estado, isto é:

$$\text{Se } \left\{ \begin{array}{l} \vec{e}_p = \vec{e}_x \rightarrow \text{“passa”} \\ \vec{e}_p = \vec{e}_y \rightarrow \text{“não passa”} \end{array} \right.$$

Se antes da medida (pelo analisador) o fóton se encontra em um auto-estado, o resultado da medida é certo: o auto-valor associado.

- (iii) Quando o estado anterior à medida é arbitrário, somente as probabilidades de se obter os auto-valores são conhecidas. Para achá-las, decomponha o estado das partículas em uma combinação linear dos auto-estados, isto é:

$$\vec{e}_p = \vec{e}_x \cos \theta + \vec{e}_y \sin \theta$$

Princípio da decomposição espectral

A probabilidade de se obter um dado auto-valor é proporcional ao quadrado do valor absoluto do coeficiente do auto-estado correspondente, isto é:

$$\text{Chance de } \begin{cases} \text{“passar”} \rightarrow \cos^2 \theta \\ \text{“não passar”} \rightarrow \sin^2 \theta \end{cases}$$

(iv) Todos os fótons que passaram estão em um auto-estado \vec{e}_x e todos passariam por um analisador paralelo ao primeiro.

$$\text{A medida perturba o sistema } \begin{cases} \text{Estado inicial: } \vec{e}_p(\vec{r}, t) \\ \text{Estado final: colinear com } \vec{e}_x. \end{cases}$$

(v) Quando um fóton passa pelo primeiro analisador, isto não é uma indicação que ele estava em um auto-estado \vec{e}_x , pois ele poderia estar em uma mistura $\vec{e}_p = \vec{e}_x \cos \theta + \vec{e}_y \sin \theta$.