

§ ORIGEM da TEORIA QUÂNTICA

A Mecânica Quântica é a teoria que descreve as propriedades da matéria ao nível de fenômenos microscópicos, e portanto formula as leis do movimento das chamadas "micropartículas" (partículas elementares, átomos, moléculas, ...). Qualitativamente, podemos dizer que o domínio da Mecânica Quântica cobre sistemas onde as variáveis de Ação são, em ordem de grandeza, comparáveis à constante universal do Quantum de Ação, chamada Constante de Planck.

$$h = 6,626196 (\pm 4,4 \text{ ppm}) \times \begin{cases} 10^{-34} [\text{J}\cdot\text{seg}] \\ 10^{-27} [\text{erg}\cdot\text{seg}] \end{cases}$$

ou também a famosa constante "h-cortado"

$$\hbar \equiv \frac{h}{2\pi} = 1,05459 \times \begin{cases} 10^{-34} [\text{J}\cdot\text{s}] \\ 10^{-27} [\text{erg}\cdot\text{s}] \end{cases}$$

O valor acima foi determinado em 1968, por Parker, Langenberg, Denevstein e Taylor usando o Efeito Josephson em supercondutores (Phys. Rev. 177, 639). Hoje temos medidas mais precisas usando o efeito Hall Quântico.

No estágio atual, podemos considerar a Mecânica Quântica como a teoria fundamental dos fenômenos atômicos. Ela se baseia em dados experimentais que geralmente fogem da nossa percepção direta, isto é

12

fogem do quadro do mundo externo que temos elaborado com base na nossa experiência quotidiana. Esta intuição tem crescido de observações de grande escala, e são claramente afetadas pelas limitações dos nossos órgãos sensoriais.

Se bem a Mecânica Quântica foi desenvolvida em analogia com a Mecânica Clássica (existindo paralelos formais entre ambas teorias), elas são radicalmente diferentes em relação aos fundamentos básicos, em relação a como elas "chamam para a natureza". Estas diferenças serão notadas ao longo do curso, enquanto é desenvolvido o formalismo matemático.

A maneira tradicional de estudar MQ segue o desenvolvimento histórico. Este não é necessariamente o mais simples e didático. Aqui seguimos um tratamento mais direto que conduz ao conceito de espaços vetoriais de dimensão finita e mostra as evidências da existência do Spin, uma grandeza física sem análogo clássico. A experiência de Stern e Gerlach é também conhecida como de "quantização espacial".

RESUMO DAS EXPERIÊNCIAS RELEVANTES

I. INTERFERÊNCIA E DIFRAÇÃO

Difração da Luz (**Young**, 1803; **Laue**, 1912)

Ondas Eletromagnéticas

II. QUANTOS ELETROMAGNÉTICOS

Radiação do Corpo Negro (**Planck**, 1900)

Efeito Fotoelétrico (**Einstein**, 1904)

Efeito Compton (**Compton**, 1923)

Princípio de Combinação (**Ritz-Rydberg**, 1908)

III. ONDAS MATERIAIS

Difração de Elétrons (**Davisson-Germer**, 1927;

J.P. Thompson, 1928)

IV. CARÁTER CORPUSCULAR DA MATÉRIA

Câmara de Wilson (**Wilson**, 1911)

V. VALORES QUANTIZADOS DE GRANDE- ZAS FÍSICAS

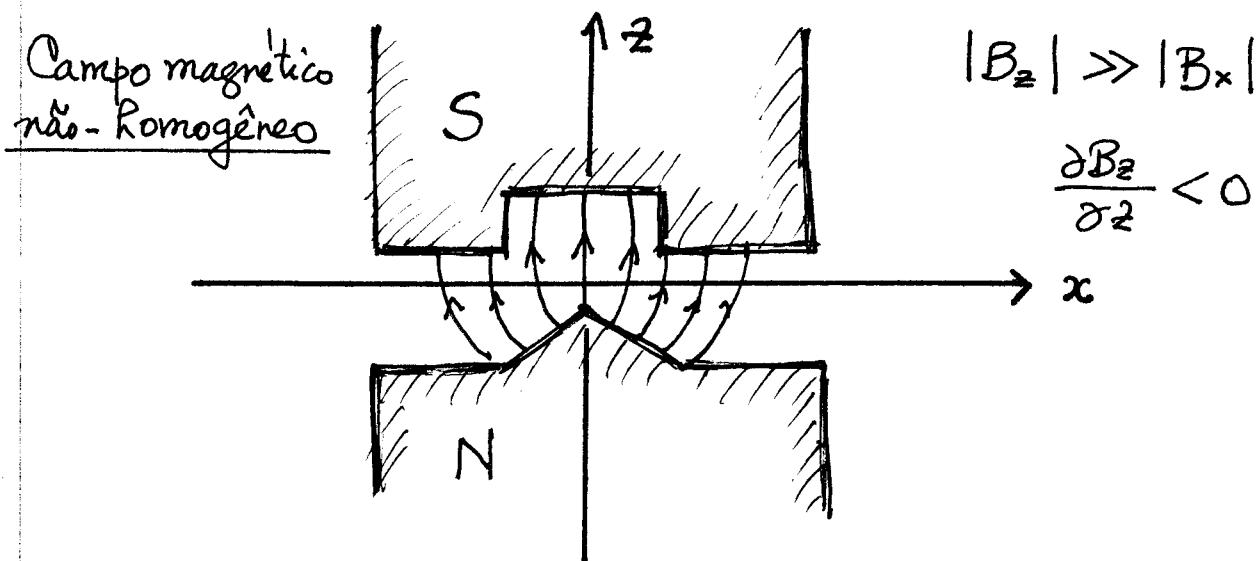
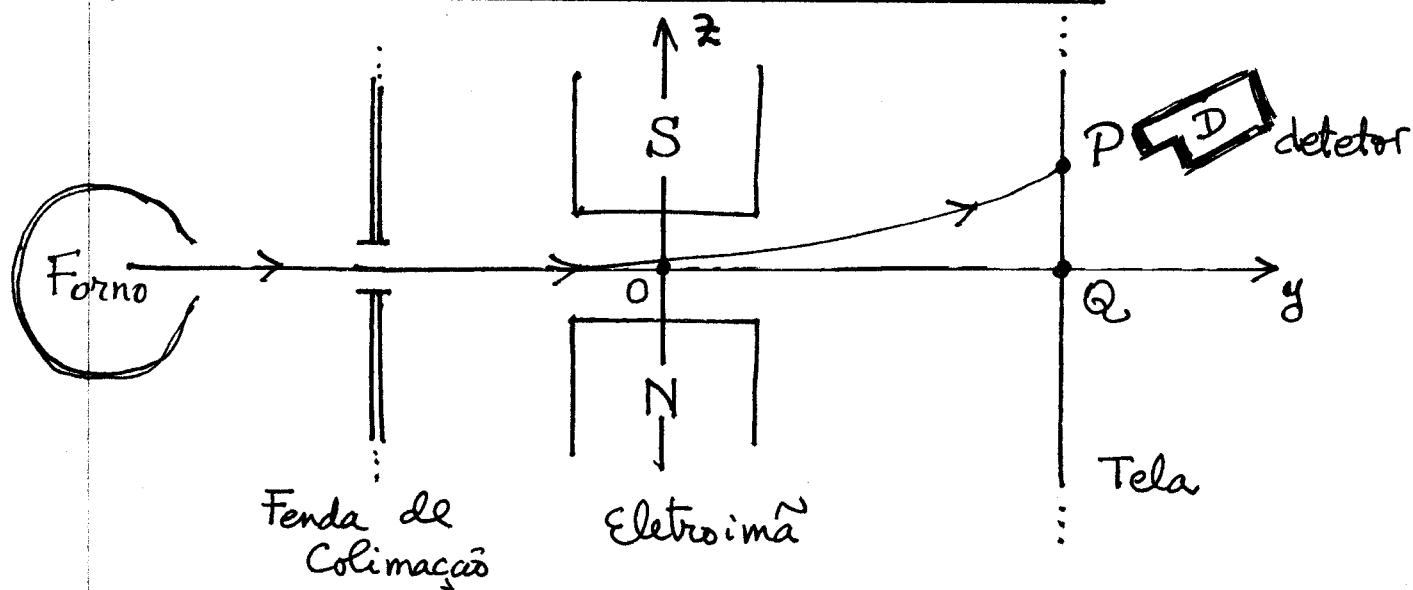
Calor específico dos sólidos (**Einstein**, 1907;

Debye, 1912)

Experiência de **Franck e Hertz** (1913)

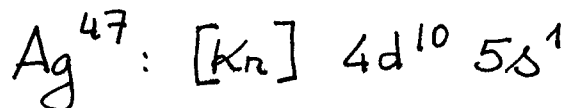
Experiência de **Stern e Gerlach** (1922)

§ A EXPERIÊNCIA de STERN e GERLACH



Notas relevantes sobre a experiência de Stern-Gerlach:

- A) Estudar a deflexão de um feixe de átomos paramagnéticos neutros (originalmente átomos de prata) em um campo magnético altamente não-homogêneo



- B) Geometria: O campo magnético \vec{B} tem um plano de simetria (yOz) que contém a direção original (Oy)

do feixe. Tem também simetria de translação ao longo do eixo (Oy). Portanto \vec{B} não tem componente B_y ($B_y \equiv 0$) I 5

c) A componente dominante do campo é B_z , $|B_z| \gg |B_x|$, e ela varia fortemente naquela direção

$$\frac{\partial B_z}{\partial z} < 0.$$

Como devemos ter $\nabla \cdot \vec{B} = 0$

$$0 = \frac{\partial B_x}{\partial x} + \frac{\partial B_z}{\partial z} \Rightarrow \frac{\partial B_x}{\partial x} = -\frac{\partial B_z}{\partial z} > 0$$

D) Força clássica da deflexão:

d₁) sendo os átomos neutros, não estão sujeitos à força de Lorentz;

d₂) se eles possuem um momento magnético $\vec{\mu}$, as forças resultantes são derivadas do potencial

$$W = -\vec{\mu} \cdot \vec{B},$$

com a força \vec{F} dada por

$$\vec{F} = -\nabla W = \nabla(\vec{\mu} \cdot \vec{B}).$$

Temos então: $\vec{F} = (\mu_x \partial_x B_x, 0, \mu_x \partial_z B_x + \mu_z \partial_z B_z)$

Como $\nabla \times \vec{B} = 0$, $\partial_x B_z = \partial_z B_x$, e por simetria,

B_z não depende de x , em $x=0 \Rightarrow \partial_x B_z = 0 \Rightarrow \partial_z B_x = 0$.

I 6

Como também temos $\partial_x B_x = -\partial_z B_z$, a força pode ser escrita como:

$$\vec{F} = (-\mu_x, 0, \mu_z) \partial_z B_z, \text{ para o plano } \underline{x=0}.$$

Isto mostra que se o momento magnético $\vec{\mu}$ está aleatoriamente orientado, a média da força na direção \underline{x} é igual aquela na direção \underline{z} . Na tela, isto daria uma distribuição isotrópica e não linear dos átomos recebidos. Pode ser mostrado porém (Am. J. Phys. 50 (8), 697 (1982)), que o torque no momento magnético produz uma rápida precessão em torno da direção do campo. Desta forma, a média da força transversa é compensada, e o resultado líquido seria uma distribuição linear contínua na direção \underline{z} .

Resultado líquido:

$$\vec{F} \cong \mu_z \partial_z B_z \hat{z}$$

E) Os 47 elétrons do átomo estão ligados ao núcleo que é 2×10^5 vezes mais pesado que os elétrons. Assim esperamos que o átomo como um todo, possa ser descrito como um ente clássico, descrevendo uma trajetória determinada. Se os momentos magnéticos estão aleatoriamente orientados, esperamos uma distribuição contínua (linear) na tela, para todos os valores possíveis de μ_z entre os limites

$$-|\vec{\mu}| \leq \mu_z \leq |\vec{\mu}|$$

F) Como camadas atômicas fechadas não possuem momentum angular, esperamos que o momento magnético esteja associado ao elétron de valência ($5s^1$). Como o núcleo é muito pesado, o seu momento magnético pode

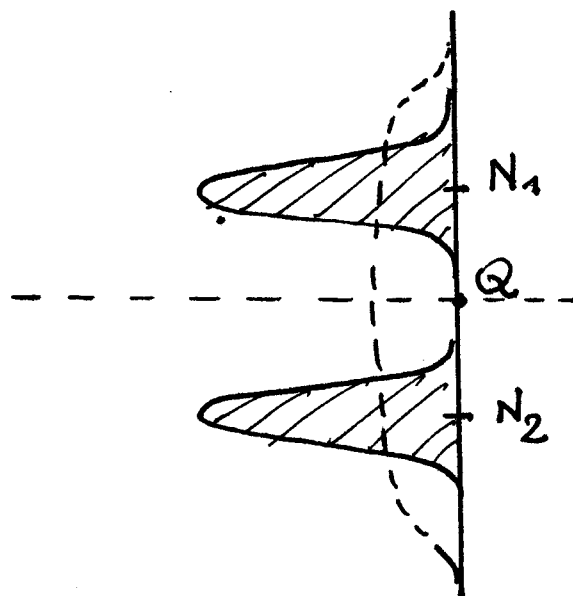
ser negligenciado:

$$\vec{\mu} = -g \mu_B \vec{L}$$

g : fator de Landé, $\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$

\vec{L} : momentum angular em unidades de \hbar

Os resultados da experiência estão em completa contradição com a argumentação acima. Não é observada uma mancha contínua na tela, mas si duas manchas separadas (quantização espacial)



A dispersão das manchas é causada pela distribuição de velocidade dos elétrons

Esta experiência associa um momentum angular "intrínseco" ao elétron. Este é chamado de spin \vec{S} . A componente S_z do spin pode assumir apenas dois valores: "spin up" (+) e "spin down" (-). Os valores medidos estão ligados com a constante de Planck \hbar

$$S_z = \begin{cases} (+), & \hbar/2 \\ (-), & -\hbar/2 \end{cases} \quad (\text{Quantização do Spin do elétron})$$

I 8

Como o espaço é isotrópico, esperamos que esta propriedade não seja exclusiva da componente S_z . A experiência pode ser repetida com o mesmo resultado, orientando o campo magnético em uma direção arbitrária (por exemplo a direção \underline{x} , separando espacialmente as componentes $(S_x, +)$ e $(S_x, -)$).

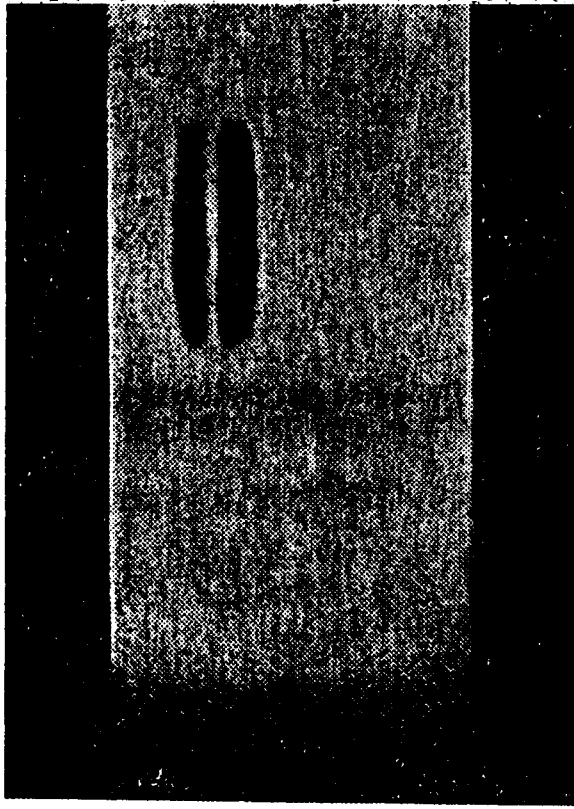


Fig. 36. Résultats de l'expérience de Stern-Gerlach avec le lithium

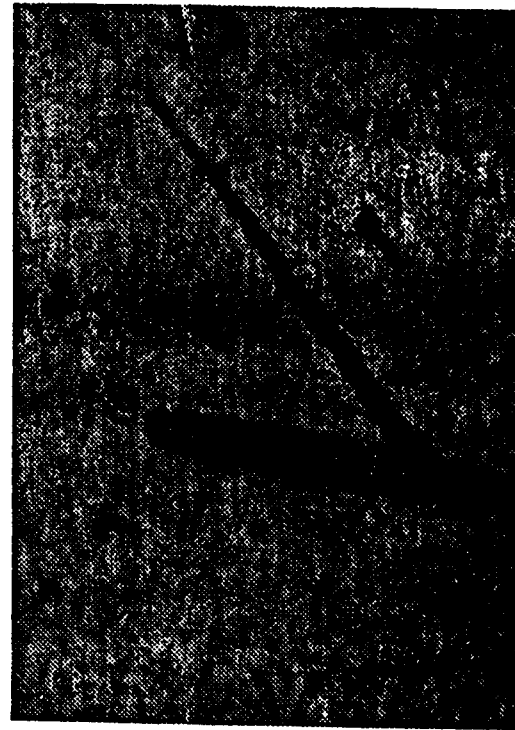
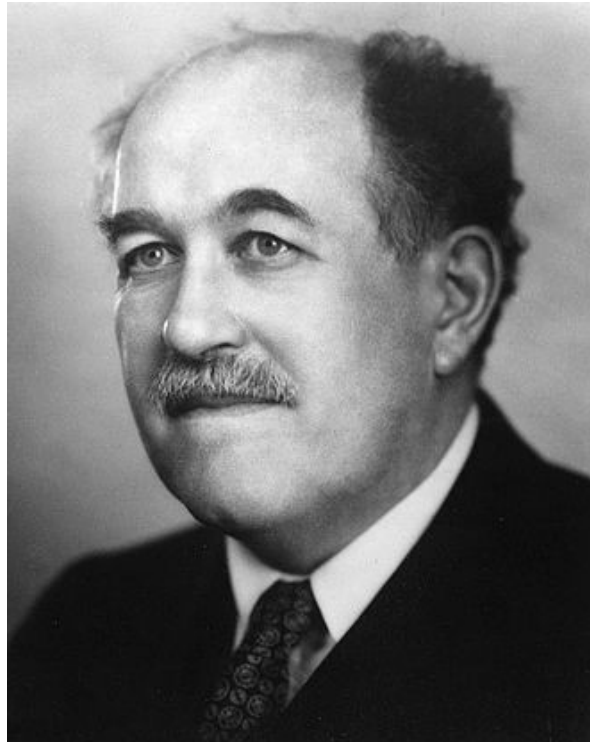


Fig. 37. Résultats de l'expérience de Stern-Gerlach avec l'hydrogène

du moment magnétique de l'atome. Ce calcul a été réalisé et pour M une quantité égale à un magnéton de Bohr. Il est vrai que dans les conditions de l'expérience ce résultat a été obtenu avec une précision faible (erreur d'environ 10%), mais, toutefois, suffisante pour aboutir à une conclusion certaine.

L'expérience de Stern-Gerlach avec d'autres expériences peut être rangée parmi les expériences fondamentales de la physique, car elle permet de dégager une des propriétés les plus importantes



Otto Stern

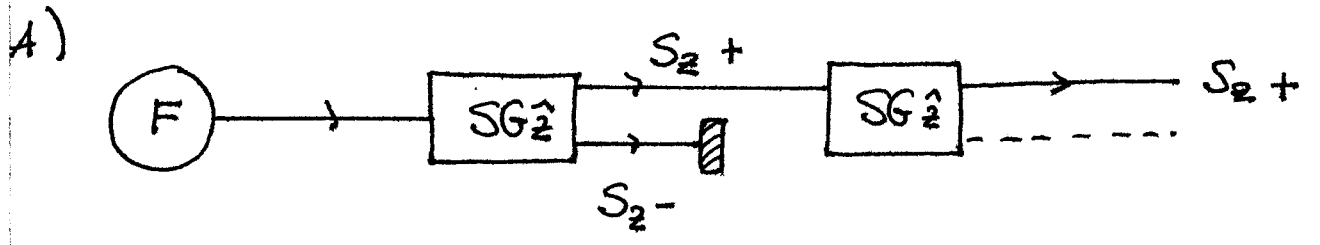


Walter Gerlach

§ Natureza do aparelho matemático da MQ: experiências com aparelhos de Stern - Gerlach sequenciais

Notação : $SG \hat{z}$ → aparelho de S-G com o campo magnético orientado na direção \underline{z} .

Consideramos os arranjos abaixo:



O spin dos elétrons vindo do forno estão aleatoriamente orientados. O primeiro SG separa as componentes ($S_z +$) e ($S_z -$) em proporção 50% e 50%. A componente ($S_z -$) é completamente bloqueada. Temos agora um feixe polarizado de elétrons, e isto é confirmado por um segundo aparelho $SG \hat{z}$, que é transparente para este feixe.

Pergunta: Podemos considerar o feixe inicial como formado por 50% de elétrons com ($S_z +$) e 50% com ($S_z -$) ?

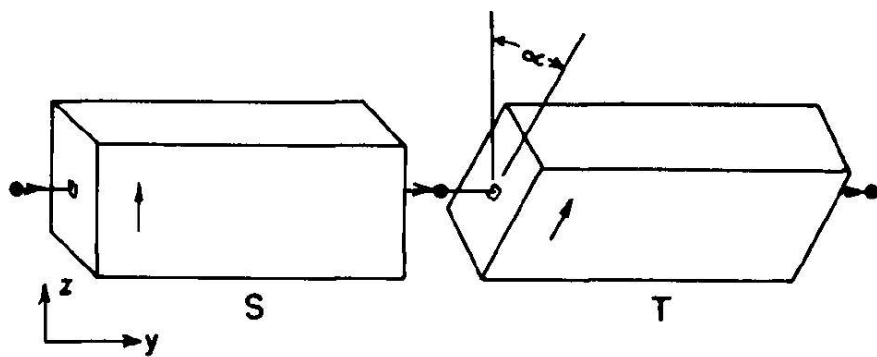
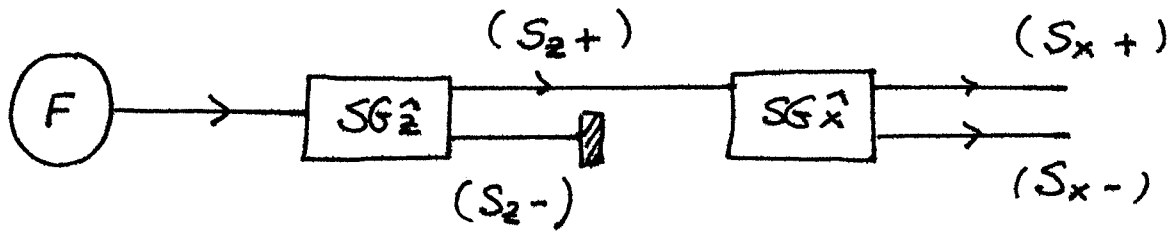


Fig. 5-6. Two Stern-Gerlach type filters in series; the second is tilted at the angle α with respect to the first.

B) Sequência mais interessante:



No segundo aparelho de SG, o campo magnético está rodado em 90° graus em relação ao primeiro. O $SG_{\hat{z}}$ separa o feixe original em duas componentes:

50% de (S_z+) , 50% de (S_z-)

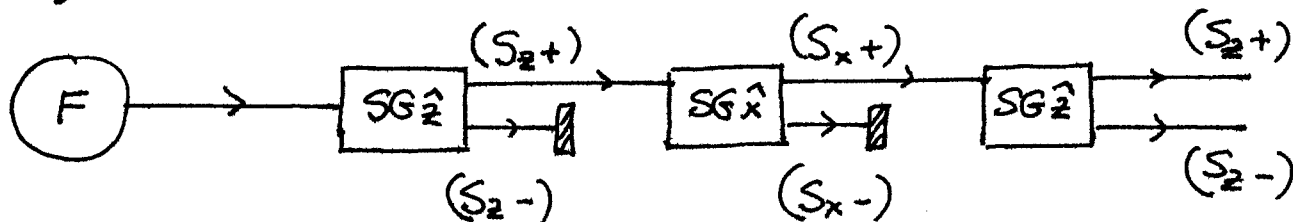
A componente (S_z-) é completamente bloqueada, só incide a componente (S_z+) no segundo SG. O resultado da experiência é duas componentes com as mesmas intensidades:

50% com (S_x+) , 50% com (S_x-)

Pergunta: O feixe intermediária (S_z+) , pode ser pensado como composto de 50% de partículas com (S_z+, S_x+) e 50% com (S_z+, S_x-) ?

Para responder esta pergunta, analisamos outra vez os feixes emergentes:

c)



A experiência mostra que o feixe, que acreditávamos ser (S_z+, S_x+) , é novamente resolvido em duas componentes para S_z . Reaparece a componente (S_z-) que pensávamos ter sido completamente bloqueada pelo primeiro aparato. A escolha do feixe com (S_x+) no segundo aparato $(SG_{\hat{x}})$ destrói qualquer informação prévia sobre S_z .

Esta experiência mostra também que não podemos determinar S_x e S_z simultaneamente. Contrasta com o caso clássico, onde as três componentes do momentum Angular podem ser determinadas sem problema

§ Analogia com a luz polarizada : necessidade de introduzir espaços vetoriais

A situação descrita antes, com polarização e filtros, tem uma analogia estreita com o problema de polarização da luz.

Consideramos luz monocromática (uma onda eletromagnética) propagando na direção \hat{z} . A polarização é perpendicular à direção de propagação. Uma onda linearmente polarizada na direção x é representada por um vetor (digamos para o campo elétrico)

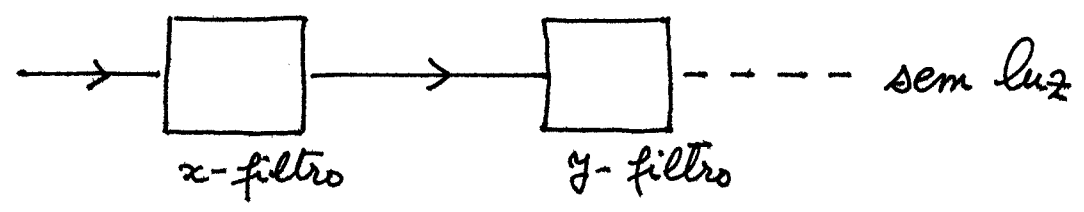
$$\vec{E}[x] = E_0 \hat{x} \cos(kz - \omega t).$$

Da mesma maneira, para polarização linear na direção y , temos

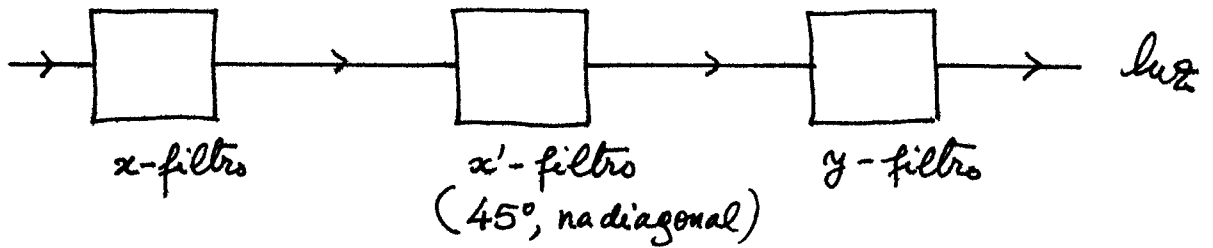
$$\vec{E}[y] = E_0 \hat{y} \cos(kz - \omega t)$$

Para os filtros usamos Polaroid. Chamamos x-filtro, um filtro que seleciona a componente da luz linearmente polarizada na direção x . O filtro pode ser rodado, selecionando assim qualquer componente no plano perpendicular à direção de propagação.

I) Primeiro arranjo:



II) Segundo arranjo:



Colocar no meio, um filtro orientado a 45° com a direção original

$$\vec{E}_{[x']} = E_0 \hat{x}' \cos(kz - \omega t)$$

$$\hat{x}' = \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{x} + \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{y} \quad , \quad \hat{y}' = -\frac{1}{\sqrt{2}} \hat{x} + \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{y}$$

Os vetores unitários estão ligados por uma matriz de rotação:

$$\begin{pmatrix} \hat{x}' \\ \hat{y}' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \end{pmatrix}$$

A transformação inversa é dada por:

$$\begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{x}' \\ \hat{y}' \end{pmatrix}$$

Assim, para a onda polarizada na direção \hat{x}' temos:

$$E_0 \hat{x}' \cos(kz - \omega t) = E_0 \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \hat{x} \cos(kz - \omega t) + \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{y} \cos(kz - \omega t) \right]$$

Analogamente, para a componente \hat{y}' :

$$E_0 \hat{y}' \cos(kz - \omega t) = E_0 \left[-\frac{\hat{x}}{\sqrt{2}} \cos(kz - \omega t) + \frac{\hat{y}}{\sqrt{2}} \cos(kz - \omega t) \right]$$

A experiência é explicada da seguinte maneira:

- Um feixe polarizado linearmente na direção \hat{x} é uma superposição linear de feixes polarizados nas direções (\hat{x}', \hat{y}') ;
- O segundo filtro seleciona a componente \hat{x}' , que por sua vez é uma superposição linear de feixes polarizados nas direções \hat{x} e \hat{y} ;
- O terceiro filtro seleciona então a componente \hat{y}' , que reaparece após ser totalmente filtrada pelo primeiro Polaróid.

Queremos explicar a experiência de Stern-Berlach em analogia com a luz. Vemos que a chave é introduzir combinações lineares de vetores. Vamos a introduzir então vetores estados, usando a notação (de Dirac):

$$|S_\alpha; \pm\rangle, \quad \alpha = x, y, z$$

O resultado da segunda experiência de S-G, sugere escrever os estados $|S_x; \mp\rangle$ como combinações lineares dos estados $|S_z; \pm\rangle$, da forma

$$(*) \begin{cases} |S_{x;+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |S_{z;+}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |S_{z;-}\rangle, \\ |S_{x;-}\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} |S_{z;+}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |S_{z;-}\rangle, \end{cases} \quad \text{I } 16$$

junto com a transformação inversa:

$$\begin{cases} |S_{z;+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |S_{x;+}\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |S_{x;-}\rangle \\ |S_{z;-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |S_{x;+}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |S_{x;-}\rangle \end{cases}$$

Assim o feixe emergente com $(S_{z,+})$ pode ser considerado como uma superposição dos feixes com $(S_{x,+})$ e $(S_{x,-})$. O feixe $(S_{x,+})$ selecionado, é por sua vez uma combinação linear de feixes com $(S_{z,+})$ e $(S_{z,-})$. Assim, o feixe com $(S_{z,-})$ reaparece no último SG.

Vemos que somos forçados à introduzir um espaço vetorial de dimensão 2 (duas componentes da experiência de S-G) não diretamente ligado com o espaço real.

Mas que acontece com a componente S_y do spin? Por simetria, deveria acontecer algo completamente semelhante com a componente S_x . Portanto um feixe polarizado $(S_y,+)$, por exemplo, deveria ser uma combinação linear de $(S_{z,+})$ e $(S_{z,-})$, com coeficientes com o mesmo valor absoluto. Porém, a transformação (*) acima, para $|S_{x;\pm}\rangle$ já acomodou as únicas transformações lineares com coeficientes reais possíveis. Precisamos de uma combinação linear que seja linearmente independente à (*). A saída para este problema, sem aumentar a dimensão do espaço vetorial, é considerar coeficientes complexos.

Para $|S_y; \pm\rangle$ escrevemos então:

$$\begin{cases} |S_y; +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |S_z; +\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} |S_z; -\rangle, \\ |S_y; -\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |S_z; +\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}} |S_z; -\rangle, \end{cases}$$

e todas as outras combinações lineares ligando as componentes (S_x, S_y, S_z) . Estes estados são construídos, no livro do Sakurai, em analogia aos estados circularmente polarizados da luz:

$$\vec{E}_R = E_0 \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \hat{x} \cos(kz - \omega t) + \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{y} \cos(kz - \omega t + \frac{\pi}{2}) \right],$$

$$\vec{E}_L = E_0 \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \hat{x} \cos(kz - \omega t) - \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{y} \cos(kz - \omega t + \frac{\pi}{2}) \right],$$

e introduzindo um vetor complexo \vec{E} tal que

$$\text{Re}(\vec{E}) = \vec{E}/E_0,$$

temos:

$$\vec{E}_R = \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{x} e^{i(kz - \omega t)} + \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{y} e^{i(kz - \omega t + \frac{\pi}{2})}$$

$$\vec{E}_L = \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{x} e^{i(kz - \omega t)} + \frac{i}{\sqrt{2}} \hat{y} e^{i(kz - \omega t)}$$

Estas analogias foram feitas com o campo eletromagnético clássico, sem introduzir o conceito de fóton.