

Silvana Perez

MECÂNICA QUÂNTICA:

Um curso para professores da Educação Básica



Copyright © 2016 Editora Livraria da Física
1ª Edição

Direção editorial

José Roberto Marinho

Projeto gráfico

Fabrcio Ribeiro

Diagramação e capa

Fabrcio Ribeiro

Edição revisada segundo o Novo Acordo Ortográfico da Língua Portuguesa

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
(Câmara Brasileira do Livro, SP, Brasil)

Perez, Silvana

Mecânica quântica: um curso para professores da educação básica / Silvana Perez. – São Paulo:
Editora Livraria da Física, 2016. – (Série mestrado nacional profissional em ensino de física: v. 3)

Bibliografia

ISBN 978-85-7861-411-9

1. Física - História 2. Mecânica 3. Teoria quântica 4. Professores - Formação profissional
I. Título. II. Série.

16-03734

CDD-530.1207

Índices para catálogo sistemático:

I. Mecânica quântica: Física: Estudo e ensino 530.1207

Todos os direitos reservados. Nenhuma parte desta obra poderá ser reproduzida
sejam quais forem os meios empregados sem a permissão da Editora.

Aos infratores aplicam-se as sanções previstas nos artigos 102, 104, 106 e 107
da Lei Nº 9.610, de 19 de fevereiro de 1998



EDITORIAL

Editora Livraria da Física
www.livrariadafisica.com.br

Aos meus pais Carmela e José



Prefácio

Este texto foi produzido para servir como material base da disciplina Mecânica Quântica (MQ) do polo da Universidade Federal do Pará do Mestrado Nacional Profissional em Ensino de Física. O público-alvo desse mestrado são os professores da educação básica e o objetivo do programa é capacitar os profissionais que lecionam Física no ensino fundamental e médio quanto ao domínio de conteúdos específicos, bem como uso de recursos tecnológicos atuais para aprofundamento das discussões em sala de aula e aprendizagem significativa de conceitos.

Especificamente falando da disciplina MQ, o principal desafio encontrado ao preparar o curso foi equilibrar os temas abordados entre demonstrações matemáticas e discussões conceituais. Nesse sentido, nos deparamos com a falta de bibliografia básica para utilizar em sala de aula, uma vez que a maioria dos livros sobre o assunto apresenta um enfoque matemático muito forte, em detrimento das discussões conceituais. Paralelamente, boas discussões conceituais são apresentadas como produto de dissertações de mestrandos profissionais espalhados pelo Brasil, como por exemplo, os textos de apoio ao professor de Física – editados pelo Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do

Sul. Esses materiais adotam, porém, um enfoque muito voltado para o Ensino Médio, sem formalismo matemático.

Buscamos, assim, um meio-termo entre os dois tipos de material e acabamos por optar em produzir um material próprio, que objetivou equilibrar estes dois aspectos na disciplina: para as partes do texto que envolvem cálculos mais elaborados, o curso propõe exercícios que fazem com que o aluno estude o conteúdo individual e progressivamente, em atividade extraclasse, seguindo seu próprio ritmo de entendimento. É reservado à aula propriamente dita o debate dos principais pontos observados pelo estudante e suas principais dificuldades. Com essa metodologia propomos o estudo das seções (1.2), (6.1), (6.2) e (6.3).

O texto foi organizado em três unidades. Na Unidade I são apresentadas as discussões do início do século passado que motivaram o surgimento da Mecânica Quântica. Optamos por trabalhar fenômenos que são cobrados na grade curricular do ensino médio, opção esta discutida em sala de aula com os professores-alunos do mestrado. O objetivo desta unidade foi de apresentar as dificuldades que a física clássica encontrou para explicar o comportamento da natureza na escala atômica e quais hipóteses foram assumidas para explicar essas dificuldades.

Dando continuidade, a Unidade II tem como objetivo apresentar a formulação matemática da Mecânica Quântica. Assim, a importância do entendimento de espaços vetoriais é abordada seguindo a proposta de Carlos Aguiar (2015). Noções de espaço vetorial são discutidas a seguir, e os postulados da MQ são desenvolvidos. A entidade fundamental a ser explorada é a função de onda, e a partir dela é feita a análise gráfica da função densidade de probabilidade. Damos atenção especial à construção dos orbitais no átomo de hidrogênio, buscando fazer daí a transposição didática para o ensino médio. O enfoque das discussões não foi buscar analogias clássicas, e sim apresentar os fundamentos dessa nova teoria,

em que a “realidade” física se manifesta de forma altamente não intuitiva (entendendo que a intuição do estudante nesse momento é basicamente clássica). No decorrer do trabalho sempre são comparadas as visões clássicas e quânticas dos fenômenos, buscando formar no estudante uma nova intuição sobre a natureza quântica.

Ainda nessa unidade são discutidas outras aplicações como a partícula livre, o oscilador harmônico e o efeito de tunelamento. Não existe a preocupação de resolver sistematicamente todos os exemplos de potenciais usualmente estudados em um curso na área. Ao invés disso, o estudante é instigado a testar as diferentes funções de onda na equação de Schrödinger, de forma a se convencer que elas estão corretas e a partir daí é discutida a interpretação física das diferentes probabilidades resultantes.

Finalizando o texto, na Unidade III, aplicações tecnológicas são apresentadas: começamos pelo estudo do experimento de Stern-Gerlach e do spin do elétron no Capítulo 10, para então discutir o paradoxo EPR e apresentar uma introdução à computação quântica.

Muitas pessoas contribuíram, direta ou indiretamente, para este trabalho, às quais nesse momento manifesto meus sinceros agradecimentos. Aos meus colegas da Universidade Federal do Pará, aqui representados pelos professores João Furtado, Danilo Alves, Rubens Silva, Maria Lucia Costa e Fátima Baraúna que me apoiaram nesse projeto e, de uma forma ou de outra, contribuíram para sua realização, com discussão de temas relevantes, incentivo e apoio institucional. Muito importante também foram as excelentes questões levantadas pelos alunos da disciplina Mecânica Quântica do MNPEF dos anos de 2014 e 2016, que culminaram em discussões que muito enriqueceram o texto inicial. O incentivo dos professores Carlos Aguiar e Marta Feijó para que transformasse as minhas notas de aula neste livro foi decisivo nesse projeto.

Agradeço também a Penn Lee Rodrigues, pelo enorme trabalho de transcrever o original em *latex* para *word*; a Charles Silva, pela paciente e minuciosa leitura do manuscrito; a Célia Zeri, pela correção gramatical e a Ygor Pará, pelos desenhos das figuras contidas no texto.

Finalmente, eu agradeço aos membros da minha família, em particular meu marido Clair e meus filhos Gabriel e Clara, por sua paciência, incentivo e apoio durante o desenvolvimento deste livro.

Sumário

Parte I – O surgimento da Mecânica Quântica	13
1. A radiação térmica e a discretização da energia	15
1.1 O estudo da radiação de corpo negro no século XIX... 17	
1.2 O cálculo correto	22
2. O Efeito Fotoelétrico.....	29
3. Os modelos Atômicos.....	33
3.1 Dualidade onda-partícula e modelo de Broglie	36
4. Atividades Propostas	39
Parte II – Aspectos formais – Postulados da Mecânica Quântica	41
5. A necessidade de um espaço vetorial	43
5.1 Interferômetro de Mach-Zehnder	43
5.2 Vetores de Estado.....	47
6. Espaço de Hilbert.....	51
6.1 Definição de Espaço Vetorial	52
6.2 Espaço de Hilbert.....	57
6.3 Operadores Lineares	60

7. O formalismo	63
7.1 Os postulados	64
7.2 A Equação de Schrödinger na representação coordenada	67
7.3 A densidade de probabilidade	69
8. Aplicações	71
8.1 A partícula livre	71
8.2 O oscilador harmônico	77
8.3 O átomo de hidrogênio	83
8.4 O efeito de tunelamento	96
9. Atividades propostas	99
Parte III - Mais aplicações	103
10. Spin	105
10.1 O experimento de Stern-Gerlach e o spin do elétron ...	106
10.2 Partículas de spin $\frac{1}{2}$ e sistema de dois níveis	110
11. O artigo EPR e computação quântica	113
11.1 O Princípio da Superposição	114
11.2 Sistemas simples e compostos e paradoxo EPR ...	115
11.3 Desigualdades de Bell	122
11.4 Computação Quântica	124
12. Atividades propostas	127
13. Bibliografia	131

O surgimento da Mecânica Quântica

Nesta primeira unidade, iremos revisitar a Física do final do século XIX e início do século XX. As mudanças na sociedade trazidas pela revolução industrial influenciaram também novos avanços científicos. As indústrias começaram a pressionar governos e instituições educacionais a estudarem novas técnicas que pudessem representar maior eficiência nas linhas de produção. Seguindo esse movimento, surgiu em 1887, em Berlim, o primeiro instituto nacional de pesquisa, em parte financiado por indústrias, o *Physikalisch Technische Reichsanstalt*, ambiente onde boa parte das discussões, que culminaram com o surgimento da MQ, aconteceram (MEHRA; ECHENBERG, 1982). Iremos abordar alguns aspectos dessa nova teoria, conforme eles foram sendo analisados historicamente.

Vários textos foram utilizados como referência para a escrita desta parte. Primeiro, utilizamos em praticamente todo o texto o livro de Mehra e Echenberg (1982), que apresentam

um trabalho minucioso de pesquisa sobre o desenvolvimento da MQ com abordagem histórica e conceitos físicos.

No contexto da radiação de corpo negro, Crepeau (2009) destaca a lei de Stefan-Boltzmann, também com um enfoque histórico, centrado em quatro cientistas da época: Josef Stefan, Ludwig Boltzmann, Wilhelm Wien e Max Planck. Dougal (1976) resalta a importância de John Rayleigh, bem como de vários físicos experimentais como Lummer e Rubens na descoberta da quantização da energia. Finalmente, Wtaker (1979) reforça o trabalho de Dougal, usando o conceito de “quase-história” na Física para entender erros comuns que aparecem em livros didáticos na apresentação da radiação de corpo negro, e Bassalo (1996) mostra como esses erros podem ser encontrados em alguns desses livros, em particular quando se estuda a lei de Rayleigh-Jeans.

Sobre o efeito fotoelétrico, citamos os trabalhos de James (1973), Wtaker (1976) e Bassalo (2016). Para o estudo da evolução dos modelos atômicos, citamos o trabalho de Pinheiro (2011).

A radiação térmica e a discretização da energia

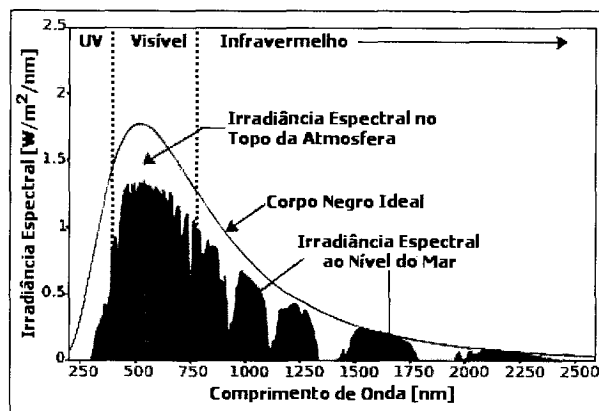
Durante todo o século XIX, muitos físicos estavam envolvidos no estudo, tanto experimental quanto teórico, do espectro da radiação emitido por corpos incandescentes. Vários motivos levaram a esse interesse. Em particular, a energia elétrica e a gás passaram a garantir a iluminação noturna das grandes cidades europeias. Assim, um dos desafios científicos da época era entender o espectro de radiação emitido por corpos incandescentes, em particular, buscando o material mais eficiente para essa função. O estudo da radiação térmica e a explicação teórica dos resultados experimentais levaram a um impasse que culminou com a hipótese de quantização da energia.

Desde o início do século, trabalhos experimentais analisavam a proporção entre a potência de emissão e a potência de absorção da radiação de corpos aquecidos. Buscando um modelo teórico para entender esses trabalhos, Kirchhoff propôs, em 1859, o conceito de corpo negro, como sendo um corpo ideal que absorve toda a radiação que incide sobre ele.

Para entender essa definição, vamos primeiro utilizar o fato de que todo corpo a uma temperatura emite radiação térmica. Essa radiação vai possuir uma distribuição espectral com um ou mais picos de frequência máximos, que vão depender das características do corpo. Diferentes corpos emitem radiação com diferentes espectros. A Figura 1.1 apresenta o espectro da radiação emitida pelo Sol conforme chega no topo da atmosfera (em amarelo) e no nível do mar (em vermelho). Observe que nos dois casos o espectro é envelopado por um espectro ideal (linha contínua). Além disso, no caso do nível do mar, existem alguns vales com baixa frequência de emissão, que são regiões com radiação com comprimento de onda na região das bandas de absorção da molécula de água.

Um corpo negro é um corpo ideal, cujo espectro de radiação depende somente da sua temperatura; em outras palavras, todos os corpos negros a mesma temperatura T emitem radiação térmica com o mesmo espectro, independente de suas características individuais. Ainda na Figura 1.1, a radiação emitida por um corpo negro ideal é representada pela linha contínua. Portanto, o Sol, assim como outras estrelas, é um bom exemplo de corpo negro.

Fig.1.1: Espectro de radiação solar.



Fonte: <http://recursosolar.geodesign.com.br>.

Outros exemplos de corpo negro são objetos cobertos com uma camada de pigmento negro. Em equilíbrio termodinâmico, a superfície do corpo negro ideal absorve toda a radiação eletromagnética que incide sobre ele, e irradia na forma de radiação térmica na mesma taxa que a absorve. A seguir apresentaremos alguns resultados anteriores ao trabalho de Planck, tanto teóricos quanto experimentais para, depois, discutir a hipótese de quantização da energia.

1.1 O estudo da radiação de corpo negro no século XIX

Considerando a definição de corpo negro proposta por Kirchhoff, em 1879, Josef Stefan apresentou uma lei empírica, que relacionava a potência irradiada por um corpo negro somente com sua temperatura, portanto não dependendo de outras características do corpo. O enunciado por ele proposto foi:

A potência total irradiada por unidade de área superficial de um corpo negro é diretamente proporcional à quarta potência de sua temperatura.

Matematicamente, a lei pode ser escrita como:

$$P = \sigma T^4, \quad (1.1)$$

onde T é a sua temperatura absoluta e σ é uma constante cujo valor não foi determinado por Stefan na época. Hoje ele está fixado em $5,670367 \times 10^{-8} \text{kg} \cdot \text{s}^{-3} \cdot \text{K}^{-1}$. Para explicar teoricamente a lei de Stefan, em 1884 Ludwig Boltzmann propôs unir as ideias de Maxwell sobre fenômenos eletromagnéticos, e sua conexão com a radiação, com a termodinâmica, apresentando um estudo teórico que comprovava a lei experimental de Stefan.

Desafio 1.1: Busque em artigos publicados em revistas de ensino de física uma maneira de

obter esse resultado experimentalmente. Apresente um resumo do aparato experimental encontrado.

Seguindo o método proposto por Boltzmann e a lei de Stefan, em 1893 Wilhelm Wien propôs o que hoje conhecemos como Lei de Deslocamento de Wien:

O comprimento de onda máximo irradiado por um corpo negro é inversamente proporcional a sua temperatura.

Matematicamente,

$$\lambda_m T = b, \quad (1.2)$$

onde λ_m é o comprimento de onda onde a radiação emitida pelo corpo negro é máxima, T é a sua temperatura absoluta e b é a constante de dispersão de Wien, cujo valor foi calculado somente anos depois por Lummer e Pringsheim, e hoje vale $2,8977685 \times 10^{-3} m.K$. Além disso, segundo Crepeau (2009) é também nesse artigo que “o conceito de *quantum* finito de energia, frequentemente atribuído a Planck, aparece”.

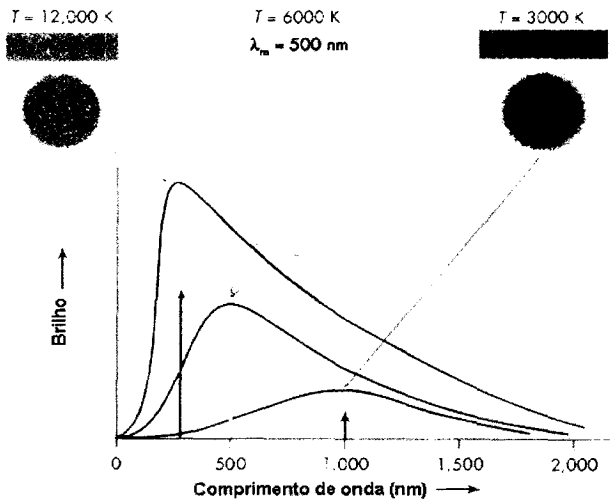
A Tabela I.1 apresenta alguns valores de frequência máxima de um corpo negro a diferentes temperaturas, bem como sua faixa no espectro eletromagnético.

Tabela I.1: Lei de deslocamento de Wien

Lei de Wien		
Temperatura (°C)	ν_m ($Hz \times 10^{13}$)	Cor
20	1,7	infravermelho
500	4,5	vermelho
700	5,7	verde
1000	7,5	Violeta

A Figura 1.2 esboça o gráfico da potência irradiada por um corpo negro como função do comprimento de onda a diferentes temperaturas.

Fig.1.2: Lei de Wien



Fonte: <http://prof2000.pt/>

Três anos depois de apresentar a lei dos deslocamentos, Wien escreveu um novo trabalho, no qual apresentou uma função que descreveria a densidade de energia da radiação de corpo negro como função do seu comprimento de onda,

$$u(\lambda, T) = a\lambda^{-5}e^{-c/(\lambda T)}, \quad (1.3)$$

onde a, c eram constantes a serem determinadas. Para obter esse resultado teórico, ele utilizou a “hipótese molecular”, considerando que a radiação de corpo negro era emitida por moléculas que obedeciam a lei de velocidades de Maxwell (CREPEAU, 2009).

Paralelamente aos estudos teóricos que avançavam no entendimento do comportamento de corpos aquecidos, estudos experimentais também se desenvolviam. Em particular, um grande avanço aconteceu a partir do ano de 1895,

quando Lummer e Wien resgataram uma ideia proposta por Kirchhoff em 1860 de representar o corpo negro como uma cavidade com um pequeno furo, por onde a radiação escaparia. Nos anos seguintes, Lummer persistiu na construção dessa cavidade. Outro cientista que também trabalhou nas medidas experimentais foi Rubens, desenvolvendo, em 1896, uma técnica que ficou conhecida como *método de raios residuais* (MEHRA, ECHENBERG, 1982).

Com o avanço das técnicas experimentais, em 1899 Lummer e Pringshein apresentaram resultados para a radiação emitida por cavidades com temperaturas entre 800 e 1400 K, pontuando as discrepâncias entre os resultados teóricos de Wien e os dados experimentais. Vale salientar que outros cientistas não encontraram as mesmas inconsistências e, portanto, existia um impasse de quais medidas experimentais estariam corretas.

Chegamos, assim, ao ano de 1900. Em junho desse ano, o físico John Rayleigh apresentou um método para calcular a densidade de energia emitida pelo corpo negro como função da temperatura, associando a radiação em equilíbrio com ondas estacionárias com energia média dada pelo teorema de equipartição da energia. Esse foi o primeiro artigo seu sobre o assunto, e nele é esboçada uma dependência polinomial da densidade de energia com a frequência da radiação,

$$\frac{1}{V} \frac{du}{dv} = \text{constante } T v^2. \quad (1.4)$$

onde V é o volume da cavidade e $\frac{1}{V} \frac{du}{dv}$ é a densidade de energia. Note que nesse resultado o valor da constante ainda não estava fixado.

Embora os primeiros interesses científicos de Max Planck estivessem ligados ao estudo da Termodinâmica, por volta de 1895, ele começou a debruçar-se sobre o problema da radiação térmica, apresentando nos próximos anos vários

artigos sobre o assunto. Em particular, durante o ano de 1900, ele encontrou-se com o físico experimental Rubens e na oportunidade os dois discutiram os dados experimentais existentes. Embora Planck provavelmente conhecesse a abordagem proposta por Rayleigh, seu enfoque no tratamento do problema era outro. Ele buscava calcular a entropia dos osciladores em equilíbrio com a radiação interna do corpo negro (DOUGAL, 1976) e no encontro da Sociedade Alemã de Física de novembro de 1900, ele apresentou um estudo especificamente a respeito da derivação da Lei de Wien para a radiação emitida por um corpo negro. Para resolver a inconsistência dessa lei com os dados experimentais, Planck propôs considerar que cada oscilador contribuiria com uma energia discretizada. Com essa hipótese, ele chegou em¹:

$$\frac{1}{V} \frac{du}{d\nu} = \frac{16\pi^2 \hbar}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{h\nu/(k_B T)} - 1}, \quad (1.5)$$

que reproduz exatamente os resultados experimentais. Na expressão anterior, $\hbar = 2\pi h$ e $h = 6,62607004 \times 10^{-34} \text{m}^2 \cdot \text{kg/s}$ ficou conhecida como constante de Planck. Além disso, $c = 3 \times 10^8 \text{m/s}$ é a velocidade da luz no vácuo e K_B é a constante de Boltzmann.

Somente cinco anos depois do trabalho de Planck, em 1905, é que Rayleigh apresentou o seu resultado completo para o cálculo, sendo dois meses depois corrigido em um fator de 8 por Jeans (BASSALO, 1996). O resultado clássico por eles obtido é dado por:

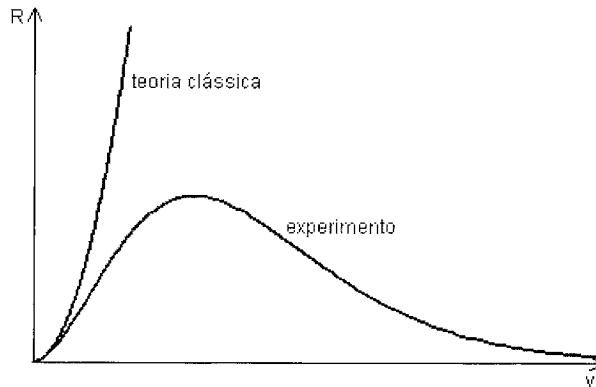
$$\frac{1}{V} \frac{du}{d\nu} = 8\pi \frac{k_B T}{c^3} \nu^2, \quad (1.6)$$

que é a lei de Rayleigh-Jeans. Para baixas frequências, esse resultado teórico é consistente com os dados experimentais. O problema aparece para altas frequências, nos quais o resultado clássico explode como uma função quadrática,

¹ Nesta seção apresentamos as principais ideias sobre o assunto. O leitor interessado na demonstração matemática deve ler a próxima seção.

enquanto os resultados experimentais caem exponencialmente (Figura 1.3).

Fig.1.3: Espectro da radiação emitida por um corpo negro a temperatura T . A lei de Rayleigh-Jeans, teoria clássica, e a Lei de Planck, em ajuste com os dados experimentais.



Fonte: <http://www.if.ufrgs.br>

1.2 O cálculo correto

Apresentamos nesta seção a dedução matemática dos resultados discutidos na seção anterior. O modelo teórico para obter a potência irradiada pelo corpo negro que iremos considerar é uma cavidade com um pequeno furo por onde entra a onda eletromagnética. Internamente, essa onda fica refletindo e eventualmente é absorvida pelas paredes da cavidade. A superfície da cavidade está a temperatura T , e emite radiação térmica. Classicamente, considera-se a solução das ondas eletromagnéticas dentro de uma caixa cúbica de lado L . Nesse caso, a energia do sistema é dada por (DAS, 2013; GREINER, 1998):

$$\mathcal{H} = \frac{1}{8\pi} \int (\vec{E}^2 + \vec{B}^2) dV = \frac{V}{4\pi\alpha^2 c^2} \sum_k (\vec{P}_k^2 + |\vec{k}|^2 c^2 \vec{Q}_k^2) = \sum_k H_k, \quad (1.7)$$

onde \vec{P} e \vec{Q} são as coordenadas generalizadas na representação hamiltoniana, c é a velocidade da luz e α é determinada

pelas equações de Hamilton (GOLDSTEIN, 2014). Além disso, \vec{k} indexa os modos discretos dentro da caixa e é dado por²:

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{L} \vec{n}, \quad n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, \dots \quad (1.8)$$

A energia descrita é idêntica a de uma coleção de infinitos osciladores harmônicos clássicos, cada um deles com energia contínua dada por $\mathcal{E}_k = \omega_k = |\vec{k}|c$.

Dada a energia do sistema imerso em um banho térmico, os observáveis termodinâmicos no sistema mantido a uma temperatura fixa T são obtidos como funções da função de partição, ou seja³ (SALINAS, 1997):

$$Z_{\text{clas}} = \prod_k \left[\int d\vec{P}_k d\vec{Q}_k e^{-\beta/2(\vec{P}_k^2 + \omega_k^2 \vec{Q}_k^2)} \right], \quad (1.9)$$

onde definimos $\beta = 1/(k_B T)$ e as integrais são realizadas em todos os modos. Temos, portanto, que resolver integrais gaussianas do tipo:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}. \quad (1.10)$$

Substituindo esse resultado na equação (1.9), chegamos a

$$Z_{\text{clas}} = \prod_k \left(\frac{2\pi}{\beta \omega_k} \right). \quad (1.11)$$

Exercício 1.1: Prove o resultado acima, envolvendo o cálculo de um número infinito de integrais gaussianas, provenientes dos infinitos modos k dentro da caixa cúbica.

-
- 2 Os modos discretos correspondem aos diferentes modos de onda estacionária para os campos elétrico e magnético dentro da caixa cúbica.
 - 3 Em um sistema termodinâmico mantido a temperatura constante por meio de um reservatório, a função de partição é a entidade fundamental que carrega toda a sua informação estatística, sendo por meio dela possível obter qualquer observável termodinâmico.

Conhecendo a função de partição, podemos obter os observáveis termodinâmicos. Por exemplo, a energia interna do sistema é dada por

$$U = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \sum_k k_B T \rightarrow \infty!!! \quad (1.12)$$

Obtemos assim uma energia interna infinita dentro da cavidade, considerando somente as hipóteses envolvendo a Física Clássica! Esse resultado foi tão surpreendente que na época ficou conhecido como catástrofe ultravioleta. Para entendê-lo melhor, consideramos que o valor infinito é proveniente da soma nos infinitos modos, e reescrevemos a energia total do sistema como:

$$U \equiv k_B T \sum_k (1) \equiv k_B T \sum_k \Delta \vec{n},$$

onde $\Delta \vec{n} = \Delta n_x^k \Delta n_y^k \Delta n_z^k = 1$, o que no limite de L grande, pode ser aproximado por uma integral, ou seja:

$$U \equiv k_B T \sum_k (1) = k_B T \sum_k \Delta \vec{n} \rightarrow 2k_B T \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 k (1), \quad (1.13)$$

onde utilizamos:

$$\Delta \vec{k} = (2\pi L)^3 \Delta \vec{n}. \quad (1.14)$$

A integral anterior pode ser reescrita em coordenadas esféricas como:

$$\begin{aligned} U &= 2k_B T \frac{V}{(2\pi)^3} \int k^2 4\pi dk \\ &= \frac{V k_B T}{\pi^2} \int k^2 dk \equiv \int du. \end{aligned} \quad (1.15)$$

Por comparação, podemos escrever que a contribuição para a energia total, do intervalo du , é dada por:

$$du = \frac{V k_B T}{\pi^2} k^2 dk = 8\pi V \frac{k_B T}{c^3} v^2 dv, \quad (1.16)$$

onde usamos que $\omega_k = kc = 2\pi\nu$. Finalmente, chegamos a

$$\frac{1}{V} \frac{du}{d\nu} = 8\pi \frac{k_B T}{c^3} \nu^2, \quad (1.17)$$

que é a lei de Rayleigh-Jeans, fornecendo a contribuição para a energia total do sistema, do intervalo com frequência entre ν e $\nu + d\nu$. A Figura 1.3 ilustra o comportamento teórico previsto por Rayleigh-Jeans e o resultado experimental, evidenciando que a contribuição para o valor infinito da energia total é proveniente dos altos valores de frequência, ou baixos comprimentos de onda (catástrofe ultravioleta).

Não é possível saber, com certeza, o que levou Planck a propor a quantização da energia dos osciladores. Porém, ele provavelmente deve ter feito o ajuste de curva do resultado experimental da Figura 1.3, observando que para altas frequências, ao invés de uma parábola, a curva se comportava como algo proporcional a:

$$\frac{1}{e^{a\nu} - 1}.$$

Na conta que acabamos de apresentar, duas passagens são importantes. A primeira delas, o cálculo das infinitas gaussianas, equações (1.9) a (1.11), e a segunda, a hipótese de L grande, o que leva à equação (1.13). Logicamente, uma das duas considerações deve ser revista de forma a aparecer o termo descrito anteriormente... Ora, esse termo lembra o resultado da soma de uma progressão geométrica infinita, com razão proporcional a uma exponencial. Assim, uma maneira de obter o ajuste correto é não realizar as integrais gaussianas nos modos k e sim realizar uma somatória. A hipótese de quantização implica então em:

$$\mathcal{H}_{\text{clas}} = \sum_k \mathcal{H}_k \quad \rightarrow \quad \mathcal{H}_{\text{quan}} = \sum_k \hbar\omega_k n_k, \quad (1.18)$$

ou seja, ainda se considera que a energia corresponde a uma coleção de infinitos osciladores harmônicos, porém agora

por algum motivo desconhecido e altamente *inesperado* no contexto da Física Clássica, esses osciladores só assumem valores discretos de energia. Com essa hipótese, a função de partição torna-se:

$$\begin{aligned} Z_{\text{quan}} &= \sum_{n_1} \sum_{n_2} \sum_{n_3} e^{-\beta \sum_{j=1}^3 \hbar \omega_k n_j} = \prod_{\vec{k}} \left(\sum_{n_k=0}^{\infty} e^{-\beta \hbar \omega_k n_k} \right) \\ &= \prod_{\vec{k}} (1 - e^{-\beta \hbar \omega_k})^{-1}. \end{aligned} \quad (1.19)$$

Exercício 1.2: Utilizando a fórmula de soma de progressão geométrica, identifique a sua razão e prove o resultado descrito anteriormente para a somatória.

Antes de continuar, vamos ressaltar o que foi considerado até aqui:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{clas}} &= \frac{V}{4\pi\alpha^2 c^2} \sum_{\vec{k}} (\vec{P}_{\vec{k}}^2 + |\vec{k}|^2 c^2 \vec{Q}_{\vec{k}}^2) \rightarrow \mathcal{H}_{\text{quan}} = \sum_{\vec{k}} \hbar \omega_k n_k \\ Z_{\text{clas}} &= \prod_{\vec{k}} \int dQ_{\vec{k}} dP_{\vec{k}} e^{-\beta H} \rightarrow Z_{\text{quan}} = \prod_{\vec{k}} \left(\sum_{n_j=0}^{\infty} e^{-\beta \hbar \omega_k n_k} \right) \end{aligned} \quad (1.20)$$

Continuando a conta, precisamos agora calcular a energia interna. Assim,

$$\ln Z_{\text{quan}} = \sum_{\vec{k}} \ln Z_{\vec{k}} = -\frac{2V}{(2\pi)^3} \int d^3k \ln(1 - e^{-\beta \hbar}). \quad (1.21)$$

Exercício 1.3: Partindo da expressão, encontre a Lei de Planck

$$\frac{1}{V} \frac{du}{dv} = \frac{16\pi^2 \hbar}{c^3} \frac{v^3}{e^{\beta \hbar v} - 1}, \quad (1.22)$$

que reproduz exatamente os resultados experimentais da Figura 1.3!

Exercício 1.4: Mostre que no limite clássico (baixas frequências) esse resultado recai na Lei de Rayleigh-Jeans.

Exercício 1.5: Prove, partindo da Lei de Planck, a Lei de Stefan-Boltzmann. Para isso utilize que

$$\int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}. \quad (1.23)$$



O Efeito Fotoelétrico

A proposta de discretização da energia para explicar o espectro de radiação emitido pelos corpos incandescentes foi utilizada por Einstein em 1905, para explicar um fenômeno observado por Hertz alguns anos antes (RICCI; OSTERMANN, 2003; MANGILI, 2012; BASSALO, 2016)⁴, no qual se observava a emissão de elétrons em materiais, geralmente metálicos, ao se incidir radiação eletromagnética sobre eles.

Várias simulações computacionais do efeito podem ser facilmente encontradas. Duas delas são em especial de fácil uso e apropriadas para a discussão deste texto (MONTEIRO; COLORADO). Algumas observações podem ser feitas a respeito do experimento:

1. Quanto à existência do fenômeno, podemos observar que para cada material (sódio, cobalto etc.) existe uma frequência de corte, abaixo da qual o fenômeno não ocorre. Para o sódio, ela é da ordem

4 O objetivo dessa seção é discutir em linhas gerais o efeito fotoelétrico. Detalhes do fenômeno podem ser encontrados em vários materiais, desde livros de Física Moderna a materiais de apoio ao professor de ensino médio.

de $5,7 \times 10^{14}$ Hz, para o cobalto, da ordem de 10^{15} Hz e assim por diante.

2. A intensidade da luz não afeta a existência do fenômeno e sim a quantidade de “partículas” emitidas.
3. Quanto maior a frequência, maior a velocidade das partículas emitidas (como podemos concluir isso do experimento?). A velocidade das partículas emitidas não depende da intensidade da luz incidente e somente da sua frequência.

Esse fenômeno era, na época de sua descoberta, altamente não trivial e foi explicado por Einstein em 1905. Segundo ele, a luz era composta de partículas – os fótons – que carregavam energia respeitando a relação:

$$E = h\nu, \quad (2.1)$$

onde ν é a frequência da luz incidente e h a constante de Planck. Na interação com o material, os fótons são trocados com os elétrons do átomo do metal, arrancando-os desse. Assim, durante o efeito fotoelétrico, um fóton é completamente absorvido pela matéria e sua energia é utilizada para arrancar um elétron do metal. Quanto maior for a frequência da luz incidente, mais energia é transferida para o elétron e ele sai com uma velocidade maior. Baixas frequências não possuem energia suficiente para arrancar o elétron do metal. A intensidade da luz incidente serve somente para definir a quantidade de elétrons arrastados.

Desafio 1.2: Pesquise em artigos e revistas e apresente exemplos de aplicação tecnológica do efeito fotoelétrico.

Antes de encerrar essa seção, vale a pena salientar que a hipótese da quantização da energia e da existência do fóton ia de encontro aos resultados do século XIX. A teoria

eletromagnética clássica havia sido finalizada por Maxwell, por volta de 1860, e dela o caráter ondulatório da luz surgia naturalmente. De certa forma, com o advento das equações de Maxwell, uma discussão de séculos sobre a essência da luz encerrava-se. Esse resultado reforçava as conclusões de Thomas Young, apresentadas em 1801 para a comunidade científica, em um trabalho no qual ele estudou os padrões de interferência formados ao passar uma fonte de luz por um anteparo com uma fenda única e depois por outro com duas fendas.



Capítulo 3

Os modelos Atômicos

Os primeiros modelos atômicos datam aproximadamente de 450 a. C., quando os filósofos Demócrito e Leucipo propuseram que a matéria era constituída por pequenas partículas indivisíveis, os átomos, baseados em conceitos filosóficos (PINHEIRO, 2011).

Essa hipótese contrastava com a de Platão e Aristóteles que imaginavam que a matéria era contínua. O modelo de matéria contínua de Aristóteles e Platão foi utilizado pela igreja católica durante toda a Idade Média e permaneceu até por volta de 1650 d.C. Nessa época, Pierre Gassendi, um padre francês que defendia uma atitude empírica com relação ao conhecimento, retomou as discussões do conceito de átomo. Quase dois séculos depois, em 1808, John Dalton, baseando-se em experimentos, apresentou a primeira teoria atômica científica, postulando que

A matéria ordinária é composta de partículas elementares, chamadas átomos que são permanentes e indivisíveis. Os elementos da natureza são feitos de tipos específicos de átomos, caracterizados pela sua massa

e propriedades químicas. Compostos são combinações de átomos com propriedades fixas.

Com o desenvolvimento das técnicas experimentais, durante o século XIX, o conceito de átomo indivisível proposto, na antiguidade por Demócrito e Leucipo, e revivido por Gassendi e Dalton, no renascimento, começou a perder o sentido. Em particular, surgia a ideia do elétron como uma partícula subatômica e, em 1897, Thomson realizou uma experiência para a sua detecção. Após a descoberta do elétron, Thomson postulou o modelo do pudim de passas, no qual os átomos constituintes da matéria seriam compostos por elétrons distribuídos uniformemente em uma “sopa” de carga positiva, que seria o interior do átomo.

O modelo de Thomson, porém, não conseguia explicar os resultados encontrados em 1911 por Rutherford. Ao realizar a experiência de espalhamento de partículas alfa (núcleo do átomo de hélio, constituído por dois prótons e dois nêutrons) por lâminas de ouro (o átomo de ouro é constituído por 79 prótons e 118 nêutrons), ele observou que

1. a maioria das partículas alfa atravessava a lâmina de ouro sem sofrer desvio em sua trajetória;
2. uma parcela pequena das partículas alfa sofria desvio leve de sua trajetória inicial;
3. uma fração muito pequena das partículas alfa batia na lâmina e voltava (como se tivesse encontrado uma parede impenetrável a sua frente!);

Para explicar os resultados apresentados, ele concluiu que

1. a ausência de desvio da maioria das partículas alfa indicava que havia uma grande região de vazio no átomo, a eletrosfera;
2. o desvio pequeno de algumas partículas alfa estava associado ao seu choque com os elétrons do átomo;

3. o desvio muito grande de uma parcela muito pequena das partículas alfa só poderia ser explicado pelo choque delas com algo de aproximadamente o mesmo tamanho, que deveria ser o núcleo do átomo de ouro positivo.

Com essas conclusões ele, portanto, postulou que

O átomo é praticamente um espaço vazio, com a maior parte de sua massa concentrada na região central, o núcleo, e com os elétrons orbitando ao redor dele.

Dos dados experimentais, ele também fez uma estimativa do tamanho do núcleo e do átomo, tal que, se o núcleo do átomo fosse uma bola de pingue-pongue, o átomo seria do tamanho de um estádio de futebol. A experiência de Rutherford de fato foi realizada por dois estudantes seus, Geiger e Marsden. A frase a seguir retrata um pouco do sentimento de Rutherford (1938) quando os dois estudantes informaram os resultados encontrados:

“Foi o momento mais extraordinário da minha vida. Era como se bombardeasse uma folha de papel com obuses de quarenta milímetros e alguns deles ricocheteassem de volta.”

Embora o modelo de Rutherford explicasse o espalhamento das partículas alfa pela folha de ouro, ele tinha um problema grave. Sabia-se na época, pelas leis do eletromagnetismo clássico de Maxwell, que cargas aceleradas emitem energia. Assim, um elétron se manteria orbitando ao redor do núcleo devido a uma aceleração centrípeta, o que ocasionaria o colapso do elétron e do modelo atômico proposto do Rutherford!

Para resolver esse impasse, em 1913, Bohr aperfeiçoou o modelo de Rutherford, propondo os seguintes postulados:

1. *na eletrosfera, os elétrons descrevem trajetórias circulares ao redor do núcleo, nas chamadas camadas ou níveis de energia; cada nível de energia possui uma energia bem definida, que depende somente do tipo de átomo; nessas camadas, os elétrons não perdem energia;*
2. *ao receber a quantidade exata de energia que corresponde à diferença entre dois níveis de energia, o elétron pula de uma camada para outra; para voltar para o estado de energia mais baixa, o elétron libera este quantum de energia, $\mathcal{E} = h\nu$;*
3. *o momento angular do elétron ao redor do núcleo é quantizado ($L = n\hbar$).*

Com esse modelo, Bohr interpretou “quanticamente” a discretização da energia. O preço a ser pago era o de entender esse estranho comportamento dos elétrons ao redor do núcleo, que ao invés de estarem livres para orbitarem a qualquer distância deste, e de forma a perder energia devido ao eletromagnetismo de Maxwell, orbitavam somente em algumas órbitas específicas, nas quais a energia se conservava! Novamente a Física da época era colocada em cheque, agora com uma nova máscara!

3.1 Dualidade onda-partícula e modelo de de Broglie

Até agora não discutimos um aspecto fundamental na construção da Mecânica Quântica. O estudo da radiação de corpo negro motivou a interpretação corpuscular da radiação eletromagnética. Porém, sabia-se que na propagação, a radiação eletromagnética comportava-se como onda, sofrendo por exemplo, interferência e difração. Era possível inclusive obter, das equações de Maxwell, a equação de onda para o campo eletromagnético, bem como prever a velocidade de propagação da luz no vácuo. Novamente, os cientistas da época se depararam com um comportamento altamente estranho para a luz, onda e partícula ao mesmo tempo!

Na tentativa de explicar os níveis de energia postulados por Bohr, bem como entender esse comportamento de onda-partícula da radiação eletromagnética, em 1924 de Broglie postulou o seguinte:

A cada partícula (elétron, átomo) está associada uma onda de matéria, cuja frequência e comprimento de onda são, respectivamente determinados pelas equações:

$$E = h\nu, \quad \lambda = \frac{h}{p},$$

onde p é o momento linear da partícula. A principal consequência desse postulado é que a condição de quantização do momento angular proposta por Bohr agora passou a ser equivalente a uma condição de onda estacionária para a onda de matéria associada ao elétron. Matematicamente, da hipótese de Bohr para a quantização do momento angular,

$$L = mvr = n\hbar = \frac{nh}{2\pi}$$

o que implica em:

$$2\pi r = \frac{nh}{mv} = \frac{nh}{p},$$

e usando o postulado de de Broglie:

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

que é a condição de onda estacionária em uma corda fixa em ambas as bordas.

As hipóteses de de Broglie sobre o comportamento ondulatório dos elétrons se confirmaram em 1927, quando Davisson e Germer observaram o padrão de interferência em feixes de elétrons.

A Tabela I.2 a seguir mostra o quanto as discussões e descobertas apresentadas até aqui foram importantes para

a Física e reconhecidas pela comunidade científica. Vemos que de todos os físicos citados, somente Rutherford não foi laureado com o Prêmio Nobel de Física. Ele, porém, recebeu o Prêmio Nobel de Química em 1908, “por suas investigações sobre a desintegração dos elementos e a química das substâncias radioativas”.

Tabela 1.2: Alguns cientistas laureados com o prêmio Nobel de Física nas primeiras décadas do século XX

Prêmios Nobel		
Físico	Descoberta	Ano Premiação
Joseph Thomson	descoberta elétron	1906
Wilhelm Wien	radiação de calor	1911
Max Planck	quantização da energia	1918
Albert Einstein	efeito fotoelétrico	1921
Niels Bohr	estrutura dos átomos	1922
Arthur Compton	efeito Compton	1927
Louis de Broglie	ondas de elétrons	1929
Davison e George Thomson	difração de elétrons	1937

Atividades Propostas

1. Atividade Individual extraclasse

Realize a pesquisa proposta no *Desafio* 1.1

2. Atividade individual extraclasse

Resolução da seção (1.2)

Leia atentamente a seção (1.2) e reproduza individualmente cada um dos exercícios propostos nela. O trabalho deve ser desenvolvido como atividade extraclasse e entregue ao professor na aula seguinte. O debate dos principais pontos das contas deve acontecer nesta aula.

3. Atividade Individual extraclasse

Realize a pesquisa proposta no *Desafio* 1.2

4. Plano de aula

Escolha um dos assuntos abordados nesta unidade e proponha um plano de aula, contendo necessariamente uma

simulação computacional. Alguns sites de simulação que podem ser utilizados:

<http://objetoseducacionais2.mec.gov.br>

<https://phet.colorado.edu>

entre outros.

Aspectos formais – Postulados da Mecânica Quântica

A primeira unidade deste texto apresentou algumas das principais descobertas do final do século XIX e início do século XX que iam de encontro ao comportamento esperado na Física conhecida. Peças de um novo quebra-cabeças foram surgindo, e a imagem que começou a se formar foi a de uma nova teoria, revolucionária, na qual a “realidade” macroscópica formulada por Newton e Maxwell, junto com outros grandes cientistas, não encontrava seu lugar. Entender o comportamento microscópico da matéria significou romper com grandes paradigmas da Física Clássica. Veremos, por exemplo, que o determinismo clássico, expresso na capacidade de conhecer com precisão a trajetória dos corpos materiais em qualquer instante, desde que certas condições iniciais sejam fornecidas, deixa de valer no mundo microscópico. Torna-se necessário rediscutir o conceito de realidade física, e definições do que é um objeto no contexto clássico e quântico surgem.

Entender MQ significa romper com toda a intuição clássica da natureza atômica, e mergulhar em um novo

mundo, desenvolvendo uma nova intuição, válida na escala microscópica.

Além desse aspecto conceitual da MQ, que é completamente inesperado e não intuitivo ao mundo macroscópico, o iniciante desse novo formalismo também se depara com dificuldades de cunho matemático. Enquanto classicamente a equação da trajetória da partícula pertence a um espaço vetorial de dimensão 3, na MQ a entidade que fornece toda a informação disponível pertence a um espaço vetorial de dimensão infinita, o espaço de Hilbert e, portanto, é necessário dominar essa nova ferramenta matemática para entender MQ.

O objetivo desta unidade inicial é estudar o formalismo da MQ. Assim, ela é dividida em cinco capítulos. No primeiro deles, seguindo a proposta de Carlos Aguiar (2015), apresentaremos a discussão dos principais aspectos da teoria, reduzindo as ferramentas matemáticas ao mínimo possível. Dessa forma, buscaremos de um lado explorar os conceitos e de outro conscientizar o estudante sobre a importância de espaços vetoriais na construção da teoria. Dando continuidade, no segundo capítulo, apresentaremos um estudo puramente matemático de espaços vetoriais, para nos três capítulos seguintes apresentar os postulados da MQ e as primeiras aplicações desses formulados.

A necessidade de um espaço vetorial

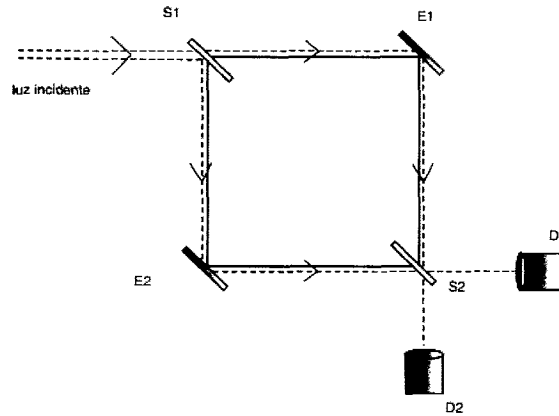
Em bora os efeitos fotoelétrico e Compton sejam muito utilizados para justificar a necessidade da interpretação corpuscular da luz, desde a segunda década do século passado já havia sido pontuado por Beck (1927) e Schrödinger (1927) que a interpretação corpuscular, utilizando o conceito de fóton, não era necessária para o entendimento desses fenômenos. Apresentaremos, a seguir, um fenômeno que carrega na sua interpretação a essência da MQ (AGUIAR, 2015).

5.1 Interferômetro de Mach-Zehnder

Iniciaremos a discussão analisando um aparato experimental proposto em meados da década de 1890 independentemente por Zehnder e Mach, conhecido como interferômetro de Mach-Zehnder (IMZ) (PESSOA, 2005). Ele originalmente foi desenvolvido para observar o comportamento ondulatório de um feixe de luz sob a ação de uma combinação específica de espelhos semirrefletores e refletores. O interferômetro é composto de dois espelhos ideais (E1 e E2) e dois espelhos

semirrefletores (S1 e S2), distribuídos conforme a Figura 5.1. Um feixe incidente chega ao aparato e sofre as reflexões. No regime proposto por Mach e Zehnder, que a partir de agora chamaremos de regime clássico, a intensidade da luz incidente é alta.

Fig.5.1: Interferômetro de Mach-Zehnder



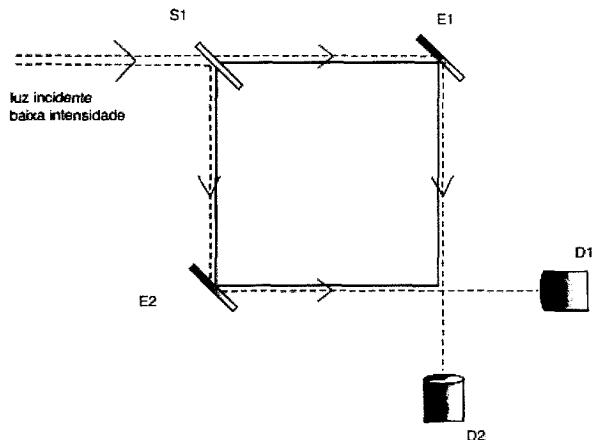
Considere que a cada reflexão (tanto no espelho semirrefletor quanto no refletor) o feixe ganha uma defasagem de um quarto de comprimento de onda, $\lambda/4$. Além disso, ao passar pelo espelho semirrefletor, a amplitude de cada ramo passa a ser $1/\sqrt{2}$ da inicial. Se todos os braços do interferômetro tiverem o mesmo tamanho, é fácil demonstrar que no detector $D2$ a interferência é destrutiva, e nada é detectado, enquanto que no detector $D1$ a interferência é construtiva, e todo o feixe inicial é detectado. Esse é um exemplo de fenômeno ondulatório, comprovando esse caráter da luz.

Exercício II.1: Prove o resultado anterior.

A seguir vamos discutir uma versão modificada desse experimento, provavelmente proposta por Einstein (BOHR, 1995 *apud* PESSOA, 2005), e realizada experimentalmente somente em 1986 por Grangier, Roger e Aspect (1986). A ideia

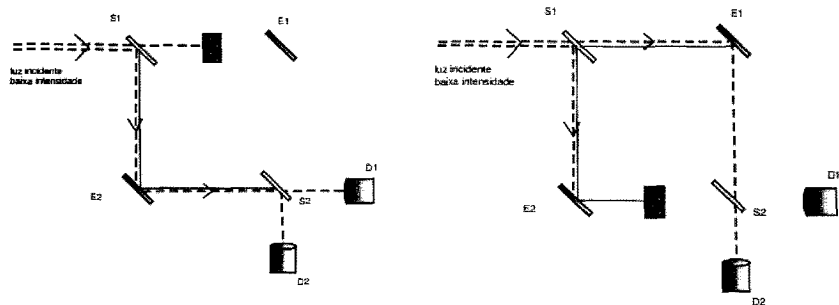
é diminuir a intensidade do feixe a tal ponto que se possa garantir que só um fóton chegue ao interferômetro por vez (regime quântico). Inicialmente vamos considerar a situação na qual o segundo semiespelho é retirado do aparato experimental Figura 5.2.

Fig.5.2: Interferômetro de Mach-Zehnder modificado pela retirada do segundo semiespelho e com baixa intensidade da luz incidente



Nesse caso, os detectores nunca disparam ao mesmo tempo; em outras palavras, o fóton ou atinge o detector D1, ou o detector D2. Além disso, em média, 50% das vezes o fóton chega em D1, e 50% das vezes em D2. Esse comportamento é simples de explicar, ou seja, o fóton se comporta como partícula, escolhendo um dos dois caminhos para percorrer. Esse comportamento corpuscular é corroborado pelo experimento modificado, no qual um dos caminhos é bloqueado (recolocamos o segundo semiespelho por motivos que explicaremos a seguir), conforme Figura 5.3. Com essa configuração, metade dos fótons que chega ao interferômetro é bloqueada, e a outra metade se divide igualmente entre os dois detectores.

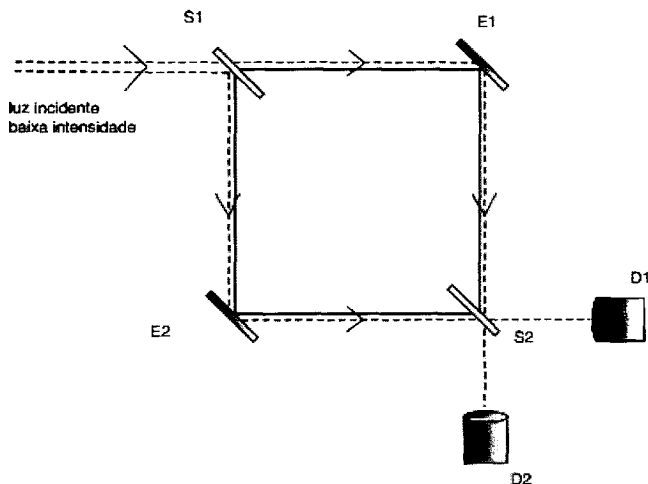
Fig.5.3: Interferômetro de Mach-Zehnder com um braço bloqueado



Se realmente, na situação de baixa intensidade da luz, o fóton escolhe um dos dois caminhos para seguir, conforme indicam esses experimentos, então o desbloqueio dos caminhos não deveria afetar o experimento e o resultado final deveria ser a soma dos resultados com os caminhos bloqueados, portanto, 50% dos fótons chegando em D1 e os outro 50% em D2.

Em outras palavras, ao escolher um caminho específico, o fóton “classicamente” não teria como saber que o outro caminho está bloqueado e, portanto, não deveria alterar o seu comportamento nos detectores. Porém, nesse caso, observamos a repetição do padrão de interferência, típico de fenômenos ondulatórios, discutido para o feixe com alta intensidade! (Figura 5.4). Esse comportamento é completamente inesperado e não pode ser explicado dentro do formalismo clássico.

Fig.5.4: Interferômetro de Mach-Zehnder no regime quântico



5.2 Vetores de Estado

A pergunta que fica da seção anterior é: afinal de contas, por onde o fóton passou em cada um dos experimentos até chegar ao detector? Nesta seção apresentaremos uma forma de explicar o comportamento acima e buscar uma resposta, caso ela exista, para essa pergunta, utilizando para isso vetores em duas dimensões.

Para interpretar o resultado do experimento no regime quântico, vamos associar a cada caminho disponível para o fóton um vetor no plano. Como existem dois caminhos independentes, podemos associar ao caminho 1 a direção x , que denotaremos por \hat{e}_1 e ao caminho 2 a direção y , que denotaremos por \hat{e}_2 (figura 5.5).

Fig.5.5: Vetores no plano associados a cada um dos caminhos no interferômetro.



Os dois vetores formam no plano uma base ortogonal e, portanto, qualquer vetor nesse plano pode ser escrito como uma combinação linear dos dois vetores da base,

$$\vec{v} = a\hat{e}_1 + b\hat{e}_2. \quad (5.1)$$

Na decomposição anterior, a e b representam as projeções do vetor \vec{v} nas direções x e y e são, respectivamente, dadas por $\vec{v} \cdot \hat{e}_1$ e $\vec{v} \cdot \hat{e}_2$. Em particular, podemos construir um vetor considerando $a = b = 1/\sqrt{2}$, obtendo assim:

$$\vec{w} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{e}_1 + \hat{e}_2). \quad (5.2)$$

Faremos agora a seguinte consideração: “ao chegar ao espelho semirrefletor S1 vindo do caminho representado por \hat{e}_1 , o estado físico do fóton se altera para o estado representado por \vec{w} ”. Não estamos dizendo que o fóton, ao chegar em S1, escolheu um caminho específico, já que \vec{w} contém informação dos dois caminhos disponíveis e, pela construção do interferômetro, só existem dois caminhos permitidos ao fóton, não estando disponível a ele um caminho intermediário representado pela combinação linear de \hat{e}_1 e \hat{e}_2 . Na verdade, não existe uma explicação clássica para o que significa o estado \vec{w} e sua interpretação física requer uma profunda discussão das diferentes interpretações da MQ. Abordaremos esse assunto em capítulos posteriores. Assumimos somente que a interação do estado \hat{e}_1 com um semiespelho S faz com que esse estado se altere instantaneamente para \vec{w} .

Analogamente, vamos considerar que a interação do estado \hat{e}_2 com um semiespelho S, faz com que ele se altere para um novo estado \vec{q} , dado por:

$$\vec{q} = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\hat{e}_1 + \hat{e}_2) \quad (5.3)$$

Exercício II.2: Mostre que os estados \vec{w} e \vec{q} são ortogonais.

Com essas hipóteses, podemos estudar cada um dos experimentos discutidos na seção anterior.

- Situação 1. IMZ modificado, sem o segundo semiespelho, no regime quântico

Nesse caso, o fóton incidente só interage com o semiespelho S1, alterando seu estado de \hat{e}_1 para \vec{w} (Figura 5.2). Além disso, o fóton que foi lançado no interferômetro tem probabilidades iguais de chegar em D1 e D2, podendo elas ser representadas, respectivamente, por:

$$p_1 = (\hat{e}_1 \cdot \vec{w})^2 = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 = \frac{1}{2}, \quad (5.4)$$

e

$$p_2 = (\hat{e}_2 \cdot \vec{w})^2 = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 = \frac{1}{2}. \quad (5.5)$$

- Situação 2. IMZ no regime quântico

Nesse caso, o fóton incidente interage com dois semiespelhos, S1 e S2. Nos processos de interação temos que

$$\begin{aligned} \hat{e}_1 &\Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{e}_1 + \hat{e}_2) \text{ primeiro semiespelho} \\ &\Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{e}_1 + \hat{e}_2) + \frac{1}{\sqrt{2}}(-\hat{e}_1 + \hat{e}_2)\right] \text{ segundo semiespelho} \quad (5.6) \\ &\Rightarrow \hat{e}_2 \end{aligned}$$

Na segunda linha, consideramos que na interação com o semiespelho, o estado \hat{e}_2 se altera para \vec{q} , ou seja, $\hat{e}_2 \Rightarrow \vec{q}$. Vemos assim que o estado final nesse processo é \hat{e}_2 e, portanto, o fóton com certeza chegará em D1.

Exercício II.3: Explique matematicamente a situação do IMZ com um braço bloqueado (Figura 5.3).

Espaço de Hilbert

No problema do IMZ explorado no capítulo anterior, foi necessário assumir vetores no plano para descrever o comportamento do fóton. Dois vetores linearmente independentes foram utilizados para descrever os dois caminhos possíveis que, classicamente, o fóton poderia percorrer. Veremos a seguir que esses dois vetores no plano formam um espaço vetorial, de dimensão dois.

Imagine agora uma situação hipotética, na qual três caminhos são, a princípio, disponibilizados para o fóton. Nesse caso, será necessário encontrar três vetores linearmente independentes para representar os três possíveis caminhos, e a descrição desse fenômeno no regime quântico acontecerá num espaço vetorial de dimensão 3.

A situação ideal onde o fóton é livre para percorrer qualquer caminho é uma generalização das situações descritas anteriormente, sendo, nesse caso, necessário um espaço vetorial de dimensão infinita para descrever o seu comportamento.

Nesse capítulo apresentaremos uma revisão de espaços vetoriais. Embora o capítulo seja puramente matemático,

sem possibilidade trivial de transposição didática para o ensino médio, ele será extremamente importante no entendimento dos capítulos seguintes, nos quais o formalismo da MQ será apresentado e exemplos de aplicação serão discutidos.

6.1 Definição de Espaço Vetorial

Começaremos definindo as principais entidades que constituem um espaço vetorial.

Corpo, vetor e espaço vetorial

Um corpo é um conjunto não vazio, C , dotado de duas operações, a soma e o produto, e denotadas respectivamente por: $+$ e \cdot , que satisfazem às seguintes propriedades ($\alpha, \beta, \gamma \in C$):

1. Comutatividade na soma: $\alpha + \beta = \beta + \alpha$
2. Associatividade na soma: $\alpha + (\beta + \gamma) = (\alpha + \beta) + \gamma$
3. Elemento neutro na soma $\alpha + 0 = \alpha$
4. Elemento inverso na soma ($-\alpha$): $\alpha + (-\alpha) = 0$
5. Comutatividade no produto: $\alpha \cdot \beta = \beta \cdot \alpha$
6. Associatividade no produto: $\alpha \cdot (\beta \cdot \gamma) = (\alpha \cdot \beta) \cdot \gamma$
7. Elemento neutro no produto ($\mathbb{1}$): $\alpha \cdot \mathbb{1} = \alpha$
8. Elemento inverso no produto (α^{-1}): $\alpha \cdot \alpha^{-1} = 1$

Exemplos de corpos são o conjunto dos números reais (\mathfrak{R}) e dos números complexos (C).

Um espaço vetorial V sobre um corpo C é um conjunto de elementos chamados *vetores*, v , e dotado de operações de soma e produto por escalar (um elemento do corpo), levando dois elementos de V sempre a um terceiro elemento de V (propriedade de fechamento), satisfazendo as propriedades de (1) a (4) descritas anteriormente para a soma. Além disso, o produto por escalar deve satisfazer ($\alpha, \beta \in C; u, v \in V$):

1. Associatividade no produto por escalar:
 $\alpha \cdot (\beta \cdot u) = (\alpha \cdot \beta) \cdot u$
2. $1 \cdot u = u$, onde 1 é o elemento neutro no produto em \mathbb{C}
3. Propriedade distributiva: $\alpha \cdot (u + v) = \alpha \cdot u + \alpha \cdot v$
4. Propriedade distributiva: $(\alpha + \beta) \cdot u = \alpha \cdot u + \beta \cdot u$

A seguir listamos alguns exemplos de espaços vetoriais:

- Vetores no plano

$$V = \mathcal{R}^2 = \{(x, y) | x, y \in \mathcal{R}\}.$$

Nesse caso, as operações de adição e produto por escalar ($\alpha \in \mathcal{R}$) são definidas, respectivamente, como:

$$(x_1, y_1) + (x_2, y_2) = (x_1 + x_2, y_1 + y_2) \quad (6.1)$$

$$\alpha(x_1, y_1) = (\alpha x_1, \alpha y_1)$$

Exercício II.4: Prove que o espaço vetorial descrito anteriormente satisfaz todas as propriedades de espaço vetorial.

Exercício II.5: Prove que o conjunto \mathcal{R}^n , com $n \in \mathcal{N}$ é um espaço vetorial sobre \mathcal{R} com as operações usuais de soma e produto por escalar.

- Matrizes:

Considere o conjunto das matrizes reais de ordem $m \times n$, $M_{m \times n}(\mathcal{R})$ e um elemento A deste conjunto,

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}.$$

Assumindo a soma de matrizes e o produto de matrizes por um número real, então $M_{m \times n}(\mathbb{R})$ é um espaço vetorial sobre os reais.

Exercício II.6: Prove que o espaço vetorial descrito anteriormente satisfaz todas as propriedades de espaço vetorial.

Exercício II.7: Prove que o conjunto de todos os polinômios de grau $\leq n$,

$$P_n = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n, \quad a_i \in \mathbb{R}$$

é um espaço vetorial sobre os reais.

Combinação linear entre vetores e vetores linearmente independentes

Considere v_1, v_2, \dots, v_n vetores pertencentes a um espaço vetorial V , e $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ escalares pertencentes ao corpo C . Define-se a combinação linear desses vetores, v , como sendo um novo vetor satisfazendo:

$$v = \alpha_1v_1 + \alpha_2v_2 + \dots + \alpha_nv_n = \sum_{i=1}^n \alpha_i v_i$$

Exercício II.8: Considere os vetores

$$v_1 = 2x^2 - x + 3 \quad \text{e} \quad v_2 = -x^2 + 4x - 2, \quad (6.4)$$

pertencentes ao espaço vetorial dos polinômios de grau ≤ 2 . Encontre α_1 e α_2 tal que $v = 4x^2 - 2x + 6$ seja uma combinação linear de v_1 e v_2 .

Um conjunto de vetores v_i é dito linearmente independente (LI) se

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i v_i = 0, \quad (6.5)$$

só for satisfeita para $\alpha_i = 0$. Se encontrarmos um $\alpha_i \neq 0$, então os vetores são linearmente dependentes (LD) Por exemplo, sejam os vetores $v_1 = (1,2)$ e $v_2 = (0,1)$ e $v_3 = (-1,1)$ do espaço \mathfrak{R}^2 sobre os reais. Nesse caso,

$$(0,0) = \alpha_1 v_1 + \alpha_2 v_2 + \alpha_3 v_3 = (\alpha_1 - \alpha_3, 2\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3), \quad (6.6)$$

e igualando os termos temos:

$$\alpha_1 - \alpha_3 = 0, \quad 2\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 0. \quad (6.7)$$

Da primeira igualdade temos que $\alpha_1 = \alpha_3$ e substituindo esse resultado na segunda igualdade chegamos a $3\alpha_1 + \alpha_2 = 0$, ou seja, $\alpha_2 = -3\alpha_1$. Assim, os três escalares são dados por $(\alpha_1, 3\alpha_1, \alpha_1)$, com $\alpha_1 \in \mathfrak{R}$. Os vetores são, portanto, LD.

Exercício II.9: Prove que os vetores $e_1 = (1,0,0)$, $e_2 = (0,1,0)$ e $e_3 = (0,0,1)$ do espaço vetorial \mathfrak{R}^3 sobre os reais são LI.

Exercício II.10: Seja $V = M_{3 \times 1}(\mathfrak{R})$, verifique se os vetores

$$v_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (6.8)$$

e

$$v_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (6.9)$$

são LI ou LD

Exercício II.11: Verifique se os vetores $p_1(x) = x^2 + x - 1$, $p_2(x) = 2x + 3$ e $p_3(x) = -x^2 + 1$ são LI ou LD

Produto interno e ortogonalidade

Dados dois vetores, $v_1, v_2 \in V$, com V sendo um espaço vetorial sobre os reais, define-se o produto interno, ou produto escalar, como uma operação que associa ao par de vetores um escalar $\alpha = v_1 \cdot v_2$ com as seguintes propriedades:

1. $v_1 \cdot v_2 = v_2 \cdot v_1$
2. $v_1 \cdot (v_2 + v_3) = v_1 \cdot v_2 + v_1 \cdot v_3$

Define-se a norma de um vetor como sendo $|v| = \sqrt{v \cdot v} \geq 0$. Finalmente, dois vetores são ortogonais quando o produto escalar entre eles é nulo.

Dimensão de um espaço vetorial e base

A dimensão de um espaço vetorial é o número máximo de vetores linearmente independentes que o espaço permite. O conjunto desses vetores gera uma base do espaço vetorial e qualquer outro vetor pode ser escrito como uma combinação linear dos vetores da base

$$v = \sum_{n=1}^N \alpha_n e_n, \quad (6.10)$$

onde v é um vetor qualquer de V , e_i , $i = 1, \dots, N$ é a base, e o espaço vetorial tem dimensão N .

Como exemplo, o conjunto dos vetores $e_1 = (1,0)$ e $e_2 = (0,1)$ é uma base em \mathfrak{R}^2 , pois um vetor qualquer em \mathfrak{R}^2 , denotado por $\{(x,y) | x,y \in \mathfrak{R}\}$ pode ser escrito como

$$(x,y) = x e_1 + y e_2. \quad (6.11)$$

Exercício II.12: Prove que o conjunto dos vetores $v_1 = (1,0), v_2 = (1,1)$ também é uma base em \mathfrak{R}^2 .

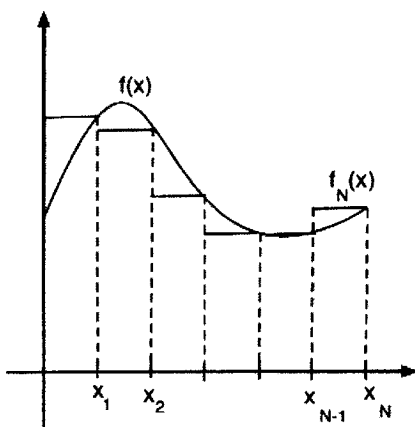
Exercício II.13: Prove que o conjunto dos vetores $v_1 = (1, 0, \dots, 0)$, $v_2 = (0, 1, 0, \dots)$, ..., $v_N = (0, 0, \dots, 1)$ é uma base em \mathfrak{R}^N .

6.2 Espaço de Hilbert

O espaço de Hilbert é um espaço vetorial de dimensão infinita. Para entender melhor esse conceito, considere, por exemplo, uma corda de comprimento L presa nas suas duas extremidades, e oscilando de alguma forma. Podemos representar o seu deslocamento da posição de equilíbrio, ou sua altura, como sendo uma função de posição, $f(x)$. Inicialmente, dividimos a corda em N pedaços, conforme Figura 6.1 e representamos o seu movimento por uma matriz coluna:

$$f_N = \begin{bmatrix} f_N(x_1) \\ f_N(x_2) \\ \vdots \\ f_N(x_N) \end{bmatrix}. \quad (6.12)$$

Fig.6.1: Deslocamento de uma corda em relação a sua posição de equilíbrio



É claro que a representação do movimento da corda será tão melhor quanto mais divisões houver. Assim, na situação limite,

$$f = \lim_{N \rightarrow \infty} f_N = \begin{bmatrix} f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \end{bmatrix}. \quad (6.13)$$

Nesse caso, a variável x toma o lugar do índice i e varia continuamente em toda a extensão da corda. Vemos, assim, que esse espaço tem dimensão infinita. A função $f(x)$ é a componente do vetor f na direção x , e o espaço tem dimensão infinita.

O produto interno de duas funções definidas no intervalo $[a, b]$ é definido como⁵

$$f \cdot g = \int_a^b f^*(x)g(x)dx. \quad (6.14)$$

Note que pela definição apresentada, vale que

$$g \cdot f = \int_a^b g^*(x)f(x)dx = \int_a^b (f^*(x)g(x))^*dx = (f \cdot g)^*. \quad (6.15)$$

Para finalizar essa seção note que a norma de um vetor nesse espaço é dada por:

$$|f| = \sqrt{f \cdot f} = \sqrt{\int_a^b f^*(x)f(x)dx} = \sqrt{\int_a^b |f(x)|^2 dx}. \quad (6.16)$$

Notação de Dirac

Para entender a notação de Dirac, vamos lembrar que dada uma base do espaço vetorial, qualquer vetor pode ser escrito em termos dela e, portanto, passa a ser representado pelos coeficientes dessa decomposição (nessa particular base). Matematicamente:

$$V = \sum_{i=1}^N v_i e_i \quad \rightarrow \quad |V\rangle = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_N \end{pmatrix} \quad (6.17)$$

⁵ Estamos aqui generalizando a ideia do deslocamento da corda e permitindo que as funções possam assumir valores complexos.

onde passamos a representar o conjunto dos coeficientes da decomposição como os elementos de uma matriz coluna. Nessa representação, $|V\rangle$ é o *ket* V .

Exercício II.14: Calcule $|V\rangle + |W\rangle$ e αV . Represente os vetores da base em termos de *kets*.

Podemos ainda definir um vetor linha, tomando a matriz transposta conjugada do *ket*,

$$|V\rangle^{*T} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix}^{*T} = (u_1^* \quad u_2^* \quad \dots \quad u_N^*) \equiv \langle V|. \quad (6.18)$$

Assim, definimos uma nova representação para o vetor V , em termos de uma matriz linha cujos elementos são os complexos conjugados dos coeficientes da decomposição do vetor na base. Matematicamente,

$$\langle V| \equiv |V\rangle^\dagger = |V\rangle^{*T} = (u_1^* u_2^* \dots u_N^*), \quad (6.19)$$

que é conhecida como *bra* V . Nessa representação, o produto do *bra* V com o *ket* W é dado por:

$$\begin{aligned} \langle V|W\rangle &= (u_1^* u_2^* \dots u_N^*) \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_N \end{pmatrix} \\ &= \sum_{i=1}^N u_i^* w_i = V \cdot W, \end{aligned}$$

ou seja, $\langle V|W\rangle = \sum_{i=1}^N u_i^* w_i = V \cdot W$ são todas representações do produto interno dos vetores V e W .

Exercício II.15: Usando a notação de Dirac, prove que $\langle e_i|V\rangle = v_i$.

Considere como exemplo novamente a corda presa nas suas extremidades. Uma maneira de representar o deslocamento da corda da posição de equilíbrio é utilizando o *ket* $f = |f\rangle$. Assim,

$$|f\rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} |f_N\rangle, \quad (6.20)$$

onde

$$|f_N\rangle = \begin{pmatrix} f_N(x_1) \\ f_N(x_2) \\ \vdots \\ f_N(x_N) \end{pmatrix}. \quad (6.21)$$

Em outras palavras, o deslocamento da corda é descrito por um vetor f no espaço de Hilbert, e pode ser representada por um *ket* $|f\rangle$. Nessa representação, cada um dos elementos da matriz, $f_N(x_i)$, é uma componente do vetor f_N na base $|x_i\rangle$ e, portanto,

$$|f_N\rangle = \sum_{i=1}^N f_N(x_i) |x_i\rangle. \quad (6.22)$$

Exercício II.16: Prove o resultado apresentado.

No limite $N \rightarrow \infty$, o espaço passa a ter dimensão infinita. Como consequência, todas as somatórias passam a ser integrais. Assim, o produto interno passa a ser escrito como:

$$\langle f|g\rangle = \int f^*(x)g(x)dx. \quad (6.23)$$

Veremos nos postulados da MQ que toda informação possível de um sistema quântico estará contida em um particular *ket* $|\psi\rangle$, ou em sua projeção na base coordenada, $\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$, a função de onda.

6.3 Operadores Lineares

Um operador Ω é uma operação que leva um vetor do espaço vetorial em outro. Matematicamente,

$$\widehat{\Omega}|V\rangle = |V'\rangle, \quad \langle V|\widehat{\Omega} = \langle V'|. \quad (6.24)$$

O operador será linear se satisfizer as seguintes propriedades:

1. $\widehat{\Omega}(\alpha|V\rangle) = \alpha(\widehat{\Omega}|V\rangle)$
2. $\widehat{\Omega}(\alpha|V_i\rangle + \beta|V_j\rangle) = \alpha(\widehat{\Omega}|V_i\rangle) + \beta(\widehat{\Omega}|V_j\rangle),$

e analogamente para os *bra* $\langle V|$. Na notação de Dirac, os operadores são representados por matrizes quadradas $N \times N$.

Vale salientar que, em geral,

$$\widehat{\Omega}'(\widehat{\Omega}|V\rangle) \neq \widehat{\Omega}(\widehat{\Omega}'|V\rangle). \quad (6.25)$$

Podemos assim definir o comutador entre dois operadores como sendo:

$$[\widehat{\Omega}, \widehat{\Omega}'] = \widehat{\Omega}\widehat{\Omega}' - \widehat{\Omega}'\widehat{\Omega}. \quad (6.26)$$

Quando a ordem dos operadores não importa, o comutador zera e dizemos que os dois operadores comutam.

Exercício II.17: Mostre que o operador identidade pode ser escrito como:

$$\mathbb{I} = \sum_{i=1}^N |e_i\rangle\langle e_i| \quad (6.27)$$

Finalmente, se um operador $\widehat{\Omega}$ atuando em um *ket* $|V\rangle$ fornece o vetor $\widehat{\Omega}|V\rangle = |\widehat{\Omega}V\rangle$, então:

$$(|\widehat{\Omega}V\rangle)^\dagger = (\widehat{\Omega}|V\rangle)^\dagger \equiv \langle V|\widehat{\Omega}^\dagger, \quad (6.28)$$

onde $\widehat{\Omega}^\dagger = (\widehat{\Omega})^{*T}$ é conhecido como operador adjunto de $\widehat{\Omega}$. Em particular, quando $\widehat{\Omega} = \widehat{\Omega}^\dagger$, dizemos que o operador é autoadjunto ou hermitiano.

Operadores hermitianos na MQ serão a representação matemática dos observáveis físicos.

Autovetores e autovalores de um operador

Vimos na seção anterior que quando um operador atua em um vetor, o resultado é em geral um novo vetor. Agora para cada operador existe um conjunto de vetores, para os quais o operador atuando não leva a outro vetor. Matematicamente, com esses vetores vale que

$$\hat{\Omega}|\omega\rangle = a|\omega\rangle, \quad (6.29)$$

sendo a um escalar. Nesse caso, dizemos que o vetor $|\omega\rangle$ é um autovetor de $\hat{\Omega}$ com autovalor a .

Exercício II.18: Prove que os autovalores de um operador hermitiano são sempre reais.

Veremos, a seguir, que no processo de medida de um observável quântico duas coisas inusitadas acontecem: a primeira, o estado do sistema após o processo de medida muda para um dos autoestados do operador representando o observável físico; a segunda, os únicos valores possíveis para o resultado da medida são um dos autovalores do operador hermitiano.

O formalismo

Nesse capítulo e no próximo apresentaremos os Postulados da MQ e algumas aplicações deles na Física microscópica. Assim como na Mecânica Clássica, existem algumas versões – propostas por diferentes físicos a partir da segunda década do século XX – para a teoria (MQ matricial, de Heisenberg; MQ Ondulatória, de Schrödinger; MQ de Dirac). Optamos, inicialmente, por apresentar os postulados na versão de Dirac, e a seguir discutiremos a versão de Schrödinger.

Dois são os principais objetivos da discussão proposta. Primeiramente, buscaremos interpretar o conteúdo físico do objeto central da MQ, a função densidade de probabilidade na versão de Schrödinger, que fornece o máximo de informação disponível em um sistema quântico.

Além disso, abordaremos com exemplos a discussão do processo de medida. Ao longo do texto, proporemos um mapeamento entre a Mecânica Clássica e a Mecânica Quântica, não com o objetivo de buscar analogias clássicas, no entendimento de fenômenos quânticos e, sim, de entender de que maneira as visões clássica e quântica dos fenômenos da natureza diferem e em quais situações são similares.

Dessa forma, buscaremos desenvolver no estudante uma nova intuição física sobre a natureza, agora contextualizada para fenômenos microscópicos.

7.1 Os postulados

I) Descrição de um sistema físico: o ket $|\psi(t)\rangle$

Primeiro Postulado: A todo estado de um sistema físico quântico está associado um vetor de estado, $|\psi(t)\rangle$, pertencente a um espaço de Hilbert. Este vetor caracteriza completamente o sistema.

Esse postulado substitui o postulado “zero” da Mecânica Clássica, que considera que toda a informação do sistema clássico está contida no vetor posição, $\vec{r}(t)$. De tão intuitivo que é esse postulado na Mecânica Clássica, na maioria das discussões ele sequer é citado. Quanticamente, porém, a natureza se comporta de maneira completamente diferente, e não faz mais sentido perguntar a posição exata de uma partícula. Agora, a informação máxima disponível sobre o sistema está contida no vetor $|\psi(t)\rangle$. Os próximos postulados irão discutir qual é essa informação máxima disponível.

II) Quantidades físicas observáveis: os operadores hermitianos

Segundo Postulado: Cada quantidade física mensurável é descrita na MQ por um operador hermitiano atuando no espaço de Hilbert do sistema

Novamente, no contexto clássico, a descrição do observável é intuitiva, sendo ele matematicamente descrito por uma função (escalar ou vetorial) que depende da posição e da velocidade da partícula. Na teoria quântica, por outro lado, observáveis são representados por operadores hermitianos no espaço de Hilbert do sistema.

III) Processo de Medida

O processo de medida na MQ envolve três etapas: os resultados possíveis da medida, a probabilidade de obtermos esses resultados e o efeito do processo de medida no estado inicial. Os próximos três postulados apresentam essas etapas.

Terceiro Postulado: Os únicos resultados possíveis para a medição de uma quantidade física, caracterizada pelo operador \hat{A} são os seus autovalores, a_n .

Quarto Postulado: Quando a quantidade física associada ao operador é medida no sistema preparado em um estado $|\psi\rangle$, a probabilidade de se obter um específico autovalor a_i é dada por:

$$p_{\psi}(a_i) = |\langle a_i | \psi \rangle|^2, \quad (7.1)$$

onde $\langle a_i |$ é o autovetor associado ao auto valor a_i .

Finalizando, o processo de medida interfere no estado original, modificando-o conforme o postulado a seguir:

Quinto Postulado: Se a medida de uma quantidade física \hat{A} em um sistema inicialmente no estado $|\psi\rangle$ fornece o resultado a_i , então o estado do sistema imediatamente após a medida muda instantaneamente para o respectivo autoestado $|a_i\rangle$.

Esses três postulados mostram novamente como a teoria quântica difere da teoria clássica. Para entendê-los considere o estudo de uma partícula livre. Classicamente, ao se preparar o sistema com uma única partícula, com posição inicial representada em certo sistema de coordenadas como sendo $x = 0$ e velocidade inicial nula, a medida da sua posição em qualquer instante posterior fornecerá sempre o valor

$x = 0$. Se esse processo for repetido N vezes, em todos eles o resultado será o mesmo. Além disso, após a medida, a partícula continuará na mesma posição.

Quanticamente, o comportamento da natureza é completamente diferente. Considere assim que em um aparato experimental ideal, uma coleção de N partículas livres idênticas é preparada (com as mesmas condições iniciais descritas) e com cada uma delas é realizada a medida da posição. Agora não é mais verdade que para todas as medidas o valor $x = 0$ será obtido. O máximo que pode ser dito a respeito do sistema é que existe uma grande probabilidade de encontrar esse valor no processo de medida, porém haverá uma função distribuição de probabilidades relacionada à medida da posição dessas partículas, sendo possível, inclusive, encontrar uma pequena parcela delas a grandes distâncias da origem.

Além disso, o processo de medida em geral perturba o sistema quântico, fazendo com que seu estado se altere instantaneamente após a medida. No próximo capítulo voltaremos a essa discussão, de maneira mais quantitativa.

IV) Evolução temporal: A Equação de Schrödinger

Sexto postulado: A evolução temporal do vetor de estado $|\psi(t)\rangle$ é governada pela Eq. de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle, \quad (7.2)$$

onde $\hat{H}(t)$ é o operador hamiltoniana, associado com a energia do sistema.

Essa equação é o equivalente quântico da segunda lei de Newton, e fornece a informação de como o vetor de estado varia ao longo do tempo.

A Tabela II.1 faz um mapeamento entre cada um dos postulados descritos e o postulado equivalente na Mecânica Clássica.

Tabela II.1: Postulados da Mecânica Clássica e Quântica

Processo	Mecânica Clássica	Mecânica Quântica
Descrição do estado físico	posição ($\vec{r}(t)$) = vetor em \mathfrak{R}^3 : determina a posição exata em t	$ket (\psi(t)\rangle)$ = vetor no espaço de Hilbert: associado com a probabilidade de encontrar a partícula em t
Quantidades físicas observáveis	funções (escalares ou vetoriais em \mathfrak{R}^3) de $\vec{r}(t)$ e suas derivadas	operadores lineares hermitianos no espaço de Hilbert
Medida de quantidades físicas	Qualquer valor é possível (respeitando as condições iniciais)	Os autovalores do operador são os únicos valores possíveis
	O resultado é único (respeitando as condições iniciais), <i>i.e.</i> : $p = 1$	Dado o estado $ \psi(t)\rangle$, a probabilidade de obter o autovalor a é: $p_\psi(a_i) = \langle a_i \psi \rangle ^2$
Efeito da medida	A medida não altera o estado inicial	Após a medida, o estado muda, instantaneamente, para um dos autoestados
Evolução temporal do estado	Segunda lei de Newton $\vec{R} = \frac{d\vec{p}}{dt}$	Eq. Schrödinger $i\hbar \frac{d}{dt} \psi(t)\rangle = \hat{H}(t) \psi(t)\rangle$

7.2 A Equação de Schrödinger na representação coordenada

Vimos, no capítulo anterior, que qualquer função de uma variável (por exemplo, o deslocamento de uma corda, y ,

como função da posição x , $y = f(x)^6$, pode ser representada por um vetor $|f\rangle$ em um espaço de dimensão infinita. Assim,

$$|f\rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} |f_N\rangle, \quad (7.3)$$

onde

$$|f_N\rangle = \begin{pmatrix} f_N(x_1) \\ f_N(x_2) \\ \vdots \\ f_N(x_N) \end{pmatrix}, \quad (7.4)$$

e $f_N(x_i)$ é a projeção do vetor $|f_N\rangle$ na direção $|x_i\rangle$, ou seja, $\langle x_i | f_N \rangle$. Nessa situação, o vetor da base coordenada x na direção i é dado por:

$$|x_i\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (7.5)$$

portanto, com elemento não nulo somente na i -ésima linha.

No limite onde N tende a infinito, temos a base coordenada $\{|x\rangle\}$, onde cada vetor tem um elemento não nulo na linha correspondendo à direção x . Além disso, o produto escalar $\langle x | f \rangle \equiv f(x)$ projeta o vetor $|f\rangle$ na direção x . Em outras palavras, a função $f(x)$ fornece as componentes do vetor $|f\rangle$ em cada uma das infinitas direções da base coordenada $\{|x\rangle\}$. Vale salientar que resolver um sistema quântico significa encontrar o vetor $|\psi\rangle$ ou, de maneira mais simples, a função que fornece suas componentes na base coordenada, $\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$, a *função de onda*.

Para obter a equação que rege a evolução temporal da função de onda, basta projetar a equação de Schrödinger na base coordenada. Matematicamente,

$$\langle x | \times \left(i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle \right), \quad (7.6)$$

6 Por simplicidade, optamos nessa seção por trabalhar com sistemas em uma dimensão espacial apenas.

ou seja,

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle x | \psi(t) \rangle = \hat{H}(x, t) \langle x | \psi(t) \rangle, \quad (7.7)$$

que pode ser reescrito como

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \hat{H}(x, t) \psi(x, t), \quad (7.8)$$

onde agora $\hat{H}(x, t)$ é a representação do operador $\hat{H}(t)$ na base coordenada. Portanto, se escolhermos trabalhar na representação coordenada, precisamos resolver a equação diferencial apresentada para obter a função de onda do sistema em questão. No próximo capítulo, resolveremos alguns problemas nessa versão da MQ.

7.3 A densidade de probabilidade

Para entender o significado da função de onda, iremos utilizar a interpretação estatística de Born, na qual dada a função de onda $\psi(x, t)$, $|\psi(x, t)|^2 dx$ fornece a probabilidade de encontrar a partícula dentro do intervalo x e $x + dx$ no tempo t . Uma vez que, existindo a partícula, ela deve estar em algum ponto do espaço, então segue que

$$1 = \int dx \psi^*(x, t) \psi(x, t). \quad (7.9)$$

Ao garantir que a função de onda satisfaça a equação apresentada, estamos normalizando a função de onda.



Capítulo 8

Aplicações

Nesse capítulo iremos discutir algumas aplicações da MQ, propostas na literatura básica sobre o assunto. Boa parte da discussão matemática será omitida, mais especificamente não serão demonstradas as resoluções da equação de Schrödinger para cada potencial. Ao aluno interessado em tais demonstrações sugerimos alguns livros (DAS, 2012; GRIFFITHS, 1994). Assim, as funções de onda serão apresentadas ao estudante e sua tarefa consistirá em checar se elas satisfazem à equação de Schrödinger. A seguir a discussão será encaminhada para a interpretação física dos resultados.

8.1 A partícula livre

Tanto clássica quanto quanticamente, iremos “definir” partícula como uma quantidade “localizada” de matéria, , sujeita a algum tipo de interação.

Veremos a seguir, nos formalismos clássico e quântico, qual é o comportamento esperado para essa partícula quando sobre ela não atua nenhuma força.

Interpretação Clássica

Considere por simplicidade, que a partícula se encontra em repouso na origem do sistema de coordenadas unidimensional descrito pela coordenada x . Nesse caso, $x(t = 0) = 0$ e $\dot{x}(t = 0) = 0$, e temos que resolver a seguinte equação diferencial:

$$0 = \frac{dp(t)}{dt} = m \frac{d^2x(t)}{dt^2}, \quad (8.1)$$

que fornece como solução $x(t) = x_0 + vt$. Aplicando as condições iniciais ao problema, obtemos que $x(t) = 0$. Ou seja, se a partícula se encontra parada na origem no instante inicial e nenhuma força atua sobre ela, podemos voltar daqui a vinte anos e com certeza a partícula continuará na mesma posição (desde que continue a não atuar nenhuma força sobre ela). Esse comportamento se manifestará em um processo de medida da posição da partícula em qualquer instante $t > 0$, e também em uma coleção de N partículas idênticas preparadas da mesma forma.

Interpretação quântica

Para uma partícula livre em uma dimensão, a hamiltoniana nada mais é do que a sua energia cinética,

$$\hat{H} = \frac{m\hat{v}^2}{2} = \frac{\hat{p}^2}{2m}, \quad (8.2)$$

onde \hat{v} e \hat{p} representam o operador velocidade e momento linear da partícula, respectivamente. Pode-se demonstrar que na base coordenada o operador momento linear é escrito como (DAS, 2012):

$$\hat{p}(x) = -i\hbar \frac{d}{dx}. \quad (8.3)$$

Assim, temos a seguinte equação diferencial para resolver:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2}. \quad (8.4)$$

Exercício II.19: Prove, por substituição direta, que uma solução da equação apresentada é dada pelo pacote gaussiano, ou seja:

$$\psi(x, t) = \frac{N'}{\sqrt{a^2 + \frac{i\hbar t}{m}}} e^{-\frac{x^2}{2(a^2 + \frac{i\hbar t}{m})}}. \quad (8.5)$$

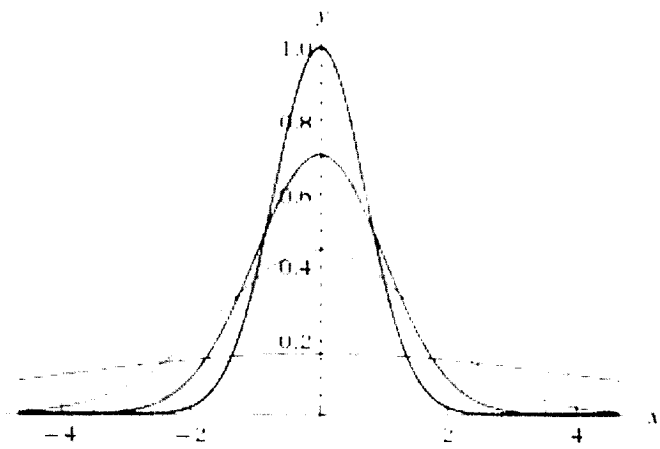
O valor de a é determinado pelas condições iniciais do problema, e N' é fixado de forma a garantir que a norma da função de onda seja unitária (normalização da função de onda). Para podermos interpretar o significado físico desse resultado, precisamos calcular a densidade de probabilidade, dada por $\psi^*\psi$.

Exercício II.20: Prove que a densidade de probabilidade para a função de onda apresentada é dada por:

$$\psi^*\psi = \frac{|N'|^2}{a\sqrt{a^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^2}}} e^{-\frac{x^2}{a^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^2}}}. \quad (8.6)$$

A Figura 8.1 ilustra o comportamento da função $\psi^*\psi$. Inicialmente, em $t = 0$ (com pico mais alto), existe uma grande probabilidade de encontrar a partícula nas proximidades da posição $x = 0$. Conforme o tempo passa, essa probabilidade vai se espalhando ao longo do eixo x . Embora o local mais provável de encontrar a partícula ainda seja em torno da origem, a probabilidade de encontrar a partícula em posições mais distantes da origem deixa de ser desprezível. Para entender porque esse fenômeno (alargamento do pacote de onda) acontece, precisamos definir alguns novos conceitos associados com a teoria de probabilidades.

Fig.8.1: Evolução do pacote gaussiano ($a = 1 = \hbar/m$)



Primeiramente, uma vez que a cada repetição do processo de medida do observável no estado, um resultado diferente em princípio pode aparecer, e que existem alguns resultados que são mais prováveis que outros, pode-se definir as médias dos observáveis. Para isso, basta utilizar a teoria de probabilidades. Considerando que a probabilidade de encontrar a partícula entre x e $x + dx$ é dada por $\psi^* \psi dx$, então, por exemplo, o valor médio do operador posição no estado $|\psi(t)\rangle$ é dado por:

$$\langle x \rangle_{\psi}(t) = \int x \psi^*(x, t) \psi(x, t) dx. \quad (8.7)$$

Podemos ainda calcular a média do momento linear da partícula livre. Nesse caso, temos:

$$\langle p \rangle_{\psi}(t) = \int \psi^*(x, t) \left(-i \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x, t) dx. \quad (8.8)$$

Utilizando essas duas fórmulas e a função de onda (8.5), pode-se demonstrar que $\langle x \rangle_{\psi}(t) = 0$ e $\langle p \rangle_{\psi}(t) = 0$. Vemos assim que na média o comportamento clássico é recuperado. Em outras palavras, $x_{\text{clas}} = 0$ passa a se manifestar quanticamente como $\langle x \rangle_{\psi}(t) = 0$, e analogamente para o momento linear. Na teoria clássica, a não existência de

forças de interação implica necessariamente em encontrar a partícula sempre na mesma posição (para velocidade nula). Quanticamente, o comportamento da partícula não é mais determinístico, e repetidas medidas da posição da partícula implicam em diferentes resultados. Porém, os resultados encontrados são tais que o valor médio da posição é nulo.

Exercício II.21: Mostre que $\langle x \rangle_{\psi}(t) = 0$ e $\langle p \rangle_{\psi}(t) = 0$.

Esse resultado sozinho não explica o alargamento do pacote gaussiano com o passar do tempo, conforme foi observado na Figura 8.1. Para entender esse comportamento, vamos utilizar um outro conceito da teoria de probabilidades, a variância, definida como

$$\Delta \mathcal{O} = \sqrt{\langle \mathcal{O}^2 \rangle - \langle \mathcal{O} \rangle^2}, \quad (8.9)$$

onde \mathcal{O} representa um observável qualquer.

Exercício II.22: Usando a teoria de probabilidades, interprete o significado da variância.

Pode-se demonstrar que para a função de onda da partícula livre,

$$\Delta x = \frac{a(t)}{\sqrt{2}}, \quad \Delta p = \frac{\hbar}{\sqrt{2}a}, \quad (8.10)$$

onde $a^2(t) = a^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^2}$. Portanto, embora a média da posição bem como a média do momento linear sejam nulos, existe uma incerteza na posição, inicialmente dada por $\Delta x(t=0)$ que aumenta conforme o tempo passa. Já a incerteza no momento não se altera, o que parece consistente com a noção clássica de conservação de energia. Pode-se ainda demonstrar que (PEREZ, 1995)

$$(\Delta x(t))^2 \sim (\Delta x(t=0))^2 + \left(\frac{\Delta p}{m}t\right)^2. \quad (8.11)$$

Assim, uma incerteza inicial no momento Δp equivale a uma incerteza inicial na velocidade de $\frac{\Delta p}{m}$, o que em um instante posterior, t , produz uma incerteza adicional na posição de $\frac{\Delta p}{m} t$ (PEREZ, 1995).

Além disso,

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar a(t)}{2} \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (8.12)$$

ou seja, o produto das incertezas, $\Delta x \Delta p$, é sempre maior que $\frac{\hbar}{2}$, para qualquer tempo positivo não nulo, o que é uma manifestação do Princípio da Incerteza.

Exercício II.23: Prove os resultados (8.10).

Finalmente, se a partícula livre tiver velocidade inicial não nula, então classicamente vale que

$$\frac{dx(t)}{dt} = \frac{p(t)}{m}. \quad (8.13)$$

Quanticamente, a função de onda correspondente é dada por:

$$\psi(x, t) = \frac{N}{\sqrt{1 + \frac{i\hbar t}{2ma^2}}} e^{\left(\frac{-\frac{x^2}{4a^2} + ikx - \frac{i\hbar t}{m}}{1 + \frac{i\hbar t}{2ma^2}} \right)}. \quad (8.14)$$

Exercício II.24: Calcule a densidade de probabilidade associada com a função de onda apresentada anteriormente e esboce o seu gráfico para diferentes valores de tempo. O que você observa? Explique o resultado encontrado.

Pode-se demonstrar que, nesse caso, além do fenômeno do alargamento do pacote de onda, vale que (CARDOSO, 2010):

$$\frac{d\langle x \rangle(t)}{dt} = \frac{\langle p \rangle(t=0)}{m} = \frac{\langle p \rangle(t)}{m} \quad (8.15)$$

Novamente observamos que o resultado clássico se manifesta quanticamente para os valores esperados dos observáveis. A Tabela II.2 ilustra os comportamentos esperados na Mecânica Clássica e Quântica para a partícula livre.

Tabela II.2: Comportamento da partícula livre em uma dimensão nos formalismos clássico e quântico.

A Partícula Livre em uma dimensão		
Processo	Mecânica Clássica	Mecânica Quântica
Estado físico	Posição $x(t)$	função de onda $\psi(x, t)$
Condições Iniciais	$x(t = 0) = 0 = v(t = 0)$	$\psi(x, t = 0) = \psi_0(x)$
Evolução temporal do estado	Segunda Lei de Newton $\frac{d^2x(t)}{dt^2} = 0$	Eq. Schrödinger $i\hbar \frac{d\psi(x,t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x,t)}{dx^2}$
Posição e velocidade no tempo t	$x(t) = 0$ $v(t) = 0$	$\psi(x, t) = \frac{N}{\sqrt{a^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{m}}} e^{-\frac{i\hbar x^2}{2(a^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{m})}}$ $\langle x \rangle(t) = 0, \langle v \rangle(t) = 0$
Comportamento no tempo t	sempre no mesmo lugar	alargamento do pacote de onda $\Delta x = \frac{a(t)}{\sqrt{2}}, \Delta p = \frac{\hbar}{\sqrt{2}a}$

8.2 O oscilador harmônico

Novamente, tanto classica quanto quanticamente, definimos oscilador harmônico como uma partícula de massa m sujeita a uma força do tipo mola:

$$F(x) = -kx, \quad (8.16)$$

ou, em termos do respectivo potencial,

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2. \quad (8.17)$$

Exercício 11.25: Qual a importância do oscilador harmônico no estudo de forças mais realistas, em outras palavras, como uma força pode ser aproximada por uma força do tipo mola? DICA: Veja discussão apresentada na seção 2.3 da Ref. (GRIFFITHS, 1994).

Interpretação clássica

Para encontrar a solução clássica, utilizamos por exemplo, a segunda lei de Newton:

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2} = -\frac{k}{m}x(t). \quad (8.18)$$

Exercício 11.26: Prove (por substituição direta) que a solução (geral) desse problema é dada por:

$$x(t) = A\sin(\omega t) + B\cos(\omega t), \quad (8.19)$$

onde $\omega^2 = \frac{k}{m}$.

Os valores de A e B são determinados pelas condições iniciais do problema. Por exemplo, se a partícula é solta na posição $x(t=0) = a$, então a constante B é determinada como sendo:

$$x(t=0) = a = A\sin(0) + B\cos(0) = B, \quad (8.20)$$

Além disso, a sua velocidade é dada por:

$$\frac{dx(t)}{dt} = \omega(A\cos(\omega t) - a\sin(\omega t)), \quad (8.21)$$

e aplicando a condição inicial, obtemos a segunda constante como sendo:

$$v(t=0) = \omega A = 0, \quad (8.22)$$

chegando à solução do problema, dada por:

$$x(t) = a \cos(\omega t). \quad (8.23)$$

Temos portanto um movimento oscilatório em torno da origem com período $T = \frac{2\pi}{\omega}$ e amplitude a .

Interpretação quântica

Quanticamente precisamos resolver a seguinte equação:

$$\frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \psi(x, t), \quad (8.24)$$

onde utilizamos o fato de que a hamiltoniana do sistema é dada pela soma da energia cinética com a energia potencial. Para resolver essa equação, primeiro observamos que a solução para a função de onda pode ser escrita como:

$$\psi(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E t} u_E(x), \quad (8.25)$$

onde E nesse ponto é um número real a ser determinado e $u_E(x)$ satisfaz:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) u_E(x) = E u_E(x), \quad (8.26)$$

ou seja:

$$\hat{H}(x) u_E(x) = E u_E(x). \quad (8.27)$$

Vemos assim que, na linguagem de espaços vetoriais, a equação anterior nada mais é do que a equação de autovalores e autovetores do operador hamiltoniana, sendo $u_E(x)$ os autovetores de $\hat{H}(x)$, e E os autovalores, ou seja, as energias que a partícula sujeita ao oscilador harmônico pode ter, os possíveis resultados de medidas do operador hamiltoniana. Rearranjando a expressão apresentada, chegamos a:

$$\frac{d^2 u_E(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) u_E(x) = 0. \quad (8.28)$$

Seguindo a metodologia do curso, não vamos demonstrar as soluções da equação. Para quem deseja entender esse cálculo sugerimos as Refs. (DAS, 2012; GRIFFITHS, 1994). A solução geral para $u_E(x) = 0$ é dada por:

$$u_{E,n}(x) = A_n H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}, \quad (8.29)$$

onde A_n é uma constante de normalização e $H_n(x)$ são os polinômios de Hermite:

$$\begin{aligned} H_0(x) &= 1 \\ H_1(x) &= 2x \\ H_2(x) &= 4x^2 - 2, n = 0,1,2, \dots \end{aligned} \quad (8.30)$$

e assim por diante. Substituindo esse resultado em (8.25) temos que a função de onda do oscilador harmônico é dada por:

$$\psi_n(x, t) = A_n H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 - \frac{i}{\hbar} E_n t}, \quad (8.31)$$

com

$$E_n = \hbar\omega_n \left(n + \frac{1}{2} \right), n = 0,1,2, \dots \quad (8.32)$$

Exercício II.27: Encontre os três primeiros estados do oscilador harmônico e por substituição direta, mostre que eles satisfazem a Eq. Schrödinger.

Comparação entre os comportamentos clássico e quântico

Vimos que o resultado clássico pode ser escrito como

$$x(t) = A \sin(\omega t) + B \cos(\omega t) = C \sin(\omega t + \phi). \quad (8.33)$$

Exercício II.28: Mostre que, em termos das condições iniciais do problema, podemos reescrever a solução como:

$$x(t) = x_0 \cos(\omega t) + \frac{p_0}{m\omega} \sin(\omega t) \quad (8.34)$$

Nesse caso, a energia do oscilador harmônico é dada por:

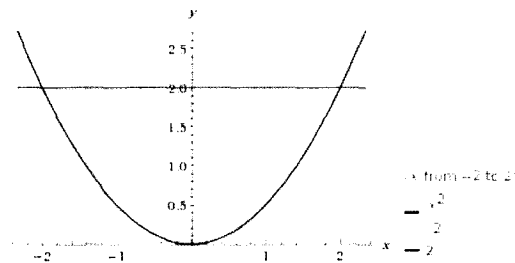
$$E = \frac{p^2(t)}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x(t)^2 = \frac{1}{2} m\omega^2 C^2, \quad (8.35)$$

ou seja, a energia total do sistema é uma constante proporcional ao quadrado da amplitude do movimento.

Exercício II.29: Utilizando a conservação de energia mecânica, interprete o resultado apresentado.

A energia total do sistema clássico é portanto um função contínua, podendo inclusive (dependendo das condições iniciais) assumir o valor zero. Graficamente, temos a Figura 8.2 e a partícula está confinada a oscilar entre $-C$ e $+C$.

Fig.8.2: Energia potencial $V(x) = kx^2/2$ e energia total do sistema clássico, com $m\omega^2 = 1$ e $C = 2$.



Quanticamente, o comportamento da partícula é muito diferente. Em primeiro lugar, as energias assumem valores discretos, dados por E_n ,

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2},$$

$$E_1 = \frac{3\hbar\omega}{2}, \quad (8.36)$$

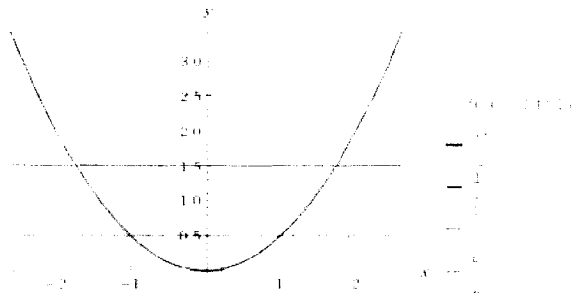
$$E_2 = \frac{5\hbar\omega}{2},$$

assim por diante. O menor valor de energia que a partícula pode carregar é $\frac{\hbar\omega}{2}$, no estado “fundamental” $\psi_0(x, t)$. Ao receber energia exatamente na quantidade $\hbar\omega$ ela “salta” para o primeiro estado excitado e assim por diante. Finalmente, pode-se demonstrar que (CARDOSO, 2010):

$$\langle x \rangle_{\psi_n}(t) = \langle x \rangle_{\psi_n}(0) \cos(\omega t) + \frac{\langle p \rangle_{\psi_n}(0)}{m\omega} \sin(\omega t), \quad (8.37)$$

que pode ser comparado com o resultado clássico, equação (8.34). Graficamente, temos o comportamento dado na Figura 8.3.

Fig.8.3: Energia potencial $V(x) = kx^2/2$ e níveis de energia do sistema quântico, com $m\omega^2 = 1 = \hbar\omega$.



A Tabela II.3 apresenta um resumo do que vimos até agora.

Tabela II.3: Resumo do comportamento da partícula livre e do oscilador harmônico em uma dimensão nos formalismos clássico e quântico.

Processo	Mec. Clássica	Mec. Quântica
Partícula livre	$x(t) = x_0 + v_0 t$ $v(t) = v_0$	$\langle x \rangle(t) = \langle x \rangle(0) + \langle v \rangle(0)t$ $\langle v \rangle(t) = \langle v \rangle(0)$
Oscilador Harmônico	$x(t) = x_0 \cos(\omega t)$ $+ \frac{p_0}{m\omega} \sin(\omega t)$	$\langle x \rangle(t) = \langle x \rangle(0) \cos(\omega t)$ $+ \frac{\langle p \rangle(0)}{m\omega} \sin(\omega t)$

8.3 O átomo de hidrogênio

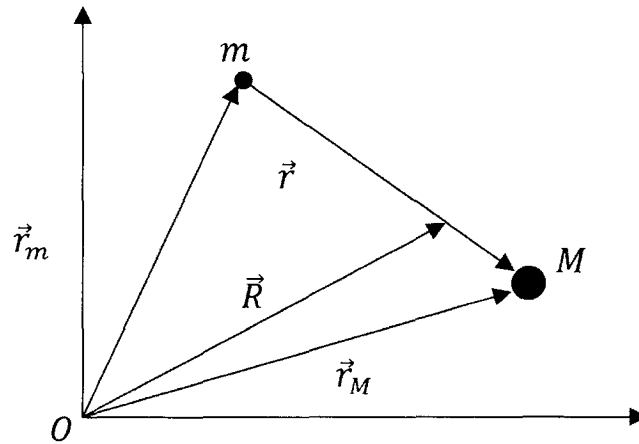
Estudamos até aqui duas situações idealizadas, em particular ao se desprezar duas dimensões espaciais. Em ambos os casos, essa idealização não comprometeu a discussão dos aspectos físicos, uma vez que o tipo de movimento acontecia em uma única dimensão. Vamos agora considerar uma situação mais geral, onde dois corpos trocam uma força atrativa proporcional ao quadrado do inverso da distância entre os dois centros de massa.

Considere, por exemplo, um sistema constituído de dois corpos de massas M e m e cargas Q e q , respectivamente, conforme a Figura 8.4.

Para estudar o movimento dos dois corpos (tanto clássica quanto quanticamente) usamos um sistema de referências e dois vetores para localizar os corpos, \vec{r}_M e \vec{r}_m . Podemos ainda definir dois novos vetores, $\vec{r} = \vec{r}_M - \vec{r}_m$ e $\vec{R} = \frac{m\vec{r}_m + M\vec{r}_M}{m+M}$, representando a diferença entre \vec{r}_m e \vec{r}_M , e a posição do centro de massa do sistema, respectivamente. Em termos desses dois vetores, podemos escrever:

$$\vec{r}_m = \vec{R} - \frac{M}{M+m} \vec{r}, \quad \vec{r}_M = \vec{R} + \frac{M}{M+m} \vec{r}. \quad (8.38)$$

Fig. 8.4: Sistema constituído por dois corpos de massas m e M , localizados, respectivamente, pelos vetores \vec{r}_m e \vec{r}_M . Na figura está representado também do vetor \vec{R} que localiza o centro de massa do sistema.



Finalmente, faremos a hipótese que M é muito maior que m .

Interpretação clássica

Na análise via Mecânica Clássica, como só agem forças internas ao sistema constituído pelas massas M e m , o movimento do centro de massa é retilíneo e uniforme e, por simplicidade, escolhemos um referencial inercial no qual ele está parado na origem. Nesse caso, na aproximação $M \gg m$ vale que

$$\vec{R} = \frac{m\vec{r}_m + M\vec{r}_M}{M + m} \sim \vec{r}_M = 0, \quad (8.39)$$

$$\vec{r} = -\vec{r}_m. \quad (8.40)$$

Vemos, assim, que o problema se reduz ao problema de um único corpo de massa m sujeito a uma força radial apontando para a origem do sistema de coordenadas. A solução dele é vista em cursos avançados de Mecânica Clássica (SYMON, 1971) e dependendo das condições iniciais do problema o corpo de massa m pode orbitar ao redor

do corpo de massa M . Esse tipo de análise é aplicado, por exemplo, nos estudos de planetas sujeitos à ação gravitacional. Ingenuamente, poderíamos também aplicar essa análise considerando dois corpos eletricamente carregados e trocando uma força de Coulomb. Nesse caso, porém, existe um grave problema, pois segundo as equações de Maxwell, quando partículas carregadas são aceleradas (aqui a aceleração centrípeta do elétron no movimento orbital), elas perdem energia, diminuindo o raio médio da órbita, e eventualmente colapsando para a origem, inviabilizando, assim, o modelo atômico clássico para o átomo de hidrogênio.

Interpretação Quântica

Para a interpretação quântica, vamos considerar que o átomo de hidrogênio consiste de um próton de carga $+e$ parado na origem do sistema de coordenadas, e um elétron de carga $-e$ ligado ao próton por um potencial do tipo Coulomb,

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}, \quad r = |\vec{r}| \quad (8.41)$$

Para achar a solução na interpretação quântica, precisamos utilizar a equação de Schrödinger em três dimensões. Temos que

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}(\mathbf{x}) \psi(\vec{r}, t), \quad (8.42)$$

onde novamente $\hat{H}(\mathbf{x})$ é o operador hamiltoniana do sistema, classicamente dado por:

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}), \quad (8.43)$$

com $\vec{p} \equiv (p_x, p_y, p_z)$ representando o momento linear do elétron, que é levado ao operador $(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial z})$ na construção da teoria quântica. Portanto, a equação de Schrödinger em três dimensões é escrita em coordenadas cartesianas como:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V \right] \psi(\vec{r}, t) \quad (8.44)$$

Uma vez que a dependência no potencial em $\vec{r} = (x, y, z)$ está toda escrita em termos do seu módulo, é de se esperar que a melhor representação de \vec{r} seja em termos de coordenadas esféricas, isto é, $\vec{r} = (r, \theta, \phi)$. Sem entrar nos detalhes da conta, pode-se demonstrar que em coordenadas esféricas temos (DAS, 2013):

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right). \quad (8.45)$$

Substituindo esse resultado na equação de Schrödinger, obtemos:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \right] \psi - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \psi. \quad (8.46)$$

Essa é uma equação diferencial envolvendo quatro variáveis difícil de resolver. Existe uma forma exata da solução e qualquer livro texto de MQ apresenta a técnica para obtê-la (DAS, 2012; GRIFFITHS, 1994). Em particular, o método de resolução consiste em procurar uma solução do tipo:

$$\psi(r, \theta, \phi, t) = T(t)u(r, \theta, \phi) = T(t)R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi), \quad (8.47)$$

conhecido como Método de Separação de Variáveis. A componente temporal tem a forma:

$$T(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}. \quad (8.48)$$

Já a componente espacial satisfaz:

$$E_n u = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right]$$

$$+ \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \Big] u - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} u. \quad (8.49)$$

A solução da parte espacial é do tipo u_{nlm} , onde os índices n , l e m – que indexam a função de onda – são os números quânticos associados ao átomo de hidrogênio:

$$n = 1, 2, 3, 4, \dots; \text{ número quântico principal} \quad (8.50)$$

$l = 0, 1, 2, 3, \dots, n - 1$; número quântico de momento angular orbital

$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l$; número quântico magnético azimutal

Nesse caso, n é o número quântico principal e indexa os níveis de energia do átomo de hidrogênio. Já os índices l e m estão associados ao momento angular orbital do elétron. Mais a frente discutiremos melhor esses conceitos. Finalmente, a forma explícita da função u_{nlm} é dada por:

$$u_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi), \quad (8.51)$$

onde a componente radial $R_{nl}(r)$ é escrita como:

$$R_{nl}(r) = \frac{1}{r} \rho^{l+1} e^{-\rho} v(\rho), \quad (8.52)$$

e definimos uma nova variável ρ como sendo:

$$\rho = \frac{\sqrt{-2mE_n}}{\hbar} r, E_n < 0. \quad (8.53)$$

Além disso, $v(\rho)$ é um polinômio de grau $j_{max} = n - l - 1$ em ρ , com coeficientes determinados por:

$$a_{j+1} = \frac{2(j+l+1-n)}{(j+1)(j+2l+2)} a_j. \quad (8.54)$$

Já a dependência angular da função de onda é dada em termos dos harmônicos esféricos $Y_l^m(\theta, \phi)$,

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \epsilon \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}} e^{im\phi} P_l^m(\cos\theta), \quad (8.55)$$

onde $\epsilon = (-1)^m$ para $m \geq 0$ e $\epsilon = 1$ para $m \leq 0$ e P_l^m e são os polinômios de Legendre.

Finalmente, os níveis de energia do átomo de hidrogênio são dados por:

$$E_n = -\frac{E_1}{n^2}, \quad E_1 = -\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 = -13,6\text{eV}. \quad (8.56)$$

A seguir, vamos analisar algumas possibilidades de estados para o átomo.

(a) O estado fundamental

Em primeiro lugar vamos entender melhor a equação (8.56). Para isso, vamos resgatar o modelo atômico de Bohr e relembrar que a energia total do elétron orbitando ao redor do núcleo é a soma da energia cinética com a potencial,

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (8.57)$$

Agora, classicamente o elétron é mantido na órbita ao redor do núcleo por meio de uma resultante centrípeta, ou seja,

$$R_c = \frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}, \quad (8.58)$$

de onde escrevemos:

$$mv^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (8.59)$$

e, portanto, a energia total do elétron é dada por:

$$E = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}. \quad (8.60)$$

Finalmente, para eliminar r da expressão anterior, utilizamos a hipótese de Bohr (existência de onda estacionária),

$$2\pi r = n\lambda = n \frac{h}{mv}, \quad (8.61)$$

chegando ao valor de E_n dado na expressão (8.56).

Em particular, o menor valor de energia possível para o sistema é dada por $E_1 = -13,6\text{eV}$. Esse valor é conhecido como energia de ligação e em módulo corresponde à energia necessária para ionizar o átomo, ou seja, para separar o elétron do próton.

Considerando o estado fundamental, temos $n = 1$ e portanto $l = 0 = m$. A função de onda espacial é dada por:

$$u_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{e^{-r/a}}{a^{3/2}}, \quad (8.62)$$

onde a é o raio de Bohr,

$$a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0,529 \times 10^{-10}\text{m}, \quad (8.63)$$

e corresponde exatamente ao valor proposto por Bohr para o raio da órbita no estado fundamental.

Exercício II.30 Prove que a função u_{100} satisfaz a equação (8.49).

Podemos ainda calcular o valor esperado e o valor mais provável para o raio da órbita nesse caso. Temos portanto que o valor esperado é dado por:

$$\begin{aligned} \langle r \rangle_{u_{100}} &= \int r |u_{100} T_1(t)|^2 dv = \int r \frac{e^{-2r/a}}{\pi a^3} r^2 \sin\theta d\theta d\phi dr \\ &= \frac{4\pi}{\pi a^3} \int_0^\infty r^3 e^{-2r/a} dr = \int_0^\infty r \left(\frac{4r^2}{a^3} e^{-2r/a} \right) dr = \frac{3}{2} a. \end{aligned} \quad (8.64)$$

Para calcular o valor mais provável basta identificar na última linha da equação apresentada a probabilidade de encontrar o elétron entre r e $r + dr$ como sendo:

$$P_{100}(r) dr = \left(\frac{4r^2}{a^3} e^{-2r/a} \right) dr. \quad (8.65)$$

Tomando a derivada de $P_{100}(r)$ e igualando a zero chegamos ao valor mais provável para o raio como sendo igual

ao raio de Bohr, a . Ou seja, o valor mais provável de se obter para uma medida do raio atômico com o sistema preparado no estado fundamental é o raio de Bohr! A Figura 8.5 apresenta os gráficos de u_{100} e P_{100} como função de r . Para finalizar, a função de onda do estado fundamental não apresenta dependência angular. Discutiremos melhor esse comportamento a seguir, também considerando alguns estados excitados do átomo de hidrogênio.

(b) Os estados u_{n00} e o orbital s

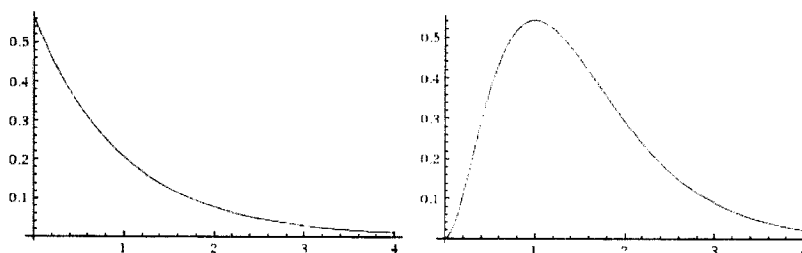
Note que a função de onda do estado fundamental apresentada na seção anterior não tem dependência angular, possuindo uma simetria esférica. Essa será uma propriedade de todas as funções de onda com $l = 0$. Fazendo um paralelo com o que se estuda em Química esses estados são $1s, 2s, 3s$ etc. tendo as seguintes funções de onda:

$$u_{200}(r) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{r}{a}\right) e^{-r/2a}, \quad (8.66)$$

$$u_{300}(r) = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left(\frac{1}{a}\right)^{3/2} \left(27 - 18\frac{r}{a} + 2\frac{r^2}{a^2}\right) e^{-r/3a}, \quad (8.67)$$

e assim por diante.

Fig.8.5: Função de onda (a esquerda) e densidade de probabilidade (a direita) do átomo de hidrogênio no estado fundamental, u_{100} e P_{100} , respectivamente, com $a = 1$, como função do raio r .

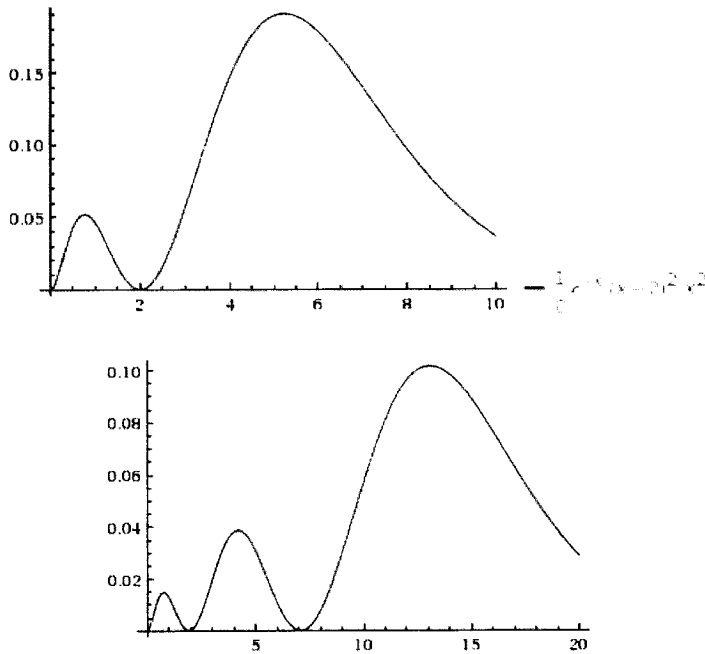


Exercício II.31: Prove que a função $u_{200}(r)$ satisfaz a equação (8.49).

Novamente, podemos obter as funções $P_{200}(r)$ e $P_{300}(r)$, que descrevem a probabilidade de encontrar o elétron entre r e $r + dr$, nos estados excitados descritos por $u_{200}(r)$ e $u_{300}(r)$, respectivamente. A Figura 8.6 apresenta as funções densidade de probabilidade para os dois casos.

Exercício 11.32: Calcule a função $P_{200}(r)$ e esboce o seu gráfico.

Fig.8.6: Função densidade de probabilidade do átomo de hidrogênio no estado excitado $u_{200}(r)$ (a esquerda) e $u_{300}(r)$ (a direita), considerando $a = 1$.



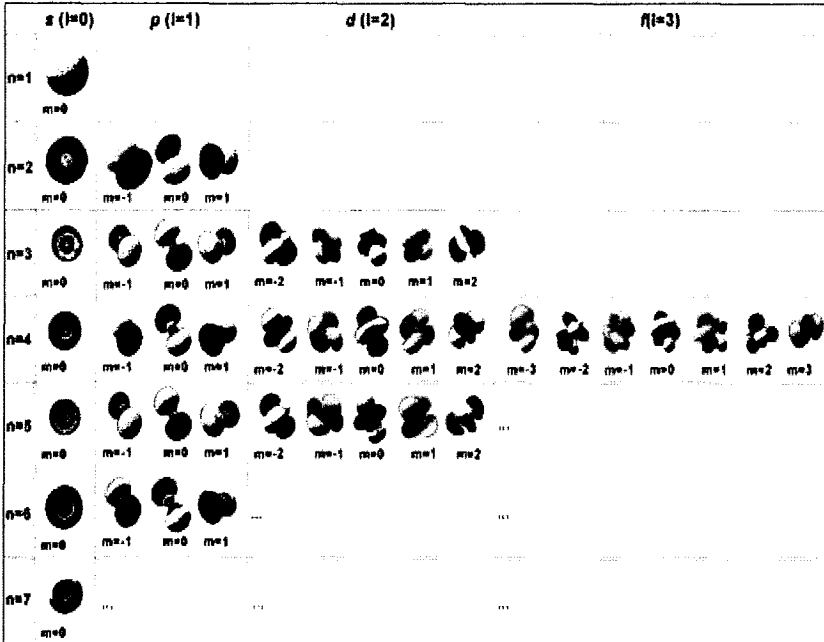
Alguns comentários interessantes aparecem nesses gráficos. Em primeiro lugar, a Figura 8.5 apresenta um único ponto de máximo, localizado em $r = a$ ou seja, no estado fundamental o “tamanho” do átomo está próximo do raio do Bohr. Quando o elétron recebe energia e muda, por exemplo, para o estado excitado $u_{200}(r)$, com probabilidade dada pela função $P_{200}(r)$, agora existem dois máximos, como podemos

observar na Figura 8.6. O máximo de maior amplitude está na região $r \sim 5a$, e esse é o tamanho aproximado do átomo nesse estado. Mesmo assim, existe uma possibilidade considerável de encontrar o elétron a aproximadamente um raio de Bohr do núcleo, mesmo estando ele com energia do primeiro estado excitado! Já para o segundo estado excitado, a região mais provável de encontrar o elétron é em torno $14a$.

Finalmente, olhando a Figura 8.7, a coluna representando o orbital s , ou $l = 0$, esboça essa discussão.

Para encerrar essa seção é importante salientar a diferença entre órbita e orbital. O primeiro conceito é clássico e corresponde ao movimento que se observaria de uma partícula, enquanto objeto clássico, orbitando em torno da origem. Já o conceito de orbital é quântico e está associado ao comportamento de objetos quânticos. A representação na forma de nuvem, usual em livros didáticos, busca ilustrar como a função probabilidade se distribui espacialmente, tendo regiões mais “densas” probabilidade maior que regiões menos densas.

Fig.8.7: Orbitais atômicos



Fonte: https://pt.wikipedia.org/wiki/número_quântico

(c) O orbital p

A segunda classe de funções de onda que vamos explorar são aquelas onde $l = 1$. Como $l_{max} = n - 1$, no mínimo devemos estar na camada L , com $n = 2$ e energia $E_2 = -3.4$ eV. Temos portanto três possibilidades, $u_{2,1,-1}$, u_{210} e $u_{2,1,1}$, dadas pelas seguintes funções de onda espaciais:

$$u_{210}(r, \theta) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a}\right)^{3/2} r \frac{r}{a} e^{-r/(2a)} \cos\theta, \quad (8.68)$$

e

$$u_{21\pm 1}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a}\right)^{3/2} r \frac{r}{a} e^{-r/(2a)} \sin\theta e^{\pm i\phi}. \quad (8.69)$$

Começando por u_{210} , vemos que agora a função de onda passa a depender do ângulo θ também, o que dificulta a análise. Calculando a média de um observável qualquer, temos:

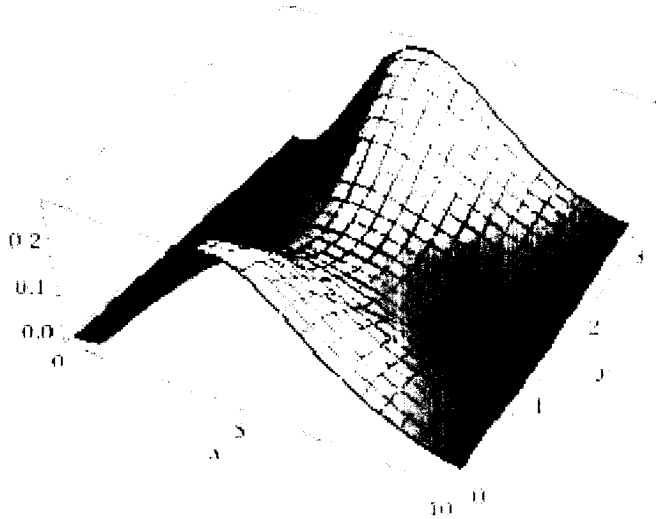
$$\begin{aligned}
 \langle \mathcal{O} \rangle_{u_{210}} &= \frac{1}{32\pi} \left(\frac{1}{a} \right)^3 \int \mathcal{O} \frac{r^2}{a^2} e^{-r} \cos^2 \theta dv \\
 &= \frac{1}{32\pi} \left(\frac{1}{a} \right)^3 \int \mathcal{O} \frac{r^2}{a^2} e^{-r} \cos^2 r^2 \sin \theta d\theta d\phi dr \\
 &= \frac{1}{16} \left(\frac{1}{a} \right)^5 \int \mathcal{O} r^4 e^{-r} \cos^2 \theta \sin \theta d\theta dr,
 \end{aligned}$$

de onde podemos identificar que a probabilidade de encontrar a partícula na região compreendida entre (θ, r) e $(\theta + d\theta, r + dr)$ é dada por:

$$P_{210}(\theta, r) d\theta dr = \frac{1}{16} \left(\frac{1}{a} \right)^5 r^4 e^{-r} \cos^2 \theta \sin \theta d\theta dr. \quad (8.70)$$

A Figura 8.8 apresenta o gráfico da função $P_{210}(r, \theta)$. Para interpretá-la, note que uma vez que não há dependência no ângulo ϕ , podemos considerar, por exemplo, $\phi = 0$.

Fig.8.8: Probabilidade do átomo de hidrogênio associada com o estado u_{210} considerando $a = 1$. A variável x representa a componente radial e a variável y , o ângulo θ .



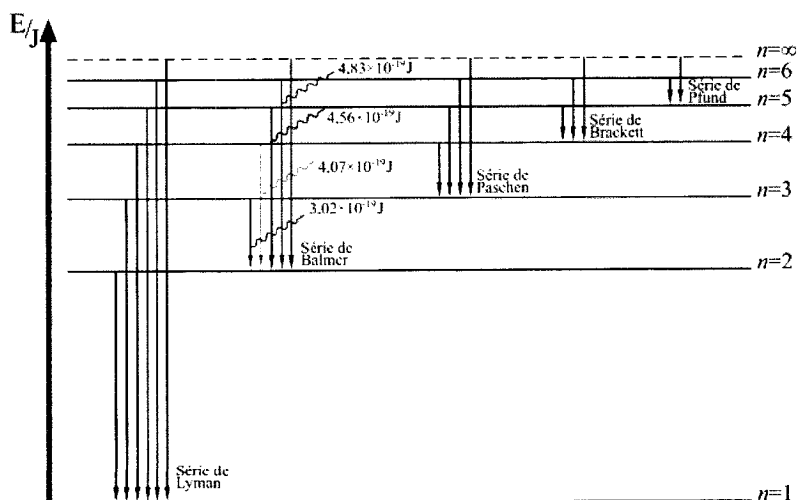
Podemos observar que para $r = 0$, independentemente do valor de θ , a probabilidade de encontrar a partícula é nula. Em torno de $r = 5$ temos uma dependência no ângulo θ : para $\theta = 0$ ou $\theta = \pi$, a probabilidade é máxima, e para $\theta = \pi/2$, é novamente nula. Esse comportamento é esboçado na Figura 8.7, coluna p. Como a dependência em ϕ das funções $u_{2l\pm 1}$ é do tipo $e^{-i\phi}$, ela desaparece na probabilidade e temos para elas um comportamento análogo ao discutido aqui.

Fica como desafio ao estudante a interpretação dos orbitais d e f .

(d) Espectro de energia e impressão digital dos átomos

Considerando que as energias possíveis para o átomo de hidrogênio são quantizadas e dadas pela fórmula (8.56), vemos que o elétron só pode absorver e emitir energia com valores específicos, dados pela diferença entre dois níveis do espectro de energia. Experiências com átomos de hidrogênio excitados já eram realizadas no final do século XIX, e várias séries eram conhecidas. A Figura 8.9 apresenta os níveis de energia do átomo de hidrogênio e as várias séries associadas a ele.

Fig.8.9: Níveis de energia do átomo de hidrogênio



8.4 O efeito de tunelamento

Considere uma partícula de massa m que esteja impedida de sair de uma certa região, ou seja, que esteja presa dentro de uma caixa. Por simplicidade resolveremos a caixa unidimensional de comprimento L . O potencial que representa essa situação é:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } 0 \leq x \leq L \\ \infty, & \text{se } x \leq 0 \text{ ou } x \geq L. \end{cases} \quad (8.71)$$

A solução da equação de Schrödinger para um estado com autovalor de energia E_n é dada por (DAS, 2012, GRIFFITHS, 1994):

$$\psi(x, t) = A_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}, \quad (8.72)$$

com

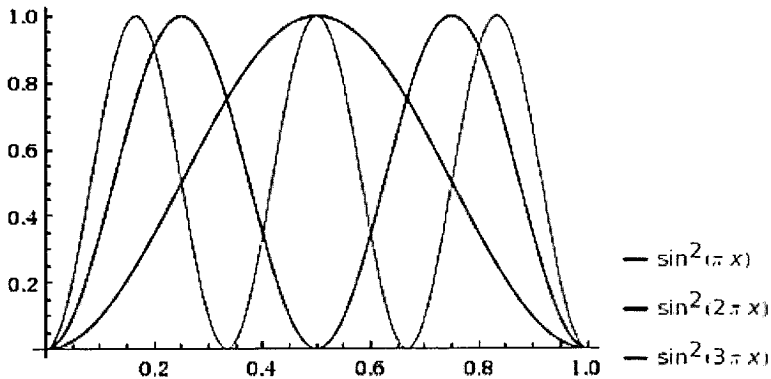
$$E_n = n^2 \left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}\right), n = 1, 2, 3, \dots \quad (8.73)$$

Portanto, a densidade de probabilidade de encontrar a partícula dentro da caixa é dada por

$$P_n(x, t) = |\psi_n(x, t)|^2 = A_n^2 \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = P_n(x) \quad (8.74)$$

A Figura 8.10 esboça as probabilidades associadas com os primeiros três níveis de energia.

Fig.8.10: Densidade de probabilidade de encontrar a partícula dentro da caixa para os três primeiros níveis de energia com $L = 1$.



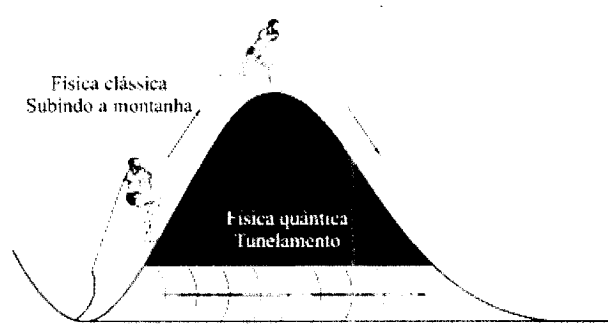
Exercício 11.33: Dada a distribuição de probabilidades estacionária apresentada, é correto afirmar que a partícula tem um movimento oscilatório dentro da caixa? Compare esse resultado com o resultado esperado classicamente.

Considere agora que a partícula está sujeita a um potencial do tipo

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } x \leq 0 \text{ ou } x \geq L \text{ e} \\ V_0, & \text{se } 0 \leq x \leq L, \end{cases} \quad (8.75)$$

com V_0 estritamente positivo. Classicamente, uma partícula vindo da esquerda, com energia total menor que V_0 , ao chegar em $x = 0$ irá encontrar uma parede intransponível, refletir e retornar no sentido contrário – em outras palavras, nessa situação é impossível encontrar a partícula na região $x \geq 0$. Quanticamente, porém, a situação é diferente. Pode-se demonstrar que existe uma probabilidade de encontrar a partícula sendo transmitida para a região $x \geq 0$ (Figura 8.11). Esse efeito é conhecido como efeito de tunelamento e tem aplicações tecnológicas.

Fig.8.11: Tunelamento quântico



Fonte: Adaptação de figura do endereço eletrônico:
<http://cienciaxreligiao.blogspot.com>

Finalizando essa seção é importante frisar que no efeito de tunelamento, a probabilidade de obter a partícula após a barreira tem amplitude menor que antes da barreira. Porém a energia do estado se mantém constante. Por que isso acontece?

Atividades propostas

1. Atividade individual extraclasse

Resolução do Capítulo 5

Leia atentamente o Capítulo 5 e reproduza individualmente cada um dos exercícios propostos. O trabalho deve ser desenvolvido como atividade extraclasse e entregue ao professor na aula seguinte. O debate dos principais pontos das contas deve acontecer nessa aula.

2. Trabalho em grupo

Na sala de informática, separe a turma em grupos de quatro alunos, e disponibilize a simulação para cada grupo.

Interferômetro de Mach-Zehnder Copyright (c) 2005 Fernanda Ostermann e Sandra Denise Prado Projeto Edital Universal – 08/2004 do CNPq.

Peça para que eles explorem todos os potenciais disponíveis e escrevam os principais pontos observados na simulação. Discuta todos os pontos levantados. Ao final dos

trabalhos, peça para que os alunos façam uma redação sobre os pontos discutidos

3. Atividade individual extraclasse

Resolução do Capítulo 6

Leia atentamente o Capítulo 6 e reproduza individualmente cada um dos exercícios propostos nela. O trabalho deve ser desenvolvido como atividade extraclasse e entregue ao professor na aula seguinte. O debate dos principais pontos das contas deve acontecer nessa aula.

4. Debate em sala

Divida a sala em três grupos e proponha a leitura da discussão apresentada no Capítulo 1 da referência (GRIFFITS, 1994). A seguir sorteie para cada grupo uma das três interpretações da MQ, no que se refere à existência ou não de uma partícula antes do processo de medida: posição realista, ortodoxa (interpretação de Copenhague) e agnóstica. Um debate entre os grupos deverá acontecer, com cada grupo defendendo a sua interpretação. Ao final da atividade, o professor deverá ponderar os principais pontos levantados e avaliar os grupos.

5. Trabalho individual

Utilizando a referência (RICCI; OSTERMANN, 2003), responda às seguintes perguntas

P1. Como você definiria um objeto clássico? E um objeto quântico?

P2. Descreva o que você entende por partícula no contexto clássico e no contexto quântico.

6. Atividade individual extraclasse

Resolução do Capítulo 8

Leia atentamente o Capítulo 8 e reproduza individualmente cada um dos exercícios propostos nela. O trabalho deve ser desenvolvido como atividade extraclasse e entregue ao professor na aula seguinte. O debate dos principais pontos das contas deve acontecer nessa aula.

7. Trabalho em grupo

Divida a sala em grupos de quatro alunos e peça para que eles construam um mapa conceitual sobre os formalismos clássico e quântico para a Mecânica.

8. Trabalho em grupo

Na sala de informática, separe a turma em grupos de quatro alunos, e disponibilize a simulação <<http://phet.colorado.edu/en/simulation/legacy/hydrogen-atom>> para cada grupo.

Peça para que eles explorem todos os modelos atômicos disponíveis e escrevam os principais pontos observados na simulação. Em particular, interprete o modelo de orbitais apresentado. Discuta com os alunos sobre todos os pontos levantados. Ao final dos trabalhos, peça para que os alunos façam uma redação sobre os pontos discutidos.

9. Trabalho em grupo

Na sala de informática, separe a turma em grupos de quatro alunos, e disponibilize a simulação <<http://phet.colorado.edu/pt/simulation/tunneling>> para cada grupo.

Peça para que eles explorem todos os potenciais disponíveis e escrevam os principais pontos observados na simulação. Discuta sobre os pontos levantados. Ao final dos

trabalhos, peça para que os alunos façam uma redação sobre os pontos discutidos

10. Trabalho Individual

Pesquise exemplos de aplicações tecnológicas do tunelamento. Cada estudante deverá trazer pelo menos uma aplicação tecnológica. As atividades pesquisadas deverão ser listadas no quadro branco e discutidas em sala de aula por todos.

11. Trabalho em grupo

Separe a turma em grupos de quatro alunos. Cada grupo deverá construir uma sequência didática para o ensino médio explorando um dos tópicos vistos nesta unidade. A escolha do tópico fica a critério do grupo. Sugestões de atividades a serem incorporadas na sequência didática:

- simulações do PHET-COLORADO – para cada simulação existem sugestões de atividades a serem desenvolvidas com os alunos que podem ser aproveitadas na sequência didática;
- artigos em revistas voltadas para o público de ensino médio, como *Mundo Estranho*, *Super Interessante* etc.;
- artigos de revistas voltadas para professores, como *Revista Brasileira do Ensino de Física*, *Física na Escola* etc.
- Textos de apoio ao professor, da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Mais aplicações

Nas duas unidades anteriores, estudamos aspectos gerais de Mecânica Quântica, desde a discussão das primeiras observações experimentais que não eram condizentes com uma explicação “clássica”, passando pela revisão de aspectos matemáticos e finalmente chegando nos postulados da MQ e algumas aplicações básicas. Nessa unidade final do livro, buscaremos discutir algumas aplicações modernas desse formalismo, em particular a computação quântica. Para isso, iniciaremos com a discussão do spin do elétron para a seguir abordar o paradoxo EPR (EINSTEIN *et al.*, 1935) e finalmente discutir computação quântica.



Capítulo 10

Spin

Esse capítulo apresenta a discussão do conceito quântico *spin*. Alguns livros introdutórios de Física Moderna utilizam uma visão semiclássica de *spin*, por meio de uma analogia com partículas carregadas em movimento de rotação em torno de um eixo genérico. Essa concepção pode levar o estudante um pouco mais perspicaz a questionamentos não cabíveis de explicação no contexto da física clássica. Além disso, ela vai contra a abordagem deste livro, que é a de não buscar analogias clássicas no entendimento de fenômenos quânticos. Relembrando o que discutimos até agora, um esforço foi feito no sentido de diferenciar comportamentos clássicos, associados com objetos ditos clássicos, de comportamentos quânticos, associados com objetos quânticos. Assim, estudamos, por exemplo, o átomo de hidrogênio, que enquanto objeto clássico, não pode existir. Já no formalismo da MQ, analisamos o conceito de orbital, diretamente ligado à probabilidade de encontrar o elétron nas diferentes regiões do átomo após o processo de medida.

O *spin*, entretanto, é uma propriedade das partículas subatômicas muito especial: não há como explicá-la usando conceitos de física clássica. Sua analogia com momento

angular é puramente matemática: os operadores que descrevem o spin e o momento angular satisfazem relações de comutação (conforme discutido na seção 6.3) semelhantes. E a semelhança entre esses dois conceitos acaba aí! Nesse capítulo apresentaremos a discussão de spin e sua representação matemática, para isso utilizando o sistema de dois níveis.

10.1 O experimento de Stern-Gerlach e o spin do elétron

Iniciaremos o estudo do sistema de dois níveis com a análise da experiência de Stern-Gerlach, utilizando como referência a discussão apresentada por Gomes e Pietrocola (2011). Proposta por Stern em 1921, e realizada em parceria com Gerlach, a experiência tinha como objetivo determinar se o momento angular dos átomos era quantizado (conforme a hipótese de Bohr) ou não. O procedimento experimental consistia em lançar um feixe de átomos em uma direção perpendicular ao gradiente de variação de um campo magnético não uniforme produzido por um ímã. Após passarem pela região de campo magnético, os átomos se depositariam em uma placa coletora.

Classicamente (caso a partícula tivesse momento angular não nulo) esperava-se que ocorresse uma deflexão na direção do gradiente de variação (normalmente a direção z) formando uma distribuição contínua de partículas ao longo da placa coletora.

Exercício III.1: Utilizando a referência (GRECA; HERSCOVITZ, 2002), analise classicamente o comportamento esperado para o feixe de átomos ao passar pelo experimento de Stern-Gerlach.

Porém, ao se fazer a experiência não foi esse o resultado encontrado. Observou-se que o feixe de partículas inicial

se dividia em dois ao passar pelo ímã, sendo portanto detectado na placa coletora somente em duas regiões. Na época, Stern e Gerlach acreditaram que essa seria a comprovação de que o momento angular das partículas fosse discretizado, segundo havia previsto Bohr.

Só existia um problema, que na época não era conhecido. O átomo utilizado na experiência foi o de prata, que possui o elétron de valência na camada 5s. Seus números quânticos são, portanto: $n=5$, $l=0$ e $m=0$. Ou seja, o momento angular orbital do átomo de prata é nulo (por quê?). De fato, quem é o responsável por esse comportamento é uma outra propriedade do átomo (ou de seu elétron de valência), o spin. Embora não fosse esse o objetivo de Stern ao propor a experiência, o que de fato os dois cientistas mediram foi o alinhamento do spin do elétron de valência com o campo magnético do ímã. Vale salientar que o conceito de spin e seu uso na interpretação da experiência de Stern-Gerlach só aconteceram alguns anos depois da apresentação dos resultados (GOMES; PIETROCOLA, 2011).

Para entender o conceito de spin, vamos inicialmente olhar para o momento angular. Classicamente, sua definição é dada por:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = (yp_z - zp_y)\hat{i} + (zp_x - xp_z)\hat{j} + (xp_y - yp_x)\hat{k}, \quad (10.1)$$

onde \vec{r} e \vec{p} são respectivamente, os vetores posição da partícula em relação a um ponto de referência e seu momento linear.

Na construção do formalismo quântico, as componentes do operador momento angular são portanto escritas como:

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \\ \hat{L}_y &= -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \\ \hat{L}_z &= -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \end{aligned} \quad (10.2)$$

O comutador das componentes do momento angular pode ser calculado considerando-se uma função teste f , ou seja:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y]f = \hbar^2 \left\{ \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) - \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \right\} f.$$

O cálculo envolve somente derivadas e após algumas manipulações algébricas, pode-se demonstrar que

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y]f = i\hbar \hat{L}_z \quad (10.3)$$

De maneira análoga podemos obter:

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z]f = i\hbar \hat{L}_x, [\hat{L}_z, \hat{L}_x]f = i\hbar \hat{L}_y. \quad (10.4)$$

Exercício III.2: Obtenha as equações (10.3) e (10.4).

Uma consequência direta desse resultado é que os observáveis \hat{L}_x , \hat{L}_y e \hat{L}_z são quanticamente incompatíveis e não podem ser medidos simultaneamente.

Exercício III.3: Utilizando a referência (GRECA *et al.*, 2001), discuta o conceito quântico de observáveis incompatíveis e sua relação com o Princípio da Incerteza.

Voltando ao experimento de SG, o novo comportamento observado nos elétrons tem semelhanças com o comportamento do momento angular. Na verdade tem duas grandes semelhanças: a incompatibilidade das medidas nas diferentes direções espaciais, e o fato de ser afetado pelo campo magnético externo não uniforme, no caso, do imã. Porém tem uma grande diferença: não existe eixo de simetria em torno do qual o elétron estaria girando de forma a gerar o momento angular. Assim, qualquer analogia do que chamaremos de spin com uma rotação do elétron em torno de um

eixo cairá fatalmente em inconsistência. A semelhança do spin com o momento angular é puramente algébrica. Pode-se demonstrar que o operador quântico que descreve o spin do elétron (\vec{S}) satisfaz relações de comutação semelhantes às que o operador momento angular satisfaz, ou seja:

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y]f = i\hbar\hat{S}_z, [\hat{S}_y, \hat{S}_z]f = i\hbar\hat{S}_x, [\hat{S}_z, \hat{S}_x]f = i\hbar\hat{S}_y. \quad (10.5)$$

Toda partícula elementar tem um valor fixo de spin. Partículas com spin semi inteiro são ditas férmions e obedecem o princípio de exclusão de Pauli (OLIVEIRA, 2010). Um exemplo são os elétrons, que tem spin $1/2$. Isso significa que as únicas medidas possíveis das projeções do spin do elétron são $\pm 1/2$. Considerando mais esta propriedade, o elétron preso no átomo de hidrogênio passa a ser caracterizado por quatro números quânticos: n, l, m, m_s .

Em um cristal, onde os elétrons estão “presos” em lugares bem definidos eles são aproximadamente caracterizados somente pelo seu número quântico de spin. Nesta configuração, o espaço vetorial que descreve o elétron quanticamente tem dimensão dois. Uma possível base nesse espaço é dada pelos estados $|+\rangle$ e $|-\rangle$. Esta base pode ser pensada como estando associada com as duas projeções do spin do elétron em relação a um campo magnético externo. Nesse caso, qualquer vetor nesse espaço pode ser escrito como uma combinação linear de elementos da base, e em tese pode representar um estado físico para o elétron no cristal.

Exercício III.4: Considere que o estado:

$$|\nu\rangle = a|+\rangle + b|-\rangle,$$

representa um estado físico para um elétron preso em um cristal. Discuta o seu significado físico.

Na experiência de SG, por exemplo, a interação do spin do elétron de valência com o campo magnético faz com que

os átomos de prata sofram a deflexão ao passar pelo aparato experimental: átomos com spin +, são defletidos para cima e átomos com spin – são defletidos para baixo. O aparato de SG mede portanto a componente do spin na direção do campo magnético aplicado.

10.2 Partículas de spin 1/2 e sistema de dois níveis

Na seção anterior, estudamos o comportamento de elétrons na presença de campos magnéticos externos. O comportamento observado para os elétrons na verdade é mais geral, e pode ser observado em todas as partículas com spin 1/2.

Para caracterizar o “grau de liberdade” de spin destas partículas, utilizamos um espaço vetorial de dimensão 2. Uma base nesse espaço pode ser construída considerando os autoestados do operador \hat{S}_z (sem perda de generalidade poderíamos considerar os operadores \hat{S}_x ou \hat{S}_y obtidos da relação:

$$\hat{S}_z|\pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2}|\pm\rangle. \quad (10.6)$$

Na forma matricial, os estados $|+\rangle$ e $|-\rangle$ são representados respectivamente por

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (10.7)$$

e os operadores \hat{S}_x, \hat{S}_y e \hat{S}_z :

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (10.8)$$

Exercício III.5: Calcule as relações de comutação entre \hat{S}_x, \hat{S}_y e \hat{S}_z : e compare com os valores encontrados para o momento angular orbital.

Nesse espaço, um estado qualquer pode ser representado por uma combinação linear dos autoestados de \hat{S}_z , ou seja,

$$|v\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = a|+\rangle + b|-\rangle. \quad (10.9)$$

Isso significa que se prepararmos um feixe de N elétrons todos no estado $|v\rangle$, e submetermos esses elétrons a um aparato de SG na direção z então, em média, $|a|^2 \times N$ deles irão defletir para cima, e $|b|^2 \times N$ deles irão defletir para baixo (com $|a|^2 + |b|^2 = 1$).

Exercício III.6: Considere o estado:

$$|v\rangle = \frac{1}{2}|+\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2}|-\rangle = \begin{pmatrix} 1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{pmatrix}. \quad (10.10)$$

Ao prepararmos um feixe com 100 elétrons nesse estado de spin e passarmos esse feixe pelo aparato de SG na direção z , quantos deles irão defletir para cima? E quantos irão defletir para baixo?



O artigo EPR e computação quântica

Embora a formulação matemática da MQ estivesse estabelecida já no início da década de 1930, o seu caráter probabilístico ainda gerava desconforto em vários físicos. No ano de 1935, Einstein, Podolsky e Rosen (EPR) apresentaram um argumento de que a MQ seria uma teoria incompleta (EINSTEIN, 1935). Para tanto, eles propuseram um estado quântico específico, um caso particular de uma classe de estados possíveis na teoria, hoje conhecidos como “estados emaranhados”. Esses estados apresentam características não locais, ferindo os princípios da Relatividade Especial, o que foi considerado por eles um forte indicativo de que a formulação da MQ tinha problemas. Durante décadas esses estados, muito embora previstos na teoria, não foram detectados experimentalmente. Somente a partir da década de 1980 é que as primeiras experiências comprovando a existência de estados emaranhados foram realizadas (ASPECT, 1981, 1982). Hoje o emaranhamento quântico é um dos principais aspectos conceituais da MQ utilizados no desenvolvimento de uma nova área de pesquisa aplicada, a

da computação quântica (NIELSEN, 2000; BOUWMEESTER, 2000; PIZZA, 2009).

Nesse capítulo final, apresentaremos os principais conceitos associados com a construção de estados emaranhados: o princípio da superposição e a definição de sistemas compostos para, a seguir, apresentar o paradoxo EPR, as desigualdades de Bell e finalmente discutir as aplicações tecnológicas. Utilizaremos como texto de apoio o trabalho de conclusão de curso de graduação de Costa (2011).

11.1 O Princípio da Superposição

O primeiro conceito que iremos discutir buscando entender o paradoxo EPR é o Princípio da Superposição de Estados Quânticos. Esse é um dos princípios fundamentais da MQ, e a sua existência torna essa teoria intrinsecamente diferente da Mecânica Clássica (GRECA *et al.*, 2001). O princípio estabelece que “dados dois estados possíveis para um objeto (ou sistema) quântico, então a combinação linear deles também é um estado possível”.

É claro que o significado da existência desse estado de superposição quântico não é trivial. Existem diversas interpretações do que ele representa, e a discussão da experiência mental proposta por Schrödinger em 1935, e que ficou conhecida como paradoxo do gato de Schrödinger, é um exemplo clássico de como é difícil chegar a um consenso do que significa esse estado superposto.

Exercício III.7: Usando as referências (SOARES, 2008; GRECA *et al.*, 2001, GRECA; HERSCOVITZ, 2002), discuta o paradoxo do gato de Schrödinger.

Apresentamos ao longo do texto algumas situações nas quais o princípio da superposição de estados se manifestava. No estudo do IMZ, por exemplo, vimos que ao diminuir a intensidade do feixe de luz incidente, de forma a alcançar o

regime quântico, no qual apenas um fóton chegava ao detector por vez, ao passar pelo semiespelho, o estado do fóton tornava-se uma combinação linear dos estados LI que representavam os dois caminhos disponíveis. Ainda assim, isso não significava dizer que o fóton estava em algum caminho entre os dois possíveis. Aguiar (2015) apresenta uma boa discussão do significado desse estado.

Mais à frente, no estudo do spin do elétron, com o uso do experimento de Stern-Gerlach, discutimos novamente estados superpostos. Por exemplo, o estado representado pelo vetor (10.9) implica na observação experimental, associada com o aparato de SG, das probabilidades de deflexão de elétrons pelo ímã. Note o cuidado que tomamos com a discussão do significado desses estados antes do processo de medida. Diferentes interpretações da MQ implicam em diferentes significados para o estado superposto. Na interpretação ortodoxa, “[...] não faz sentido perguntar por qual dos braços passa o fóton no interferômetro (de Mach-Zehnder)”. Já na versão ondulatória, “não é o fóton, como partícula que é separado no primeiro separador de feixes (no interferômetro de Mach-Zehnder), é a sua função de onda que é dividida em duas” (RICCI; OSTERMANN, 2003).

11.2 Sistemas simples e compostos e paradoxo EPR

Para entender o paradoxo apresentado por EPR, precisamos entender mais uma peça nesse grande quebra-cabeça, que é a definição de sistemas simples e compostos.

Sistemas simples são caracterizados por um único “grau de liberdade”. Por exemplo, uma partícula quântica pontual possui um único grau de liberdade de translação. Uma partícula localizada (presa em uma rede cristalina) com spin possui também um único grau de liberdade. Ao grau de liberdade do sistema associamos um vetor de estado em um espaço de Hilbert. No caso da partícula pontual, esse espaço

de Hilbert tem dimensão infinita e o estado da partícula é caracterizado pelo vetor $|\psi(t)\rangle$, ou de sua projeção na base coordenada, $\psi(\vec{r}, t) = \langle \vec{r} | \psi \rangle$, a função de onda. No caso do spin, o espaço de Hilbert tem dimensão 2, e vetor de estado pode, por exemplo, ser representado na base $|\pm\rangle$ como a decomposição (10.9).

Sistemas compostos possuem dois ou mais graus de liberdade. Um exemplo de sistema composto é aquele formado por duas partícula pontuais. Considerando \mathcal{H}_1 , o espaço de Hilbert da partícula 1, com uma particular base ortonormal $\{|m^{(1)}\rangle\}$ e \mathcal{H}_2 , o espaço de Hilbert da partícula 2, com uma particular base ortonormal $\{|n^{(2)}\rangle\}$, o espaço de Hilbert do sistema composto, \mathcal{H} , é definido como o produto tensorial dos dois espaços,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2. \quad (11.1)$$

A dimensão desse espaço será o produto das dimensões dos espaços \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 , e uma base nesse espaço pode ser obtida como:

$$\{|m^{(1)}\rangle \otimes |n^{(2)}\rangle\}. \quad (11.2)$$

Considerando dois vetores de \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 , respectivamente dados por:

$$|\phi^{(1)}\rangle = \sum_m \gamma_m^{(1)} |m^{(1)}\rangle, |\phi^{(2)}\rangle = \sum_n \gamma_n^{(2)} |n^{(2)}\rangle \quad (11.3)$$

podemos construir vetores no espaço produto de duas formas:

1. Estados separáveis

Nesse caso, o vetor no espaço produto é obtido como o produto de pares $|\phi^{(1)}\rangle \otimes |\phi^{(2)}\rangle$, e portanto:

$$|\psi\rangle = |\phi^{(1)}\rangle \otimes |\phi^{(2)}\rangle \quad (11.4)$$

$$\begin{aligned}
&= \left(\sum_m \gamma_m^{(1)} |m^{(1)}\rangle \right) \\
&\otimes \left(\sum_n \gamma_n^{(2)} |n^{(2)}\rangle \right) \\
&= \sum_{n,m} \gamma^{(1)} \gamma^{(2)} |m^{(1)} n^{(2)}\rangle.
\end{aligned}$$

Ainda no sistema composto por duas partículas pontuais, um exemplo de estado separável é

$$\begin{aligned}
\psi &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1^{(1)} 2^{(2)}\rangle + |1^{(1)} 3^{(2)}\rangle) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} |1^{(1)}\rangle \otimes (|2^{(2)}\rangle + |3^{(2)}\rangle), \quad (11.5)
\end{aligned}$$

onde a partícula (1) se encontra no estado $|1^{(1)}\rangle$, e a partícula (2) no estado $|2^{(2)}\rangle + |3^{(2)}\rangle$. Em outras palavras, o estado do sistema composto fatora no produto de estados individuais pertencentes aos respectivos espaços vetoriais.

2. Estados emaranhados

Considere agora um vetor no espaço produto obtido como a seguinte combinação linear:

$$|\sigma\rangle = \alpha|\psi\rangle + \beta|\xi\rangle, \quad (11.6)$$

onde $|\psi\rangle$ e $|\xi\rangle$ são vetores do tipo (11.4). Novamente considerando o sistema composto por duas partículas pontuais, um exemplo de um estado desse tipo é dado por:

$$|\sigma\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1^{(1)} 2^{(2)}\rangle + |2^{(1)} 1^{(2)}\rangle), \quad (11.7)$$

e o estado do sistema composto não fatora no produto de estados individuais pertencentes aos respectivos espaços vetoriais dos sistemas simples. Estados do sistema composto que não podem ser fatorados em estados de seus subsistemas são ditos estados emaranhados.

A dinâmica do sistema composto também é governada pela equação de Schrödinger. Agora, porém, o estado do sistema pertence ao espaço de Hilbert produto, \mathcal{H} ;

Quando não há interação entre as partículas, a hamiltoniana do sistema composto no espaço de Hilbert produto é construída como sendo:

$$\hat{H} := \hat{H}_1 \otimes \hat{1}_2 + \hat{1}_1 \otimes \hat{H}_2, \quad (11.8)$$

onde $\hat{1}_i (i = 1, 2)$ representa o operador identidade no espaço de cada partícula. Nesse caso, se o estado inicial do sistema é separável, ele continuará evoluindo separadamente.

Por outro lado, quando existe um termo de interação entre as partículas no sistema composto,

$$\hat{H} := \hat{H}_1 \otimes \hat{1}_2 + \hat{1}_1 \otimes \hat{H}_2 + \hat{H}_{int} \quad (11.9)$$

em geral, mesmo que o estado inicial seja separável, com o decorrer do tempo ele se tornará emaranhado.

A seguir apresentaremos alguns exemplos de estados emaranhados.

1. Duas partículas localizadas de spin 1/2

Considere duas partículas pontuais localizadas de spin 1/2. O espaço de cada partícula terá dimensão 2 e uma base possível nesse espaço é dada pelos autovetores do operador \hat{S}_z . Uma base no espaço produto pode, portanto, ser escrita como:

$$\{| ++ \rangle, | + - \rangle, | - + \rangle, | - - \rangle\}. \quad (11.10)$$

Assim, o hamiltoniano do sistema composto é escrito como:

$$\hat{H} = \frac{a_1}{\hbar} \hat{S}_z^{(1)} \otimes \hat{1}^{(2)} + \frac{a_2}{\hbar} \hat{1}^{(1)} \otimes \hat{S}_z^{(2)} + \frac{g}{\hbar^2} \vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} \quad (11.11)$$

onde a_i ($i = 1,2$) e g são constantes associadas com a interação dos spins com o campo magnético externo e entre si, respectivamente. Para achar os estados acessíveis ao sistema composto, precisamos calcular os autoestados do hamiltoniano. Pode-se demonstrar que os estados $|++\rangle$ e $|--\rangle$ são autoestados do hamiltoniano separáveis (ou não emaranhados) satisfazendo:

$$\hat{H}|++\rangle = \left(\frac{a_1 + a_2}{2} + \frac{g}{4}\right)|++\rangle, \quad (11.12)$$

e

$$\hat{H}|--\rangle = \left(-\frac{a_1 + a_2}{2} + \frac{g}{4}\right)|--\rangle. \quad (11.13)$$

Além dos dois autovetores anteriores, existem mais dois autovetores emaranhados dos estados $|+-\rangle$ e $|-+\rangle$, escritos como:

$$|E_+\rangle = f_1(a_1, a_2, g)|+-\rangle + f_2(a_1, a_2, g)|-+\rangle, \quad (11.14)$$

e

$$|E_-\rangle = f_1(a_1, a_2, g)|+-\rangle - f_2(a_1, a_2, g)|-+\rangle, \quad (11.15)$$

onde f_1 e f_2 são funções específicas. Em particular, quando $a_1 = a_2$ os autoestados emaranhados tornam-se:

$$|B_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle), \quad (11.16)$$

e

$$|B_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle). \quad (11.17)$$

Esses estados são dois dos quatro estados conhecidos como estados de Bell e terão papel importante na discussão de emaranhamento quântico.

2. Força dependente da distância entre as partículas

Considere duas partículas pontuais de massa m_1 e m_2 sem *spin* sujeitas a uma força de interação cuja energia potencial é do tipo:

$$V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) = -\frac{a}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (11.18)$$

A hamiltoniana do sistema composto é escrita como:

$$\hat{H} = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} \otimes \hat{1}_2 + \hat{1}_1 \otimes \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} - \frac{a}{|\vec{r}_1 \otimes \mathbf{1}_2 - \mathbf{1}_2 \otimes \vec{r}_2|} \quad (11.19)$$

e o estado do sistema composto é emaranhado⁷.

Com o conceito de sistemas simples e compostos discutido, bem como o Princípio da Superposição, finalmente podemos analisar o artigo EPR. Um dos pontos levantados no trabalho é a necessidade de duplicação do espaço de Hilbert na construção dos sistemas compostos, propriedade essa sem análogo clássico. De fato, essa característica “algébrica” da teoria traz consequências profundas na interpretação da MQ, se somadas aos postulados básicos. Especificamente, permite a construção de estados emaranhados, que não podem ser fatorados como o produto dos estados individuais de cada um dos subsistemas que compõem o sistema composto.

Apresentaremos agora a discussão proposta por EPR sobre as profundas consequências da existência desses estados na MQ. Para entender os argumentos apresentados no artigo, precisamos inicialmente definir alguns pré-requisitos.

1. Definição de Realidade Física: *Se, sem perturbar o sistema, pudermos prever com certeza (ou seja, com probabilidade igual a 1) o valor de uma certa quantidade física, então*

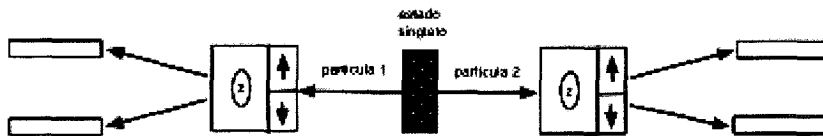
⁷ Na resolução do átomo de hidrogênio apresentada em aulas passadas, desprezamos o movimento do núcleo do átomo de hidrogênio e consideramos somente o sistema simples do elétron sujeito a uma força central. Caso tivéssemos considerado o seu movimento, teríamos a situação apresentada para resolver.

existe um elemento da realidade física correspondendo a essa quantidade.

2. Definição de Teoria Completa: *Se uma teoria é completa, então todo elemento da realidade física possui um correspondente nessa teoria.*
3. Definição de Localidade: *Elementos da realidade referentes a um sistema não podem ser afetados por medições à distância em um outro sistema.*

Embora não tenha sido esse o exemplo de estado emaranhado utilizado no artigo EPR, por questões didáticas vamos considerar o exemplo utilizado por Bohm (1951). Considere um sistema composto por dois elétrons no estado emaranhado $|B_3\rangle$, conhecido como estado singleto. Bohm propõe realizarmos a medida do spin dos dois elétrons na direção z segundo o aparato apresentado na Figura 11.1.

Fig.11.1: Aparato proposto por David Bohm para discutir o artigo EPR



Partindo da origem O, dois elétrons no estado emaranhado $|B_3\rangle$ partem em sentidos opostos, em direção a dois aparatos de SG, respectivamente SG1 e SG2. Segundo a MQ, o operador no espaço produto que representa o sistema composto é dado por:

$$\hat{S}_z^{(1)} \otimes \hat{S}_z^{(2)}. \quad (11.20)$$

Portanto, o valor esperado da medida do operador apresentado no estado singleto é representado por $\langle B_3 | \hat{S}_z^{(1)} \otimes \hat{S}_z^{(2)} | B_3 \rangle$, e pode-se demonstrar matematicamente que

$$\langle B | \hat{S}_z^{(1)} \otimes \hat{S}_z^{(2)} | B \rangle = -1. \quad (11.21)$$

Esse resultado teórico tem a seguinte interpretação, observada experimentalmente. Se a partícula 1 é detectada com spin +, então instantaneamente, a partícula 2 é detectada com spin -. Agora, se a partícula 1 é detectada com spin -, então instantaneamente, a partícula 2 é detectada com spin +.

Em outras palavras, esse aparato permite prever com certeza a projeção do spin da partícula 2, sem perturbar o seu estado. Portanto, essa quantidade física é, segundo a definição EPR, um elemento da realidade física. Pelo mesmo tipo de argumento podemos afirmar que as projeções do spin da partícula 2 nas direções x , y também são elementos de realidade física. Porém, os operadores que representam na MQ esses elementos de realidade física, $\hat{S}_x^{(2)}$, $\hat{S}_y^{(2)}$ e $\hat{S}_z^{(2)}$ não comutam e, portanto, não podem ser simultaneamente bem definidos. Assim, esses elementos de realidade física não possuem simultaneamente um correspondente na teoria e a MQ é uma teoria incompleta segundo a definição EPR.

Além disso, o fato da medição da projeção do spin na direção z da partícula (1), segundo a MQ com probabilidades iguais de se obter os valores + e -, instantaneamente propagar essa informação para a partícula (2) faz com que a teoria seja também não local, sendo essa informação propagada a velocidade infinita e ferindo os princípios da Relatividade Especial de Einstein (COSTA, 2011).

11.3 Desigualdades de Bell

Em 1964, tomando como base a discussão apresentada por Einstein sobre a incompletude da MQ, Bell utilizou a ideia de novas variáveis, as variáveis ocultas, para demonstrar a primeira de suas desigualdades. Tais desigualdades são uma maneira de detectar se um estado quântico é emaranhado ou não.

As variáveis ocultas são representadas por um parâmetro λ e uma distribuição de probabilidade $\rho(\lambda)$ satisfazendo:

$$\int \rho(\lambda) d\lambda = 1. \quad (11.22)$$

Com o uso dessas variáveis, Bell propõe que o resultado das medidas do spin da partícula (1) na direção \vec{a} e do spin da partícula (2) na direção \vec{b} sejam representados respectivamente por:

$$A(\vec{a}, \lambda), B(\vec{b}, \lambda). \quad (11.23)$$

A medida dos dois spin no espaço conjunto é representada por:

$$A(\vec{a}, \lambda)B(\vec{b}, \lambda), \quad (11.24)$$

e o valor esperado dessa quantidade no estado singlete é escrito como:

$$\langle A(\vec{a}, \lambda)B(\vec{b}, \lambda) \rangle = \int \rho(\lambda) A(\vec{a}, \lambda)B(\vec{b}, \lambda) d\lambda = -\vec{a} \cdot \vec{b} \quad (11.25)$$

Não vamos entrar em detalhes da demonstração da desigualdade. Considerando \vec{a}, \vec{b} e \vec{c} três direções quaisquer sobre as quais se projetam os spins dos elétrons, então a desigualdade de Bell pode ser escrita como:

$$|\langle A(\vec{a}, \lambda)B(\vec{b}, \lambda) \rangle - \langle A(\vec{a}, \lambda)B(\vec{c}, \lambda) \rangle| \leq 1 + \langle A(\vec{b}, \lambda)B(\vec{c}, \lambda) \rangle, \quad (11.26)$$

ou seja,

$$|-\vec{a} \cdot \vec{b} + \vec{a} \cdot \vec{c}| \leq 1 - \vec{b} \cdot \vec{c}. \quad (11.27)$$

que é uma das desigualdades de Bell. Em geral, pode-se demonstrar que um estado quântico está emaranhado se ele viola uma desigualdade de Bell. As desigualdades de Bell foram utilizadas por Aspect na detecção experimental de estados emaranhados (1981, 1999).

11.4 Computação Quântica

A possibilidade de construção de computadores quânticos começou a aparecer na comunidade científica na década de 1980, com as discussões de vários cientistas, entre eles Richard Feynman (1982) e David Deutsch (1985). Tais computadores são conceitualmente diferentes dos atuais, os quais usam *transistors*, e carregam informação em “bits” unitários, que podem assumir somente dois valores, ou estados, definidos como zero e um. Computadores quânticos, por outro lado, usam o conceito de “bit quântico”, ou QUBIT, que pode existir em estados simultâneos de zero e um, ou seja, estados que são superposições quânticas dos estados zero e um (GRECA; HERSCOVITZ, 2002). A seguir apresentamos alguns aspectos matemáticos envolvidos nessa discussão.

Considerando o sistema composto considerado por Bell, formado por duas partículas de spin 1/2 emaranhadas, podemos construir quatro estados:

$$|B_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|++\rangle + |--\rangle),$$

$$|B_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle),$$

$$|B_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle),$$

$$|B_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|++\rangle - |--\rangle),$$

que formam uma base no espaço de Hilbert do sistema composto. Considere, agora, que o sistema composto está no estado de Bell $|B_1\rangle$. Aplicando o operador $\hat{S}_z^{(1)} \otimes \hat{1}^{(2)}$ em $|B_1\rangle$ temos:

$$\begin{aligned}
(\hat{S}_z^{(1)} \otimes \hat{1}^{(2)})|B_1\rangle &= (\hat{S}_z^{(1)} \otimes \hat{1}^{(2)})\frac{1}{\sqrt{2}}(|++\rangle + |--\rangle) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}[(\hat{S}_z^{(1)}|+\rangle) \otimes |+\rangle + (\hat{S}_z^{(1)}|-\rangle) \otimes |-\rangle] \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}(|++\rangle - |--\rangle) = |B_4\rangle.
\end{aligned}$$

Assim, atuando somente no subsistema (1) alteramos o estado do sistema composto, transmitindo duas “informações” operando localmente em apenas uma partícula. Essa é a base conceitual que está por trás da ideia de teleporte e computação quântica. Existe um protocolo de transferência de informação, no qual cada um dos estados de duas partículas é representado por um dos elementos da base $\{|B_i\rangle\}$. Esse processo é conhecido como codificação superdensa (BENNETT; BRASSARD, 1984).

Conforme já dissemos, os primeiros resultados experimentais dos estados emaranhados foram realizados no início da década de 1980. Na época, Aspect (1981) e colaboradores analisaram a polarização de pares de fótons emitidos em uma cascata atômica radiativa de cálcio. No final dessa década, novos resultados foram encontrados utilizando fótons ultravioleta.

A preservação de estados emaranhados já foi observada em até dez quilômetros de distância (TITTEL *et al.*, 1998). O Laboratório de Manipulação coerente de átomos e luz do Instituto de Física da USP realiza experiências de correlações quânticas entre feixes de luz coerente (VILLAR *et al.*, 2005).



Capítulo 12

Atividades propostas

1. Atividade individual extraclasse

Resolução do Capítulo 10

Leia atentamente o Capítulo 10 e reproduza individualmente cada um dos exercícios propostos nela. O trabalho deve ser desenvolvido como atividade extraclasse e entregue ao professor na aula seguinte. O debate dos principais pontos das contas deve acontecer nessa aula.

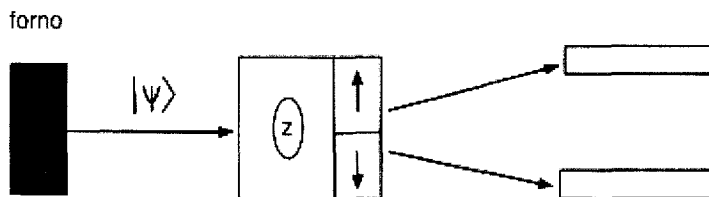
2. Trabalho em grupo

Na sala de informática, separe a turma em grupos de quatro alunos, e disponibilize a simulação

SPINS (SCHROEDER, 1993) – *Simulação em JAVA, desenvolvida por McIntyre (2014a), baseada em uma versão original para Macintosh, conhecida como SPINS, que simula o experimento de SG.*

Agora peça para cada grupo preparar o sistema conforme a Figura 12.1.

Fig.12.1: Experimento de SG – simulação 1



Fonte: adaptação de (MCINTYRE, 2014b).

A seguir os grupos devem realizar a simulação, enviando 10 átomos e registrando na Tabela 12.1 o número de átomos orientados para cima na segunda linha, segunda coluna. Os grupos devem repetir o procedimento dez vezes, preenchendo as linhas seguintes da coluna 2.

Tabela 12.1: Experimento de SG – simulação 1

No. de Átomos	10	100	1000	10000
Dados (N=10)				
\bar{x}				
s				
σ_m				
ρ				
σ_p				
σ_x/ρ				

Fonte: Adaptação de (MCINTYRE, 2014b).

A seguir eles devem responder às perguntas a seguir:

- Na primeira medida, quantos átomos se orientaram para cima?

- Nesse caso, qual seria a probabilidade de encontrar um átomo para cima em um processo de medida?
- E na segunda medida? Como você interpreta isso?
- Qual o valor médio da medida do spin do átomo para cima após dez observações desse processo (ver MCINTYRE, 2014b). Com base nas dez observações, qual a probabilidade de encontrar o átomo orientado para cima?

Os grupos devem repetir a análise, para preencher todos os dados da tabela, agora considerando a simulação com 100, 1000 e 10000 átomos.

3. Trabalho em grupo

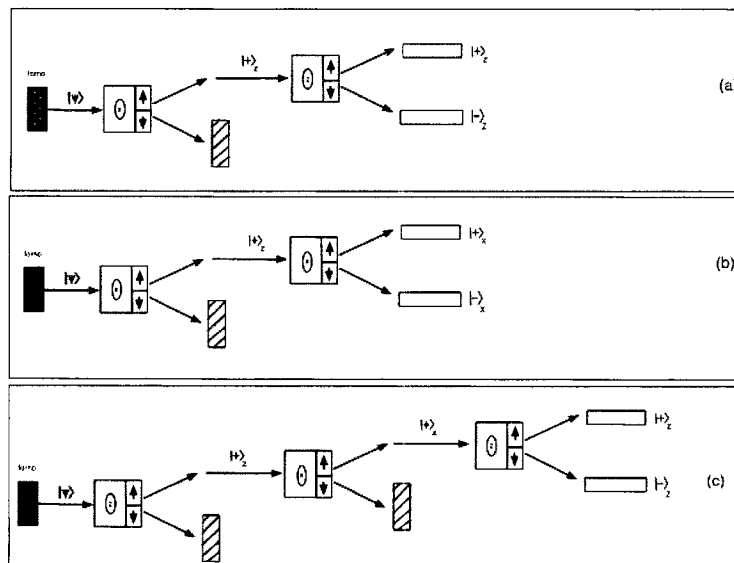
Na sala de informática, separe a turma em grupos de quatro alunos, e disponibilize a simulação SPINS (SCHROEDER, 1993). Agora peça para cada grupo preparar o sistema conforme a Figura 12.2, itens (a), (b) e (c) e realizar as simulações. Usando a referência (SAKURAI, 1994), os grupos devem discutir os resultados encontrados.

4. Atividade individual em sala:

Video national Geography – Além do Cosmos – MQ.

Discussão em sala: o vídeo aborda conceitualmente possíveis aplicações da MQ. Com base nesse material e no material apresentado em aula, escreva um texto resumindo os principais aspectos de Computação Quântica.

Figura 12.2: Experimento de SG – simulação 2



Fonte: adaptação de (MCINTYRE, 2014b)

Bibliografia

- AGUIAR, C. "Mecânica Quântica, uma abordagem (quase) conceitual", seminário apresentado na I Jornada Científica da UFPA (2015).
- ASPECT, P. G., GRANGIER, P., POGER, G. "Experimental tests of Realistic Local Theories via Bell's Theorem", Phys. Rev. Lett. 47, 460 (1981).
- ASPECT, P. G., GRANGIER, P., POGER, G. "Experimental realization of Einstein-Podolsky-Rosen-Bohm 'Gedankenexperiment': a new violation of Bell's Inequalities", Phys. Rev. Lett. 49, 91 (1982).
- ASPECT, A. "Bell's inequalities test: more ideal than ever", Nature 398, 189 (1999).
- BASSALO, J. M. F. "Sobre a Lei de Rayleigh-Jeans", Rev. Bras. Ens Fis., 18, 1, 30 (1996).
- BASSALO, J. M. F. "Observação e explicação do efeito fotoelétrico", Em Seara da Ciência, Curiosidades da Física. Disponível em: <<http://www.searadaciencia.ufc.br/folclore/folclore103.htm>>. Acesso em: 14 jun. 2016 (2016).
- BECK, G. Zeitschrift für Physik 41, 443 (1927).
- BELL, J. S. "On the Einstein-Podolsky-Rosen paradox", Physics 1, 195 (1964).

- BENNETT, C. H., BRASSARD, G. "Quantum Cryptography: public key distribution and coin tossing", In Proceedings of IEEE International Conference on Computers, Systems and Signal Processing, IEEE, New York, 175 (1984).
- BENNETT, C. H., BRASSARD, G., CRÉPEAU, C., JOZSA, R., PERES, A., WOOTTERS, W. "Teleporting an unknown quantum state via dual classical and EPR channels", Phys. Rev. Lett. 70, 1895 (1993).
- BOHM, D. "Quantum Theory", Prentice Hall, Englewood Cliffs (1951).
- BOHR, N. "O debate com Einstein sobre problemas epistemológico na Física Atômica", in Física Atômica e Conhecimento Humano, Editora Contraponto, RJ (1995).
- BOUWMEESTER, D., EKERT, A., ZEILINGER, A. "The Physics of Quantum Information: quantum cryptography, quantum teleporting, quantum computation", Springer-Verlag (2000).
- CARDOSO, T. F. M. "Integrais de trajetória na MQ", trabalho de conclusão de curso, Universidade Federal do Pará (2010).
- COLORADO. Disponível em: <<https://phet.colorado.edu/en/simulation/legacy/photoelectric>>. Acesso em: 14 jun. 2016.
- COSTA, C. C. "Introdução à MQ de Sistemas Compostos: Estudos sobre Emaranhamento Quântico", trabalho de conclusão de curso, Faculdade de Física, UFPA (2011).
- CRÉPEAU, J. "A Brief history of the T^4 radiation law", In Proceedings HT 2009, 2009 ASME Summer Heat Transfer Conference, San Francisco, California, USA (2009).
- DAS, A. "Lectures on Electromagnetism", Hindustan Book Agency – World Scientific, NJ, 2ª edição (2013)
- DAS, A. "Lectures on Quantum Mechanics", Hindustan Book Agency – World Scientific, NJ, 2ª edição (2012).
- DEUTSCH, D. "Quantum Theory, the Church-Turing Principle and the Universal Quantum Computer", Proceedings of the Royal Society of London A 400, 1818, 97 (1985).

- DOUGAL, R. C. "The presentation of the Planck radiation formula", Phys. Educ. 11, 438 (1976).
- EINSTEIN, A., PODOLSKY, B., ROSEN, N. "Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?", Phys. Rev. 47, 777 (1935)
- FEYNMAN, R. "Simulating physics with computers", Int. Jour. Theor. Phys. 21, 6, 467 (1982).
- GOLDSTEIN, H. "Classical Mechanics", Ed. Pearson, USA (2014).
- GOMES, G., PIETROCOLA, M. "O experimento de Stern-Gerlach e o spin do elétron: um exemplo de quasi-história", Rev. Bras. Ens. Fis. 33, 2604 (2011).
- GRANGIER, P., ROGER, G., ASPECT, A. "Experimental Evidence for a Photon Anticorrelation Effect on a Beam Splitter: a New Light on single-Photon Interferences", Europhysics Letters 1, 173 (1986).
- GRECA, I. M. R. "Construindo significados em Mecânica Quântica: resultados de uma proposta didática aplicada a estudantes de Física Geral". Porto Alegre: Instituto de Física da UFRGS, 2000. (Tese de Doutorado).
- GRECA, I. M., MOREIRA, M. A., HERSCOVITZ, V. E. "Uma proposta para o ensino de Mecânica Quântica, Rev. Bras. Ens. Fis. 23, 444 (2001).
- GRECA, I. M., HERSCOVITZ, V. E. "Introdução à Mecânica Quântica: notas de curso", Textos de apoio ao professor de Física, 13 (2002).
- GREINER, W. "Classical Electrodynamics", Springer, NY (1998).
- GRIFFITHS, D. J. "Introduction to Quantum Mechanics", 2nd edition, New Jersey: Pearson Higher Education Publisher (1994).
- JAMES, A. N. "Photoelectric effect, a common fundamental error", Phys. Ed. 8, 382 (1973).
- LALOE, F. "Do we really understand quantum mechanics? Strange correlations, paradoxes and theorems", Am. Jour. Phys., 69, 655 (2001).

- MANGILI, A. I. História da Ciência e Ensino 6, 32 (2012).
- MCINTYRE, D. H. SPINS OSP JAVA HOMEPAGE. Disponível em: <http://physics.oregonstate.edu/~mcintyre/ph425/spins/index_SPINS_OSP.html>. Acesso em: 20 maio 2016 (2014a).
- MCINTYRE, D. H. "Student handouts". Disponível em: <<http://www.physics.oregonstate.edu/portfolioswiki/doku.php?id=atividades:main&file=spspin1>>. Acesso em: 27 maio 2016 (2014b).
- MONTEIRO, B. Objeto de aprendizagem. Disponível em: <<http://www.fisica.ufpb.br/~romero/objetosaprendizagem/Rived/20EfeitoFotoeletrico/Site/Animacao.htm>>. Acesso em: 27 maio 2016 (2014b).
- MEHRA, J., RECHENBERG, H. "The historical development of quantum theory", Volume 1, parte 1, Springer, New York (1982).
- NETO, N. P. "Teorias e Interpretações da Mecânica Quântica, Coleção CBPF – Tópicos de Física, Editora Livraria da Física (2010).
- NIELSEN, M. A., CHUANG, I. L. "Quantum Computation and Quantum Information", Cambridge University Press (2000).
- OLIVEIRA, I. S. "Física Moderna para iniciados, interessados e aficionados", Editora Livraria da Física, São Paulo, 2ª edição (2010).
- PEREZ, J. F. "Notas de aula do curso de Mecânica Quântica", Instituto de Física, Universidade de São Paulo (1995).
- PESSOA JR., O. "Conceitos de Física Quântica", Editora Livraria da Física, São Paulo, 2ª Edição (2005).
- PINHEIRO, L. A., COSTA, S. S. C., MOREIRA, M. A. "Do átomo grego ao Modelo Padrão: os indivisíveis de hoje", Textos de Apoio ao Professor de Física 22 (2011)
- PIZZA, A. F. R. "Sistemas quânticos compostos e emaranhamento, sistemas quânticos abertos e decoerência", Notas de aula, Depto. de Física Matemática – Instituto de Física – USP (2009).

- RICCI, T. F., OSTERMANN, F. "Uma Introdução Conceitual à MQ para Professores do Ensino Médio", Textos de Apoio ao Professor de Física 14 (2003).
- RUTHERFORD, E., RATCLIFFE, J. A. "Forty years of Physics", In NEEDHAN, P., PAGEL, W. "Background to Modern Science", Cambridge University Press (1938).
- SAKURAI, J. J. "Modern Quantum Mechanics". Addison-Wesley Publishing Reading (1994).
- SALINAS, S. R. A. Introdução à Física Estatística, Ed. Edusp (1997).
- SCHROEDER D. V. Am. J. Phys. 61, 798 (1993).
- SCHRÖDINGER, E. Annalen der Physik 82, 257 (1927).
- SCHRÖDINGER, E. Proc. Camb. Phil. Soc. 31, 555 (1935).
- SOARES, S., CABRAL, I. P., MOREIRA, M. A. "Sugestões ao professor de Física para abordar tópicos de MQ no Ensino Médio", Textos de Apoio ao Professor de Física 19, 4 (2008).
- SYMON, K. R. "Mechanics", Addison-Wesley Publishing Company (1971).
- TITTEL, W., BRENDEL J., ZBINDEN, H., GISIN, N. "Violation of Bell inequalities by photons more than 10 Km apart", Phys.Rev.Lett. 81, 3563 (1998).
- VILLAR, A. S., CRUZ, L. S., CASSEMIRO, K. N., MARTINELLI, M., NUSSENZVEIG, P. "Generation of bright two-color continuous variable entanglement", Phys.Rev.Lett. 95, 243603 (2005).
- WITAKER, M. A. B. "History and quasi-history in physics education part 1", Phys.Educ. 14, 108 (1979).

