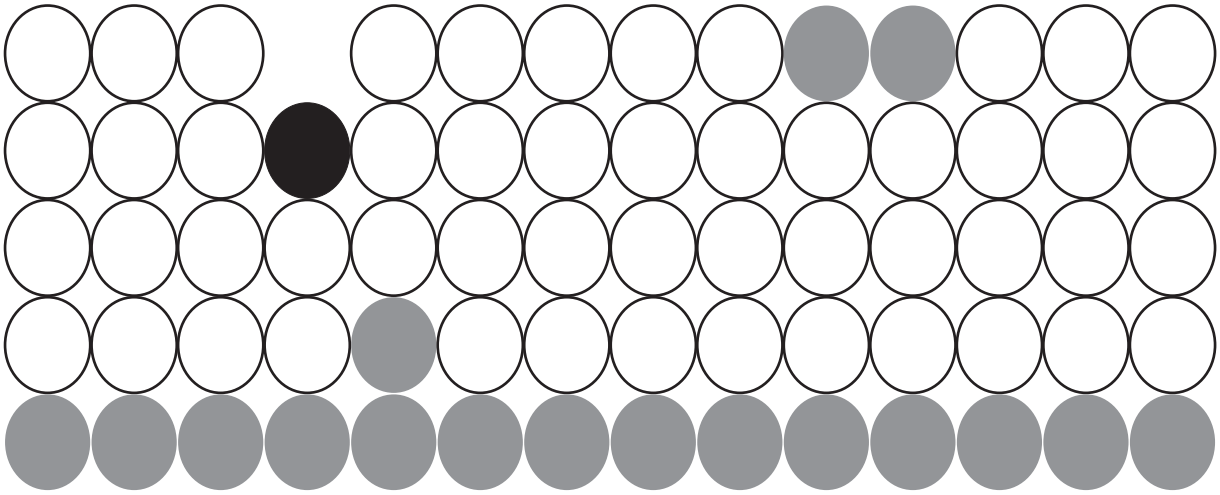
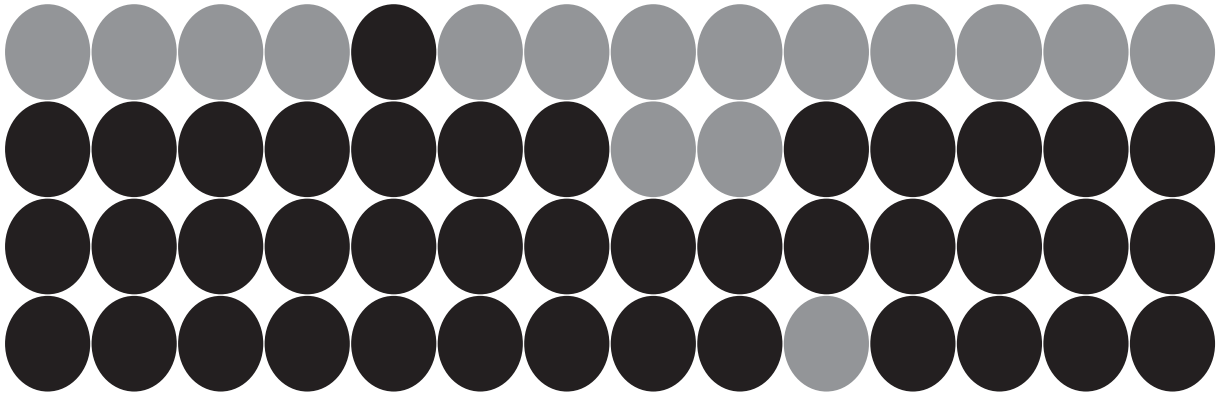
TEXTOS DE APOIO AO PROFESSOR DE FÍSICA

n.13 2002 ISSN 1807-2763



INTRODUÇÃO À MECÂNICA QUÂNTICA
notas de curso

Ileana Maria Greca
Victoria Elnecave Herscovitz



Programa de Pós-Graduação em Ensino de Física

Instituto de Física UFRGS

Série Textos de apoio ao professor de física, nº 13, 2002
PAS – Programa de Atualização em Serviço para Professores de Física
GRUPO DE ENSINO

Editor: Marco Antonio Moreira

CIP-Brasil. Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
(Letícia Strehl; CRB 10/1279)

G789i Greca, Ileana Maria
Introdução à mecânica quântica: notas de curso / Ileana Maria Greca, Victoria Elnecave Herscovitz. – Porto Alegre : Instituto de Física – UFRGS, 2002.
73 p. : il. (Textos de apoio ao professor de física ; n. 13)

1. Mecânica quântica 2. Física geral I. Herscovitz, Victoria Elnecave II. Título

CDU 53
PACS F01.55.

1ª Reimpressão (2005)

Impressão: Waldomiro da Silva Olivo
Intercalação: João Batista C. da Silva

ÍNDICE

ÍNDICE **1**

INTRODUÇÃO **3**

PLANO DA UNIDADE **5**

COMPUTAÇÃO QUÂNTICA **6**

COMPUTAÇÃO CLÁSSICA VS. COMPUTAÇÃO QUÂNTICA 6
A CÉLULA DA COMPUTAÇÃO QUÂNTICA: O QUBIT 7
BIBLIOGRAFIA 9

EFEITO FOTOELÉTRICO **10**

BIBLIOGRAFIA 11

EXPERIÊNCIA PARA OBJETOS QUÂNTICOS SIMPLES **12**

UMA EXPERIÊNCIA COM PARTÍCULAS CLÁSSICAS 12
UMA EXPERIÊNCIA COM ONDAS CLÁSSICAS 13
UMA EXPERIÊNCIA COM PARTÍCULAS QUÂNTICAS 14
BIBLIOGRAFIA 16

ONDE ANDA O ELÉTRON? **17**

PRINCÍPIO DE INCERTEZA **19**

BIBLIOGRAFIA 20

EXPERIÊNCIA DE STERN-GERLACH. **21**

SPIN DO ELÉTRON. 23
OBSERVÁVEIS 23

EQUAÇÃO DE MOVIMENTO PARA OBJETOS QUÂNTICOS. **27**

EQUAÇÃO DE AUTOVALORES DA ENERGIA 29
BIBLIOGRAFIA 30

AUTOVALORES DE ENERGIA - APLICAÇÕES. **31**

BIBLIOGRAFIA 33

PARTÍCULA EM UMA CAIXA - POÇO INFINITO **34**

BIBLIOGRAFIA 37

DEGRAU DE POTENCIAL. **38**

POTENCIAL DEGRAU (BARREIRA DE POTENCIAL). 38
BARREIRA FINITA 40

ÁTOMO DE HIDROGÊNIO **44**

NÍVEIS DE ENERGIA DO ELÉTRON NO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO 45
FUNÇÕES DE ONDA DO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO 47
BIBLIOGRAFIA 50

"IMPRESSÕES DIGITAIS" DOS ÁTOMOS **51**

SALTO QUÂNTICO 52
PARADOXO DO GATO DE SCHRÖDINGER 54
BIBLIOGRAFIA 56

COMO SABER SOBRE A EXISTÊNCIA DE UM OBJETO SEM INTERAGIR COM ELE. **57**

BIBLIOGRAFIA 61

TELEPORTAÇÃO **62**

PASSAGEM AO MUNDO MACROSCÓPICO 64
BIBLIOGRAFIA 65
LABORATÓRIO COMPUTACIONAL 1 **66**
BIBLIOGRAFIA 68
LABORATÓRIO COMPUTACIONAL 2 **69**
BIBLIOGRAFIA 71

Introdução

Os textos aqui apresentados correspondem a um roteiro de ensino da Mecânica Quântica em disciplinas introdutórias de Ciências Exatas. Os textos que compõem a proposta, originalmente implementada durante um período total de 24 horas-aula em disciplina de Física Geral, podem, em nosso entender, ser adotados e adaptados a outras situações, inclusive como complemento de cursos mais tradicionais.

Em linhas gerais, a proposta visa tornar "palpáveis" os primeiros princípios da Mecânica Quântica - superposição linear de estados, princípio de incerteza (dualidade onda-partícula), caracter probabilística de resultados de medida - para que não se convertam em simples relações matemáticas a serem lembradas, com longínqua relação com o mundo físico, senão que adquiram para os estudantes uma "realidade" física. Consideramos que uma forma ágil de implementar esta estratégia pode ser, mesmo em cursos introdutórios, a de salientar as características quânticas dos sistemas ao invés de buscar analogias clássicas, como ocorre freqüentemente a ponto de ter-se tornado tradicional. Para atingir este objetivo, não só os princípios fundamentais são apresentados como determinantes de uma outra realidade física, diferente da clássica, mas são também apontadas as conseqüências destes princípios sobre a nova realidade, utilizando-se para isto informações sobre algumas das experiências com uma ou poucas partículas, disponíveis hoje em dia, que são conceitualmente simples. Como se pode ver nos textos, a apresentação fenomenológica relacionada aos princípios tem um papel fundamental na proposta. Além disto, as experiências discutidas apontam, muitas vezes, para desdobramentos tecnológicos[1] que podem ser explicados em termos relativamente simples a partir dos princípios fundamentais, dando à Mecânica Quântica um halo de modernidade muitas vezes ausente nos cursos introdutórios.

Aprender uma nova forma de perceber os fenômenos físicos exige um forte envolvimento por parte dos estudantes. Por isso, na implementação original da proposta, a discussão dos alunos em pequenos grupos foi um elemento chave. Assim, os textos foram elaborados de modo a não ser lidos em forma passiva, intercalando-se perguntas que propiciavam completar-se o raciocínio exposto, estimulando a discussão dos estudantes entre si e com o professor.

Preferimos deixar os textos na sua forma original[2], para estimular o professor a não utilizá-los de modo passivo, em que os estudantes recebem respostas e raciocínios prontos.

Em relação aos conteúdos dos textos, eles tratam, como já indicado, basicamente sobre o conceito de superposição linear de estados, princípio de incerteza e caráter probabilístico dos resultados de medida, princípios quânticos que projetam uma visão radicalmente diferente da clássica sobre o mundo microscópico. As experiências apresentadas retomam uma e outra vez estes princípios, justamente para habituar ao estudante com às conseqüências de tais princípios sobre a realidade física.

[1] Só para citar um par de exemplos, pense-se na computação quântica e na teleportação.
[2] Versões modificadas dos mesmos foram usadas por nós em posteriores experiências de ensino aprendizagem, mas a essência do projeto não sofreu alteração.

Em relação às ferramentas matemáticas utilizadas, escolhemos trabalhar com a ágil notação de bras e kets de Dirac. Embora não usual para os estudantes do grupo em foco, a notação não foi um impedimento para a compreensão dos alunos. Ao contrário, uma vez que foi aceita como uma outra forma de denotar vetores de estado, tornou-se de grande utilidade na discussão, por ser compacta e rica. Considerando que a proposta original se destinava à utilização por um período de um mês apenas, não nos aprofundamos na introdução de conceitos de espaços vetoriais, o que certamente seria interessante em cursos de maior duração.

Ainda em relação à descrição matemática da teoria, dada a pouca familiaridade dos estudantes com o trato de equações diferenciais, após introduzir o conceito de (equação de) autovalores e de discutir a questão da quantização da energia, resultou interessante e importante a utilização de recursos computacionais para mostrar como a quantização está regulada pelas soluções fisicamente aceitáveis para a função de onda associada aos diversos sistemas analisados. Em particular tais recursos propiciaram a visualização das soluções da equação de autovalores de energia para potenciais constantes por regiões, mas variáveis de modo descontínuo de uma região a outra (tunelamento, por exemplo). Os dois textos sob o título de laboratórios computacionais tratam sobre estas questões.[3]. Uma das vantagens do uso deste tipo de recursos é que permite "visualizar" rapidamente o módulo das soluções matemáticas, possibilitando assim que a discussão em aula se centralize no conteúdo físico das soluções, discussão esta que se enriquece pois os programas permitem variar diferentes parâmetros[4].

Ao final de cada texto consta a bibliografia pertinente, o que permite ao professor ou a estudantes mais interessados ampliar o material que ali se encontra. A bibliografia torna transparente, também, que o material básico foi bastante utilizado nos textos, nossa preocupação dominante tendo sido a de compactá-lo sem perda de clareza, sempre que possível.

[3] Os *softwares* utilizados nestes exemplos, desenvolvidos pelo ***Physics Education Research Group*** da Kansas State University, dos EUA, dentro do projeto "Visual Quantum Mechanics" estão disponíveis na Internet e podem ser obtidos no site http://www.phys.ksu.edu/perg/vqm . Atualmente existem, no mesmo site, versões novas do curso.

[4] Tais laboratórios facilitaram, em muito, a compreensão da interpretação probabilística da função de onda.

Plano da unidade

1ª aula: Descrição da unidade e forma de avaliação. Pré-teste.
Computação quântica.(*Para mostrar modernidade e postulados fundamentais*)

2ª aula: Efeito fotoelétrico. (*Demonstração e explicação da experiência*)
Experiência de Young para objetos quânticos simples. (*Dualidade onda partícula, relação de De Broglie)*

3ª aula: Experiência de Young. (*Continuação da aula anterior*).
Princípio de Incerteza.

4ª aula: Experiência de Stern-Gerlach. (*Sistemas de dois estados, estado de um sistema quântico, superposição de estados)*
Observáveis. Resultados de medições. (R*elação entre estado de um sistema quântico e resultado de uma e de várias medidas)*

5ª aula: Equação de Schrödinger. Distribuição de probabilidades. (*Estado de um sistema quântico, resultado de medições)*
Equação de autovalores.(*Determinação dos valores possíveis de um dado observável)*

6ª aula: Autovalores de energia. (*Diferença entre os estados possíveis de energia para a Mecânica Clássica e para a Mecânica Quântica)*
Poço infinito. (*Discretização de energia para estados ligados, superposição de estados, Princípio de Incerteza)*

7ª aula: Degrau de potencial. (*Soluções não permitidas classicamente*)
Tunelamento. (*Aplicações práticas*)

8ª aula: Átomo de Hidrogênio. (*Níveis de energia do elétron, funções de onda do átomo de Hidrogênio, localização e estado fundamental do elétron)*

9ª aula: Impressões "digitais" dos átomos. (*Espectros de emissão e saltos quânticos*)
Paradoxo do Gato de Schrödinger. (*Superposição de estados e colapso da função de onda)*

10ª aula: Medições livres de interação. (*Dualidade onda partícula*)
Laser (experimental) e átomos confinados.

11ª aula: Teleportação. (*Superposição de estados e Princípio de Incerteza)*
Passagem ao mundo clássico. (*Principio de Correspondência e Descoerência*)

12ª aula: Entrega dos conceitos. Pós-teste. Avaliação do curso.

Laboratório de computação: Dois trabalhos práticos sobre estados ligados e tunelamento, fora do horário de aula.

COMPUTAÇÃO QUÂNTICA[5]

Os computadores existentes atualmente parecem estar chegando a seus limites ótimos. De um lado, razões tecnológicas não permitem que seus *chips* sejam indefinidamente diminuídos de tamanho - por exemplo, não tem sentido pretender fabricar transistores ou fios mais finos que os átomos que os constituem - e de outro, por motivos práticos, fabricar *microchips* mais poderosos pode tornar-se inconvenientemente caro.

Por estas e outras razões é importante encontrar saídas alternativas. Uma das cogitadas é a chamada computação quântica, um dos últimos "*booms*" nas Ciências. O primeiro trabalho mais completo sobre a possibilidade de usar-se computação quântica em vez de clássica foi publicado por David Deutsch em 1985, mas recém em 1994 o físico Peter Shor mostrou que a idéia "poderia funcionar". Apesar de ainda não se saber se um computador quântico poderá vir a ser construído, é importante discutir suas possibilidades, que estão atreladas aos princípios fundamentais da Mecânica Quântica.

Computação clássica vs. computação quântica

Em geral estamos acostumados a pensar a computação em termos de operações matemáticas e não em termos físicos. No entanto, efetuar uma operação de computação é essencialmente um processo físico. Pense, por exemplo, como é feita em um computador uma conta simples como a soma 2 + 5. Os registros 2 e 5 são em princípio abstratos e antes de se efetuar qualquer operação com eles, devem ser codificados em um sistema físico. Isto pode ser feito de muitas maneiras, dependendo do dispositivo de computação: diferenças de potenciais nas portas de um transistor de um *microchip* de silício, contas nas colunas de um ábaco, impulsos nervosos nas sinapses de um neurônio etc. A computação em si consiste em um conjunto de instruções - o algoritmo - que são desenvolvidas por meio de um processo físico. A execução do algoritmo leva a um resultado - que podemos observar, por exemplo, na tela de um computador - que interpretamos como sendo o número 7. Então, ainda que 2 + 5 = 7 possa ser definido de maneira abstrata, **o processo** prático que nos leva a concluir que 2 mais 5 é igual a 7, é **físico.**

Todos os tipos de computação com os quais o homem está acostumado a trabalhar, desde o ábaco até os supercomputadores, estão organizados segundo as leis da física clássica. No entanto, vivemos em um mundo quântico e objetos quânticos - como veremos no transcorrer destas aulas - se comportam em muitos aspectos de forma bastante diferente dos clássicos. Por exemplo, um sistema quântico pode existir em uma combinação de múltiplos estados físicos com características bem definidas (ao mesmo tempo), a chamada **superposição de estados** . Isto poderia permitir um cenário em que cada estado seguisse um processo de computação diferente e que estes confluíssem para produzir o resultado final. Este "paralelismo quântico", que pode ser alcançado em uma só peça do *hardware* poderia dar aos computadores quânticos, em tese, uma velocidade muito maior do que as alcançadas pelos computadores de hoje. Problemas como o da

[5] A versão aqui incluída destes textos tem sofrido algumas alterações decorrentes de sua utilização e visando sua publicação em separado.

fatoração de números[6] com dezenas e até centenas de dígitos que hoje, nos supercomputadores mais velozes tardariam milhões de anos e que estão sendo, inclusive, trabalhados de forma cooperativa no mundo poderiam, em princípio, ser resolvidos em períodos da ordem de um ano. Com isto, é claro, em contrapartida, a segurança das chaves atuais dos criptosistemas que dependem de números fatorados . . . iria para o espaço.

A célula da computação quântica: o QUBIT

Na computação clássica, o estado de uma unidade de informação - o bit - é especificado por um número: 1 ou 0. Qualquer símbolo - número ou palavra - na computação clássica é representado por uma cadeia de algarismos 1 e 0. O QUBIT - o bit quântico - pode ser representado, por exemplo, por um átomo em um de dois de seus possíveis autoestados de energia. Podemos chamar de 1 ou de 0 a cada um desses estados. Assim 2 qubits podem estar em 4 estados bem definidos (0,0), (0,1), (1,0) e (1,1), como quaisquer dois bits clássicos. Mas, diferentemente dos bits clássicos, cada qubit pode existir também em estados que compreendem **simultaneamente** aquele que chamamos de 0 e aquele que chamamos de 1. Este é um fenômeno intrinsecamente quântico denominado **superposição de estados**. Enquanto (classicamente) um bit existe ***ou*** em 1 ***ou*** em 0, (quânticamente) um qubit pode existir em 1 ***e*** em 0. Isto, quanto aos estados possíveis do qubit.

Quanto ao resultado de uma determinada operação de computação quântica, no entanto, no momento em que procuremos saber qual é este resultado, "obrigaremos" o qubit a responder em um estado definido de energia. Conhecer o resultado da computação é fazer uma medição sobre a unidade de processamento. A **probabilidade** de que, feita essa medição, o qubit se encontre no estado 1 ou no estado 0, é dada por um coeficiente numérico. Ou seja, enquanto não é feita uma medição o qubit poderá estar numa superposição dos estados 1 e 0, mas no momento em que se busca saber o resultado do processo de computação, no momento em que se efetua uma medição, o qubit responde apenas em um daqueles estados. Reside aí o poder da computação quântica: um qubit pode existir em vários estados ao mesmo tempo e informar sobre todos eles. Com isso é possível, em princípio, realizar-se muitas operações em paralelo, usando somente uma unidade de processamento.

Além disto, na computação clássica, o processamento da informação é feito através de portas lógicas. Uma delas é a porta NÃO que nega o estado do sistema, ou seja, se o sistema estava no estado 1 passa ao estado 0 e se estava no estado 0 passa ao estado 1. Na computação quântica, além desta porta podemos ter outras que não têm contrapartida clássica, como a que permite "transformar" o estado 0 em uma superposição de 0 e 1.

O estado de um qubit pode ser representado como

$$\left|qubit\right\rangle = C_0\left|0\right\rangle + C_1\left|1\right\rangle,$$

[6] Cálculo dos fatores primos de um número.

em que $|qubit\rangle$ significa "o estado da unidade de processamento" e C_0 e C_1 são os coeficientes que originam as probabilidades ($|C_0|^2$ e $|C_1|^2$) de, uma vez efetuada uma medição, o qubit estar no estado $|0\rangle$ ou no estado $|1\rangle$. **O estado do qubit logo depois da medição será $|0\rangle$ ou $|1\rangle$ e não mais $C_0|0\rangle + C_1|1\rangle$.**

A questão de que antes de efetuar uma medição o qubit - a unidade de processamento - possa estar em uma superposição de dois estados e que logo depois da medição ele esteja em um só estado de energia é o que em Mecânica Quântica se denomina de **problema da medida**. Por que é um problema? Classicamente ao medir uma certa propriedade de um sistema, por exemplo o momento linear do sistema, o valor obtido é o do estado no qual o sistema se encontrava antes da medição. Em Mecânica Quântica, a **freqüência** do resultado da medida de uma propriedade do sistema está **probabilisticamente** relacionada com o estado no qual o sistema se encontrava antes da medição.

Vejamos um exemplo para um sistema de dois qubits. Suponhamos que o sistema esteja no estado $|\Psi\rangle = (1/2)^{1/2} (|\mathbf{0}\rangle + |\mathbf{3}\rangle)$, isto é, se expressarmos $|\mathbf{0}\rangle$ e $|\mathbf{3}\rangle$ em códigos binários, $|\Psi\rangle = (1/2)^{1/2} (|0\rangle|0\rangle + |1\rangle|1\rangle)$. ($|\mathbf{0}\rangle$ e $|\mathbf{3}\rangle$ são denominados de autoestados do sistema.)

$(1/2)^{1/2}$ é o valor de cada um dos coeficientes C_0 e C_1 que conduzem, ambos, à probabilidade (1/2) de que o sistema esteja em um de seus dois autoestados. Suponhamos também que nossa forma de medir seja ouvir os "cliques" de dois detetores, um detetor superior que clica para o estado $|1\rangle$ e um detetor inferior que clica para o estado $|0\rangle$. Para o estado considerado acima, o resultado da medição será, com igual probabilidade, ouvir dois cliques no detetor superior ou dois cliques no detetor inferior. Não ouviremos um clique no detetor de cima e um clique no detetor de baixo ou vice-versa.

Combinando a propriedade da superposição de estados com outras, é possível demonstrar que um computador quântico poderia resolver o problema da fatoração, ou seja achar os fatores primos de um número, de forma muito mais rápida do que qualquer computador clássico.

Apesar de todas as suas possibilidades, a realização experimental de um computador quântico ainda não é factível. Para executar uma computação de fato, é preciso manter a superposição de estados ao longo de todo o processo de cálculo. O problema é que isto não é uma tarefa fácil. Por uma propriedade chamada **descoerência** (propriedade, aliás, que impede que possamos observar na escala macroscópica a superposição de estados) a superposição dos estados quânticos se desvanece muito facilmente, porque qualquer interação do sistema físico com o meio, por exemplo, a colisão de um átomo com outro átomo, pode levar o sistema a "optar" por um só dos estados inicialmente superpostos. Para lograr conseguir a computação quântica os cientistas deverão lutar contra este fenômeno, entre outros problemas.

Vimos, então, que propriedades muito diferentes das clássicas (absolutamente novas para nós) acontecem no mundo microscópico descrito pela Mecânica Quântica e

que essas propriedades podem ser tecnologicamente muito importantes (no caso exemplificado, para melhorar nossos atuais sistemas de processamento). É útil salientar que ainda que não saibamos bem como construir um computador quântico, as idéias da computação quântica mostram que há uma forte ligação entre computação e Física Quântica. Isto pode ajudar os cientistas e engenheiros da área a resolver problemas que encontram quando tentam projetar *microchips* convencionais com tamanho reduzido, pois ao adentrar no mundo microscópico se entra no regime da Mecânica Quântica.

Exercícios

1- Escreva em código binário os autoestados $|\mathbf{0}\rangle, |\mathbf{1}\rangle, |\mathbf{2}\rangle e |\mathbf{3}\rangle$, relativos a conjuntos de dois qubits.
2- No exemplo do texto, por que não é possível ouvir um clique no detector de cima e um clique no detector de baixo, ou vice-versa?
3- Apresente um exemplo, em código binário, de estados de dois qubits em que é possível ouvir um clique no detector de cima e um clique no detector de baixo. Qual é a probabilidade de o sistema estar no estado $|\mathbf{2}\rangle$, no seu exemplo?
4- Mostre que três qubits podem estar em 8 (2^3) estados bem definidos. Consequentemente n-qubits podem estar em 2^n estados, ou seja, n-operações elementares podem gerar 2^n situações distintas. Qual é a importância disto para a fatoração?
5- Relacione e discuta as propriedades quânticas citadas no texto e em quê são diferentes das que você conhece da Física Clássica.

Bibliografia

Este texto está baseado nos seguintes artigos, que você pode consultar se quiser mais informações sobre a computação quântica:

Quantum physics and computers, de Adriano Barenco, *Contemporary Physics*, 1996, volume 37, n. 5, pp. 375-389.

Quantum computing with molecules, de Neil Gershenfeld e Isaac Chuang, *Scientific American*, June 1998, pp. 50-55.

Quantum computing, de Valerio Scarani, *American Journal of Physics*, 1998, volume 66, n. 11, pp. 956-960.

EFEITO FOTOELÉTRICO

Desde 1887 se sabia, graças às pesquisas de H. Hertz, que a intensidade da descarga elétrica entre dois eletrodos aumentava quando iluminados por luz ultravioleta. Este fenômeno foi denominado de efeito fotoelétrico, devido a que os elétrons responsáveis por essa corrente eram "arrancados" da superfície do metal dos eletrodos pelo uso de radiação luminosa. A emissão de elétrons depende da intensidade da radiação incidente sobre o metal, aumentando quando esta aumenta[7].

Em um trabalho publicado em 1905, Albert Einstein propôs que, em algumas circunstâncias, a luz poderia ser pensada como constituída de "pacotes (quanta) de luz". Na sua argumentação, Einstein deduziu que, para o caso do efeito fotoelétrico, existiria uma dependência entre a emissão fotoelétrica e a freqüência da radiação incidente: para cada substância existiria um *umbral* para a freqüência da radiação, de modo que se a radiação incidente possuísse uma freqüência menor que a freqüência limite, não seriam emitidos elétrons, independentemente da intensidade da radiação. Assim, a energia necessária para *arrancar* um elétron do material seria absorvida em um **único** processo de interação entre a radiação e o elétron, de modo que se a radiação incidente não possuísse a energia necessária, determinada pela sua freqüência, não seria possível que o elétron escapasse do material. Para isto, a radiação eletromagnética não poderia ser considerada como uma onda, senão que seria entendida se considerada como constituída de partículas.

Denominando de E_k a energia cinética do elétron arrancado do metal, tem-se $E_k = E - \phi$, onde E é a energia absorvida pelo elétron e ϕ a energia mínima necessária para escapar do material. Considerando a radiação incidente como constituída por partículas, a energia das mesmas pode ser escrita como $E = h\nu$, onde ν é a freqüência da radiação e h é uma constante universal, a constante de Planck (dimensão: energia x tempo). $E_k=0$ corresponde, então, à freqüência mínima ν_0 que deve ter a "partícula" constituinte da radiação (o quantum de luz) para gerar a energia que o elétron deve absorver para escapar do material, isto é,

$$h\nu_0 - \phi = 0, \qquad \text{ou seja, } \nu_0 = \phi/h$$

Se a freqüência da radiação incidente for menor que ν_0, não haverá emissão de elétrons. Esta dependência com a freqüência não podia ser explicada com as teorias clássicas (disponíveis até então). Se os elétrons precisavam de uma determinada energia para serem arrancados do material e assim originar a corrente esta energia, segundo a teoria clássica, ir-se-ia acumulando até alcançar, pela absorção contínua de energia, o valor necessário, de forma que os elétrons poderiam ser arrancados ainda que a freqüência da radiação incidente fosse baixa, desde que a radiação fosse intensa.

Alguns anos depois, vários físicos experimentais tentaram verificar a relação proposta por Einstein e, ao redor de 1916, conclui-se que os resultados experimentais

[7] Em 1902, o físico Philipp Lenard provou que a fotocorrente é proporcional à intensidade da luz e independente de seu comprimento de onda. Não investigou, no entanto, a relação entre a energia cinética dos elétrons emitidos (E_k) e a freqüência.

coincidiam com a previsão de Einstein que introduz a hipótese de que a radiação é constituída por fótons[8].

Bibliografia

A sense of History: history of science and the teaching of introductory quantum theory, de Helge Kragh, *Science & Education*, 1992, v. 1, p. 349-363.

[8] Apesar da confirmação experimental, uma parte importante dos físicos da época, incluindo alguns dos que tinham realizado a comprovação experimental da relação, não aceitavam a proposta de que a radiação estivesse constituída de partículas.

EXPERIÊNCIA PARA OBJETOS QUÂNTICOS SIMPLES

O efeito fotoelétrico e a superposição de estados, que têm reflexos sobre a computação quântica, são dois exemplos de como o mundo quântico se comporta de forma freqüentemente "não-clássica". No caso do efeito fotoelétrico vimos como a teoria ondulatória (clássica) da luz, que explica os fenômenos de interferência e difração, deve ser substituída por uma teoria que atribua características de partícula para a luz.

Discutimos a seguir certos comportamentos das partículas no mundo quântico e tentamos definir algumas características dos "objetos" quânticos (elétrons, fótons, prótons, neûtrons etc.).

Uma experiência com partículas clássicas

Imaginemos um dispositivo como o que aparece na Fig. 1, similar ao da experiência de interferência de Young da ótica clássica. No presente caso a fonte é uma metralhadora giratória - com um ângulo de giro grande - que dispara balas indestrutíveis (que não podem se fragmentar) em vários direções, sendo a taxa de disparos constante. À frente da metralhadora encontram-se duas paredes. A primeira tem duas fendas grandes o suficiente para deixar passar só uma bala de cada vez. Frente à segunda parede há um detector (por exemplo, uma caixa de areia) que se move para cima e para baixo, e que permite determinar a probabilidade de que uma bala que passa pelas fendas possa atingir a segunda parede a uma altura *x* do centro. Falamos de probabilidade pois como a metralhadora atira balas ao acaso não sabemos de antemão para onde elas irão. A definição de probabilidade que estamos usando é a de razão entre o número de balas que chegam ao detector num determinado período de tempo e o número total de balas que atingem a segunda parede nesse mesmo período. A distribuição de balas na direção vertical (eixo *x*) quando apenas a fenda 1 está aberta $P_1(x)$, é da forma vista no diagrama b, com máximo no ponto que está em linha reta com a metralhadora e com o centro da fenda 1. Obtemos uma curva simétrica a esta, $P_2(x)$, se apenas a fenda 2 está aberta. Quando as duas fendas estão abertas a distribuição de probabilidades, P_{12}, como esperaríamos, tem seu máximo em $x = 0$ sendo $P_{12} = P_1 + P_2$, ou seja, o efeito das duas fendas abertas é a soma dos efeitos correspondentes a cada uma delas aberta. As hipóteses feitas conduzem ao que segue.

- Não podemos detectar uma fração de bala.
- Cada bala ou passa pela fenda 1 ou passa pela fenda 2.

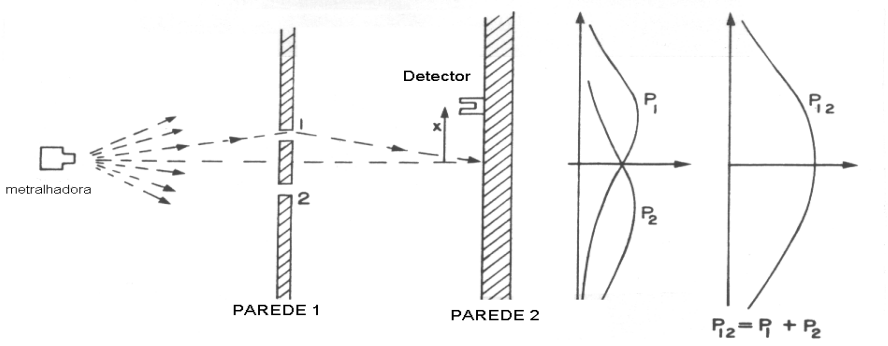


Figura 1

Exercícios

1. O que se observa na segunda parede, na experiência com partículas clássicas, se a taxa de disparos diminuir?
2. Que propriedades você considera mais marcantes em uma partícula em Física Clássica?

Uma experiência com ondas clássicas

Utilizemos agora um dispositivo similar ao anterior (Fig. 2), mas cuja fonte é a fonte pontual de ondas da água (por exemplo, uma bolinha que sobe e desce sobre uma superfície da água, gerando ondas circulares). A segunda parede é construída de modo a não permitir que as ondas sejam refletidas. Neste caso, o detector mede a "intensidade" do movimento. Diferentemente do caso anterior, em que as balas chegavam ao detector uma a uma, agora a intensidade pode ser detectada em valores variáveis, pois a intensidade de uma onda pode variar continuamente. $I_1(x)$ mede a intensidade das ondas detectadas quando apenas a fenda 1 está aberta e I_2 (x) mede a intensidade quando apenas a fenda 2 está aberta. Lembremos que a Intensidade I de uma onda é igual ao módulo ao quadrado da sua amplitude $I(x) = |\varphi(x)|^2$. Portanto se $I_{12}(x)$ é a intensidade da onda quando as duas fendas estão abertas simultaneamente

$I_{12}(x) = |\varphi_1(x) + \varphi_2(x)|^2 = I_1(x) + I_2(x) + 2\,[I_1(x).I_2(x)]^{1/2} \cos\theta$, onde $\cos\theta$ é a diferença de fase entre as contribuições das duas frentes de ondas que resultam da difração da frente de onda original nas fendas. Observemos que este é o mesmo resultado obtido para a experiência de Young com ondas luminosas. O último termo é o termo de interferência, que faz com que a curva I_{12} tenha a forma característica que aparece na parte c da Fig.2.

Decorrente disto, em geral $I_{12}(x) \neq I_1(x) + I_2(x)$, e o valor de I_{12} dependerá de as frentes de onda que passam por 1 ou por 2 estarem ou não em fase. Se estiverem em fase, interferirão construtivamente e se estão defasadas, interferirão destrutivamente. Fechando uma das fendas a intensidade em um ponto x do anteparo pode aumentar ou diminuir.

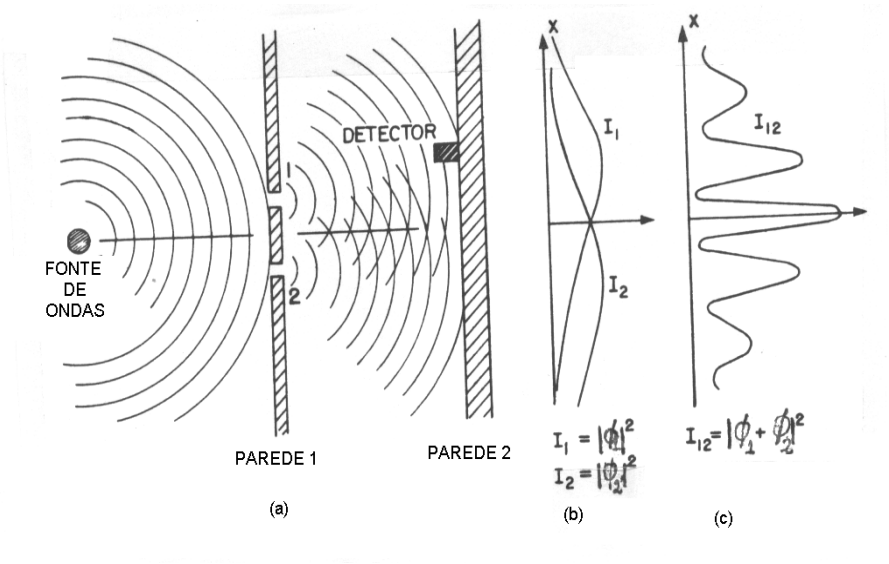


Figura 2

Exercícios

3. O que se observa na segunda parede, na experiência com ondas clássicas, se a intensidade da fonte luminosa diminuir?
4. Que propriedades você considera mais marcantes em uma onda em Física Clássica?

Uma experiência com partículas quânticas

Voltemos a usar o dispositivo da experiência de interferência, agora com uma fonte que emite partículas quânticas (por exemplo, um filamento quente que emite elétrons). O detector pode ser um contador Geiger, que permite amplificar em escala macroscópica o efeito dos elétrons que chegam até ele[9].

A primeira coisa que se observa é que o detector nunca registra "pedaços" de elétrons mas sempre um número inteiro deles, como na primeira das nossas experiências, a das partículas clássicas. Se a fonte for suficientemente fraca, pode-se fazer com que os elétrons cheguem um a um até o detector. Sua chegada acontece ao acaso e podemos então calcular P_1 e P_2, tal como aparecem na parte b da Fig. 3. No entanto, quando se deixam as duas fendas abertas, a distribuição de probabilidade P_{12} depois de um período de tempo não é igual à soma das distribuições de probabilidade $P_1 + P_2$ como no caso das partículas clássicas, senão que aparece uma figura de interferência como no caso das intensidades da experiência com ondas clássicas!!! Se fecharmos qualquer uma das fendas, a distribuição de probabilidades pode aumentar ou diminuir, como no caso das intensidades das ondas clássicas.

[9] Os efeitos que descreveremos aqui já foram observados com elétrons (1961), com nêutrons (1988) e com átomos (1991).

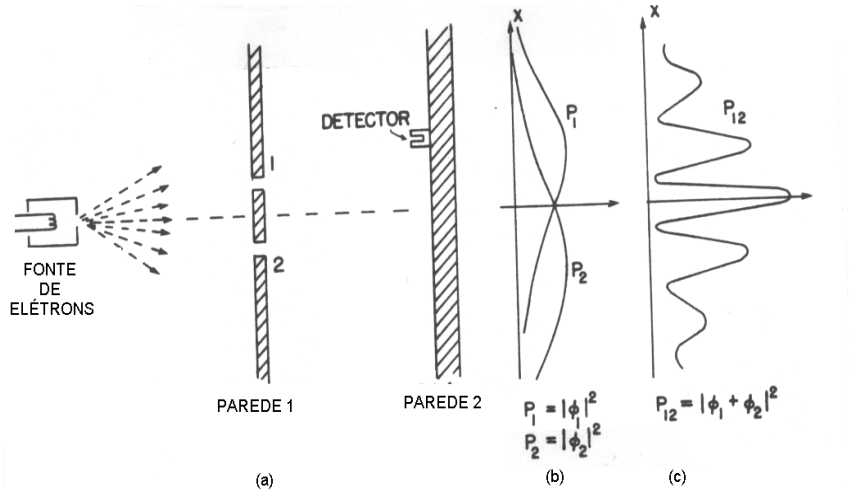


Figura 3

Ou seja, os elétrons (e outras partículas elementares, como por exemplo o fóton), chegam ao detector inteiras, como as partículas clássicas indestrutíveis, mas a distribuição de probabilidade de chegada deles é similar à distribuição de intensidade das ondas clássicas. **AS PARTÍCULAS QUÂNTICAS, então, NÃO SÃO NEM PARTÍCULAS CLÁSSICAS NEM ONDAS CLÁSSICAS. No entanto este comportamento aparentemente estranho pode ser explicado se aceitarmos que, em vez de seguir as leis da Física clássica, os objetos quânticos seguem outras leis, onde se inclui a chamada equação de Schrödinger.**

As propriedades "ondulatórias" reveladas no experimento de Young, e em outros, permitem associar a estes objetos quânticos (fótons, elétrons, prótons, píons, etc.) um comprimento de onda que é obtido pela seguinte relação $\lambda = h/p$, onde h é uma constante denominada constante de Planck e cujo valor é $6{,}63.\ 10^{-34}$ joule.seg, ou $4{,}14.10^{-15}$ eV.s (dimensões de energia x tempo) e p é o momento linear da partícula. Esta relação é denominada de De Broglie e vincula propriedades de partículas (momento) com propriedades ondulatórias (longitude de onda).

Exercícios

5. Compare $P_1(x)$ e $P_2(x)$ nas três experiências.
6. Procure descrever como acontece a chegada dos elétrons no segundo anteparo quando as duas fendas estão abertas.
7. O que se observaria, na segunda experiência, se a fonte de ondas fosse uma fonte luminosa e emitisse um fóton por vez?
8. É freqüente ler-se que uma característica da Mecânica Quântica é a dualidade onda-partícula. Analise essa questão à luz do que foi visto nesta aula.
9. Se a Mecânica Quântica descreve toda a matéria, por que não observamos os padrões de interferência na primeira experiência? (Partículas macroscópicas, balas)

Bibliografia

"The Feynman Lectures on Physics", Volume III, R.P. Feynman, R. Leighton & M. Sands. Addison-Wesley Publishing Company, 1965.
"Curso de Física Básica", Volume IV, M. Nussenzveig, Editora Edgard Blüchter, 1998.

ONDE ANDA O ELÉTRON?

O padrão de interferência que se observa no caso da experiência de Young com elétrons não é o que "intuitivamente" esperaríamos encontrar. Ao descrever a experiência com partículas clássicas, vimos que fazia sentido dizer que as partículas ou passam pela fenda 1 ou passam pela fenda 2. Mas o que acontece se tentamos "ver" por qual fenda passam os elétrons? Utilizemos novamente o dispositivo da experiência de interferência de Young agregando uma fonte luminosa atrás da primeira parede e entre as duas fendas (Fig. 1). Como as cargas elétricas espalham a luz, cada vez que um elétron passe perto da fonte luminosa, espalhará um pouco de luz na direção de nossos olhos. O espalhamento acontecerá mais perto da fenda 1 ou da fenda 2, conforme por onde passe o elétron, de forma que podemos "ver" por onde passou. Então, cada vez que passe um elétron por uma das fendas acontecerá um clarão, seguido de um "clique" no detector. Se baixamos, além disto, a intensidade do feixe de elétrons de forma que a fonte emita só um elétron por vez, mantendo a intensidade da luz forte o suficiente para que sempre ocorram clarões, o que se observa é que os clarões são oriundos **ou** da fenda 1 **ou** da fenda 2. Nunca são observados clarões simultâneos das duas fendas. Chamemos de P_1 ao número de cliques quando o elétron passa pela fenda 1 e P_2 ao número de cliques quando o elétron passa pela fenda 2. Como a experiência é feita com as duas fendas abertas simultaneamente, P_{12} será a soma de todos os clarões (cliques), tanto os correspondentes aos elétrons que passam pela fenda 1 quanto os correspondentes aos elétrons que passam pela fenda 2. Ou seja, $P_{12} = P_1 + P_2$, sem termo de interferência! Ou seja, quando "vemos" os elétrons, isto é, quando "vemos" por qual fenda os elétrons passam, a distribuição total dos mesmos, P_{12}, é diferente de quando "não vemos" os elétrons.

Por que o efeito de interferência é destruído? Podemos pensar que o efeito de interferência é destruído porque a intensidade da luz da fonte usada é muito forte e tentar novamente, agora com luz menos intensa. No entanto, lembrando do efeito fotoelétrico, sabemos que os clarões de luz não serão mais fracos (todos eles correspondem a um fóton) mas sim que, às vezes, poderemos ouvir um clique no detector e não "ver" nenhum clarão. Teremos assim elétrons "vistos", que passam pela fenda 1, elétrons "vistos", que passam pela fenda 2 e elétrons "não vistos", que não sabemos por onde passam. Os resultados[10] mostram que para os elétrons "vistos", a distribuição de probabilidade continua a ser dada por $P_{12}(x) = P_1(x) + P_2(x)$, enquanto para os elétrons "não-vistos", a distribuição de probabilidades têm também a contribuição do termo de interferência.

[10] Experimentos equivalentes foram realizados em 1991 para fótons e em 1998 para elétrons.

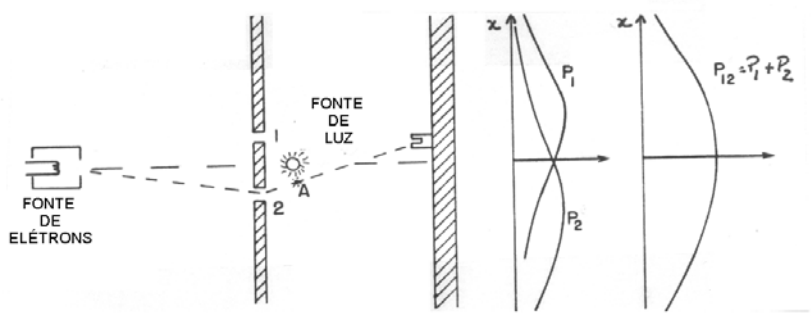


Figura 1

Exercícios

1. Por que, na experiência relatada, pode-se não ver um clarão e sim ouvir um clique , quando diminui a intensidade da luz utilizada?
2. Discuta o que aconteceria se, em vez de diminuir a intensidade da luz, diminuímos a sua energia (freqüência)?

Em resumo quando em experiências como a descrita é possível afirmar que a partícula quântica passou por um dado local, o padrão característico de interferência é destruído. Ou ainda: só se tem o padrão de interferência quando não se pode afirmar por qual das fendas o elétron passou. Seguindo um paralelismo com o caso ondulatório clássico, diríamos que só ocorre interferência se forem geradas amplitudes (de probabilidade) com diferença de fase nas duas fendas.

A probabilidade de um evento é dada pelo módulo ao quadrado de uma quantidade que é chamada de amplitude de probabilidade, de forma que se acontecem vários eventos, a probabilidade total é o módulo ao quadrado da soma das amplitudes individuais. É por isso que aparece o termo de interferência.

Esta questão é importante também porque se refere à influência do processo de observação sobre o resultado observado. Como apontado por Dirac, isto permite estabelecer uma escala "absoluta" de tamanho: **o mundo atômico e subatômico é pequeno, no sentido absoluto, porque qualquer medição efetuada nessa escala usará recursos da mesma escala e poderá afetar o resultado, de forma que é preciso sempre indicar como estão sendo observados os fenômenos**. Ou seja, na escala atômica e subatômica existem limitações absolutas às possibilidades de medição. Lembrando da relação de De Broglie podemos também dizer que a medida em que as ações típicas de um sistema ([energia].[tempo]) se tornam muito maiores do que a constante de Planck, deixa-se de observar estas limitações.

Exercício

3. O que, na sua opinião, causa a mudança de comportamento dos elétrons no experimento relatado, de modo a destruir o padrão de interferência quando o elétron é visto em uma das fendas?

Princípio de Incerteza

No experimento descrito acima, não é possível, simultaneamente, dispor de luz de forma a saber por qual fenda passou o elétron e não perturbar o elétron. Esta dificuldade é intrínseca à Mecânica Quântica, e se relaciona com o chamado Princípio de Incerteza, proposto por Heisemberg. Na experiência descrita o Princípio diria: É impossível ao mesmo tempo saber por qual fenda passou o elétron, e não destruir o padrão de interferência..

A forma tradicional do Princípio de Incerteza na experiência aqui relatada é: Se se faz uma medição sobre um objeto quântico e se pode determinar a componente p_x de seu momento com uma incerteza Δp_x, não se pode, ao mesmo tempo, conhecer a componente x da posição com incerteza Δx menor que $h/\Delta p_x$, sendo h a constante de Planck. Este Princípio é um dos pilares da Mecânica Quântica, que salienta que não é possível ter-se, como na Mecânica Clássica, valores definidos para duas grandezas conjugadas (como posição e momento, tempo e energia) em um estado quântico. Este fenômeno é independente da precisão dos sistemas de medição. Ou seja, esta é uma impossibilidade imposta pela própria Natureza. As relações de incerteza determinam, então, a ordem de grandeza dos limites a partir dos quais não é mais possível aplicar vários dos conceitos da Física Clássica.

Discutiremos a seguir qualitativamente o Princípio de Incerteza numa situação particular. Suponhamos que se tem uma fonte de elétrons e duas paredes, a primeira delas com uma fenda (Fig. 2). A fonte está afastada o suficiente para garantir que os elétrons cheguem perpendiculares à parede 1, ou seja, tem momento $p_x = p$ na direção *x* e $p_y = 0$. Portanto conhece-se seu momento na direção *y* com precisão ($\Delta p_y = 0$), mas não se sabe onde os elétrons estão. Para os elétrons que passarem pela fenda, poderemos dizer que conhecemos a sua posição, com uma precisão aproximadamente da ordem do tamanho da fenda, ou seja y = a. Quando os elétrons passarem pela fenda, contudo, deixamos de ter certeza quanto ao valor de seu momento na direção y , pois na fenda os elétrons se "difratam". Por esta razão, na parede observa-se, depois de um certo tempo, um padrão de difração produzido pelos elétrons.

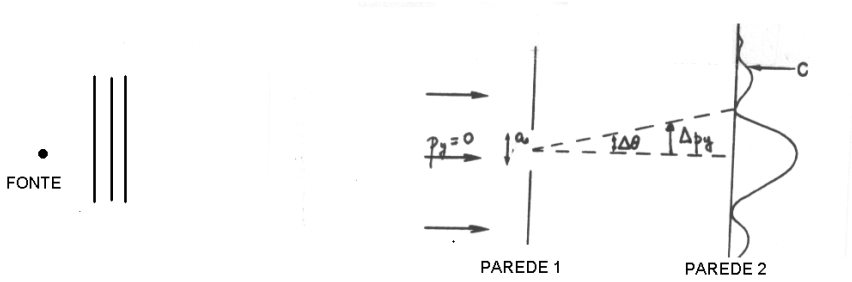


Figura 2

Para ter uma idéia de quanto foi o espalhamento no momento dos elétrons podemos calcular $\Delta p_y \approx p_{0.} \Delta\theta$, quando θ é um ângulo pequeno. Da Ótica se sabe que a distância entre o máximo de um padrão de interferência e o primeiro mínimo é dada por $\Delta\theta = \lambda/a$, de forma que $\Delta p_y \approx p_{0.}\lambda/$ a Desta relação se obtém que quanto menor for a abertura da fenda e, portanto, melhor determinada a posição do elétron, mais "desconheceremos" o seu momento pois Δp_y cresce. Utilizando a relação de De Broglie, pode-se calcular o valor do comprimento de onda do elétron, $\lambda = h/p_0$, e resulta $\Delta y. \Delta p_y \approx h$.

Exercícios

4. O clarão da primeira experiência relatada define a posição do elétron sobre uma das fendas. O que se pode dizer a respeito do momento linear do elétron neste caso?
5. As limitações impostas pelo Princípio de Incerteza poderiam ser superadas se tivermos dispositivos de medidas mais precisos à nossa disposição?
6. Poderia relacionar a dualidade onda-partícula com o Princípio de Incerteza?

Bibliografia

"The Feynman Lectures on Physics", Volume II, de R. Feynman, R. Leighton e M. Sands. Addison-Wesley Publishing Company, 1965.

EXPERIÊNCIA DE STERN-GERLACH.

Antes de apresentar a equação que descreve o comportamento das partículas no mundo quântico, vamos introduzir algumas noções que formam parte da linguagem da Mecânica Quântica.

Para isso começaremos descrevendo a experiência de Stern-Gerlach, em que aparece uma propriedade nitidamente quântica, ou seja, que se manifesta claramente na escala microscópica: o **spin**. (Existem alguns fenômenos na escala macroscópica, como o ferromagnetismo, em que tal grandeza também se revela.)

Na experiência de Stern-Gerlach (1922) um feixe de átomos de prata passa através de um eletroimã (um campo magnético não-uniforme), colidindo à frente com uma placa coletora, como mostra a Fig. 1. A idéia por trás da experiência era inicialmente a de estudar o comportamento dos átomos em um campo magnético.

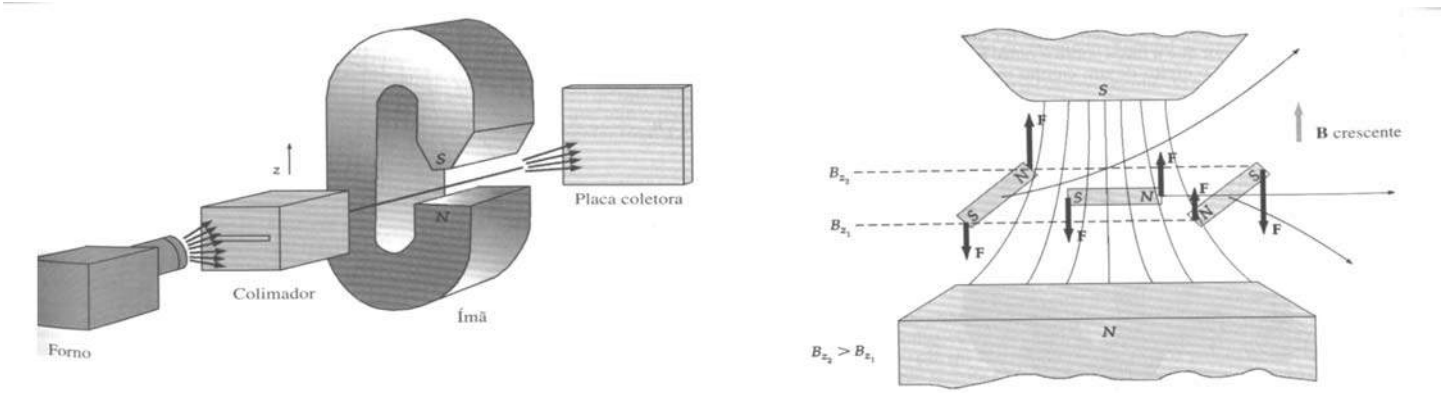


Figura 1

Antes de prosseguir, lembremos que a Física Clássica nos ensina que uma carga em movimento se comporta como uma pequena espira de corrente. Portanto tem um momento magnético de dipolo $\vec{\mu}$, que é proporcional a seu momento angular. Considere uma partícula (clássica) carregada de massa M movendo-se em um anel de raio r (Fig. 2), com velocidade $\vec{v}$ (freqüência $f = v/2\pi r$). O momento angular da partícula $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = \vec{r} \times \vec{v}.M$. Para uma carga circulante, a magnitude da corrente é

$i = qf = qv/2\pi r$ e a do momento magnético é

$\mu = i\pi r^2 = q\ (v/2\pi r)(\ \pi r^2) = (1/2)q\,|\,\vec{v} \times \vec{r}\,| = (1/2)q(L/M)$. Quando a carga é negativa, o momento magnético de dipolo e o momento angular são antiparalelos.

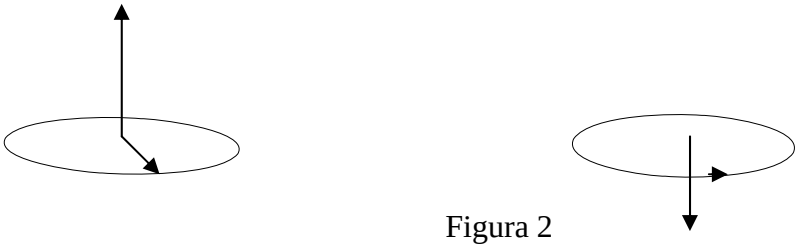


Figura 2

Voltando à experiência, se os átomos de prata possuem um momento magnético $\vec{\mu}$ em uma dada direção, a interação com um campo magnético $\vec{B}$ (por exemplo na direção $\hat{z}$, gera uma energia U = $\vec{\mu}.\vec{B}$, e produz uma força $\vec{F}$. Essa força "puxará para baixo" os átomos com momento magnético apontando para baixo, e "para cima" os átomos com momento magnético apontando para cima. Átomos com momento magnético na direção perpendicular ao campo, não sofrem os efeitos dessa força. Se o campo é nulo, ou seja quando o eletroimã está desligado, os átomos não sofrem a ação de força deste tipo. Como os momentos magnéticos das partículas do feixe incidente, segundo a Mecânica Clássica, podem ter qualquer orientação, esperar-se-ia que quando o eletroimã estivesse ligado, aparecessem na placa coletora depósitos de prata ao longo de uma faixa vertical contínua. Os resultados da experiência mostraram que quando o eletroimã estava desligado, aparecia apenas uma linha na parte central da placa, enquanto quando o eletroimã estava ligado, em vez de tal linha, apareciam duas franjas, como mostra a Fig. 3. Isto indica:

1- que o momento magnético dos átomos está "quantizado", ou seja, em vez de apresentar valores contínuos, como na previsão da Física Clássica, apresenta valores discretos;
2- que só há **dois** valores discretos possíveis para a propriedade que está sendo medida. Estes fenômenos não podem ser explicados pela Física Clássica.

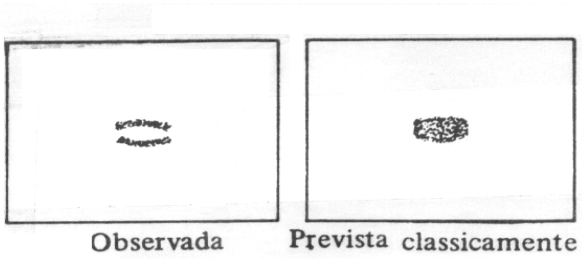


Figura 3

Como no caso do átomo de prata, quando não excitado, apenas um elétron contribui para a existência do momento magnético do átomo, este momento magnético é o do elétron. E além disto este elétron tem momento angular orbital nulo. Como o elétron, ainda assim apresenta momento magnético, este momento se relaciona a um momento angular de outra natureza que se denomina de intrínseco (spin). Assim como massa e carga são características do elétron, spin ou momento angular intrínseco também o é.

Spin do elétron.

De fato, não só o elétron mas as outras partículas elementares passam a ser caracterizadas por mais esta propriedade, o spin (ainda que para algumas delas o spin seja igual a zero). Em particular, para o elétron, como o momento magnético na experiência de Stern-Gerlach aponta **ou** na direção do campo magnético **ou** na direção contrária, conclui-se que o spin do elétron em uma dada direção tem só duas possíveis projeções: "+" e "-". No caso das partículas carregadas, como o elétron, o spin gera (como se fosse uma carga em rotação), um momento (de dipolo) magnético intrínseco, como um imã microscópico. Por isso a experiência de Stern-Gerlach é analisada como se o feixe de átomos que atravessa o campo se dividisse em dois, pois seus momentos magnéticos estão associados aos dois únicos valores possíveis da projeção do spin na direção do campo: + e -.

A projeção do spin do elétron numa dada direção apresenta, então, dois valores, "spin para cima" ou "spin para baixo" ($\hbar/2$ ou $-\hbar/2$). A cada um destes valores chamamos **autovalor** ou valor próprio da projeção do spin na direção do campo e o estado do elétron associado a esse valor (o estado do elétron quando a projeção do spin aponta para cima ou para baixo) se chama de **autoestado**.

Tanto em Física Clássica como em Física Quântica dizemos que se um sistema se encontra em um estado bem definido se tem a máxima informação possível a seu respeito. Em geral, o estado de spin do elétron é uma combinação linear de seus autoestados. Assim, $|S_e\rangle = C_+|+\rangle + C_-|-\rangle$, onde $|C_+|^2$ dá a probabilidade P de que a projeção do spin do elétron na direção do campo magnético se encontre no estado "+", e $|C_-|^2$ = 1-P, a probabilidade de que o sistema se encontre no estado "-". Diferentemente do caso clássico, os valores da projeção do spin na superposição não são intermediários entre os valores correspondentes ao autoestado + e ao autoestado -. Quando medimos a projeção do spin, obtemos SEMPRE **ou** "+"**ou** "–"($+\hbar/2$ ou $-\hbar/2$); nunca obtemos um valor que seja uma "média" entre os valores "+" e "-", mas sim (se a estatística da experiência for boa) P.n o valor "+" e (1-*P*)n o valor "-" (sendo n o número total de medidas feitas). Os únicos valores da medida continuam sendo $+\hbar/2$ e $-\hbar/2$. É a **probabilidade** de encontrar um desses resultados que assume valores intermediários entre 0 e 1.

Observáveis

Em Física, grandezas observáveis são aquelas que podem ser medidas, resultando de cada medida um número real. **Os resultados possíveis das observações são os autovalores.**

Conhecer o estado de um sistema físico é determinar o máximo número de grandezas observáveis associadas a ele. Contudo, enquanto na Física Clássica grandezas como a energia, a componente do momento angular numa dada direção e o momento magnético, por exemplo, assumem valores contínuos, na Mecânica Quântica isto não necessariamente ocorre. A energia dos sistemas quânticos pode assumir valores contínuos ou/e discretos e a projeção do momento angular intrínseco do elétron só pode adotar dois valores.

Suponhamos que realizamos uma medição para determinar o estado de spin dos elétrons de um feixe. Para isso fazemos incidir o feixe através de um dispositivo de Stern-Gerlach, com um campo magnético não-homogêneo apontando, por exemplo, na direção vertical. O feixe inicial, segundo vimos, é separado em dois: um com uma proporção P de elétrons com projeção de spin "para cima" e o outro com uma proporção 1-P de elétrons com projeção de spin "para baixo". Se submetermos, **logo depois**, cada um dos feixes resultantes a um segundo dispositivo de Stern-Gerlach, com campo magnético na mesma direção e sentido, os resultados em cada ramo continuarão os mesmos: o feixe original foi “filtrado” na primeira medida e logo após esta, os elétrons de um dos feixes estavam todos no mesmo autoestado. Ou seja, a medição de um observável leva o sistema a um de seus autoestados (transforma o estado do sistema em um de seus autoestados). Dizemos que a medição "preparou" o sistema em um estado determinado. Contudo, se na segunda medição o campo magnético estiver em uma direção diferente - ou seja, a um ângulo qualquer em relação ao do primeiro campo- novamente encontraremos após a medida alguns elétrons orientados no sentido "+" e os demais no sentido "-" do campo magnético. Ocorreu uma nova "filtragem" do feixe (Fig. 4).

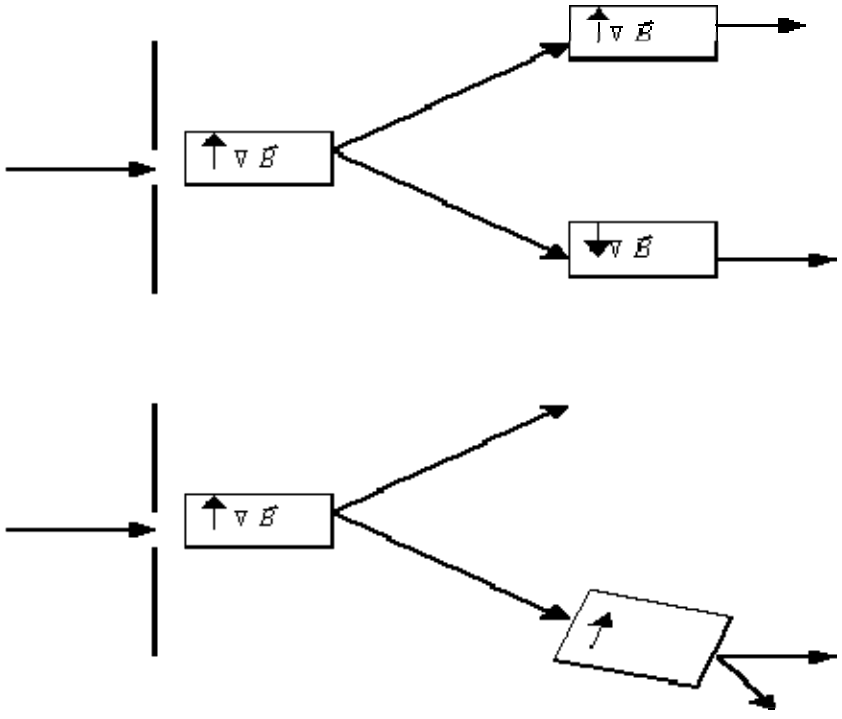


Figura 4

Além disto, enquanto em princípio em Física Clássica não há impedimento para a medição simultânea de dois observáveis, em Mecânica Quântica existem pares de observáveis que não podem ser determinados simultaneamente.

Quando a ordem em que medimos dois observáveis para um mesmo sistema muda o resultado final, se diz que os observáveis são incompatíveis. Dois observáveis são compatíveis, i.e., podem ser medidos simultaneamente com precisão para o mesmo sistema, se, ao contrário, a ordem de sua medição não modifica o resultado final.

Aos observáveis incompatíveis se aplica o Princípio de Incerteza. Como vimos na experiência de Young para as grandezas posição e momento, medir primeiro o momento, conduz a um padrão de interferência; enquanto medir primeiro a posição, não conduz a um padrão de interferência.

Exercícios

1.Como você "prepara" um feixe de átomos de prata de modo a poder dizer que estão todos em um mesmo estado de spin? (Digamos, com projeção na direção vertical e sentido "para cima").

2. Se o estado de spin de um elétron for $|S_e\rangle = (1/2)^{1/2}|+\rangle + (1/2)^{1/2}|-\rangle$, quantos, de um número total de 10000 elétrons você esperaria encontrar com "spin para baixo" em uma experiência de Stern-Gerlach?

3. Um elétron pode estar em um estado de spin $|S_e\rangle = (11/10)^{1/2}|+\rangle - (1/10)^{1/2}|-\rangle$?

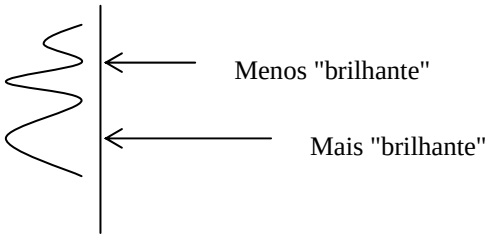
4. Calcule o valor médio do estado de spin do elétron da questão 2 sabendo que o autovalor de "spin para cima "é $\hbar/2$ e o autovalor de "spin para baixo" é $-\hbar/2$. Você obteria este valor em alguma medição?

5. O que você acha que ocorre na experiência de Stern-Gerlach se os elétrons são submetidos um a um ao campo magnético? Em particular, o que ocorre se o estado de todos (cada) os elétrons for $|S_e\rangle = (2/3)^{1/2}|+\rangle + (1/3)^{1/2}|-\rangle$?

6. O spin do elétron na direção $\hat{z}$ e na direção $\hat{y}$ são observáveis compatíveis ou incompatíveis? Por que?

EQUAÇÃO DE MOVIMENTO PARA OBJETOS QUÂNTICOS.
EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER.

Na experiência de Young para elétrons se obtém um "padrão de interferência" que reproduz o padrão das ondas clássicas. Lembremos que, enquanto no caso clássico o padrão de interferência mede a intensidade da onda que chega ao segundo anteparo (módulo ao quadrado da amplitude de onda), no caso dos elétrons o padrão de interferência dá a intensidade de contagens, i.e., a distribuição de probabilidade de localização do elétron (módulo ao quadrado da amplitude de probabilidade). Ou seja, no caso dos elétrons, regiões “mais brilhantes” na segunda parede significam regiões atingidas por mais elétrons, regiões quase totalmente escuras significam regiões em que praticamente nenhum elétron atinge a segunda parede .



Fazendo um paralelismo entre as duas experiências, como no caso das ondas clássicas a intensidade da onda que chega ao anteparo- que dá a figura de interferência – é dada pelo módulo ao quadrado da amplitude da função que descreve seu movimento, no caso dos elétrons, e dos objetos quânticos em geral, - a intensidade de contagens - é dada pelo módulo ao quadrado da amplitude de uma certa **função de onda**. Então,

$$P_1(x) = |\varphi_1(x)|^2 ; P_2(x) = |\varphi_2(x)|^2 \quad \text{e}$$
$$P_{12}(x) = |\varphi_1(x) + \varphi_2(x)|^2 \neq P_1(x) + P_2(x)$$

Este paralelismo induz outro, de características extremamente importantes em Mecânica Quântica, qual seja o de construir uma equação de movimento para “partículas quânticas livres” segundo o modelo de uma equação de movimento para “ondas livres”. Esta equação substituiria então a primeira lei de Newton para os objetos quânticos.

Considerando a situação simples de uma onda plana harmônica infinita que se propaga em uma dada direção com uma freqüência ω (>0) e número de onda k (problema unidimensional),

$$\varphi(x,t) = A\, e^{i(kx-\omega t)},$$

verifica-se que ela satisfaz a equação

$$i\hbar \frac{\partial \varphi_{(x,t)}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi_{(x,t)}}{\partial x^2}, \text{ se } \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Fazendo $\hbar k = p$ h e $\hbar\omega = E$, resulta $E = \frac{p^2}{2m}$.

Esta última relação expressa a energia (cinética) de uma partícula livre não-relativística de momento $\vec{p}$ e massa m, da Física Clássica. Assim se estabelece um elo entre a equação de onda clássica, a equação da partícula clássica e a equação da partícula quântica. Como vemos, esta relação supõe que existe uma proporcionalidade entre momento e número de onda, bem como entre energia e freqüência. Estas grandezas "convivem" então em Mecânica Quântica, o que não ocorre em Física Clássica.

Tendo achado o análogo quântico da primeira lei de Newton, perguntaríamos pelo análogo da segunda lei, ou seja, o que acontece quando a partícula se move sob a ação de forças. Assim como da primeira lei de Newton se sabe que se $\vec{F} = \mathbf{0}$ então $\vec{a} = \mathbf{0}$, mas isto não permite concluir que $\vec{F} = m\vec{a}$, também não se pode "derivar" a equação de Schrödinger geral a partir da equação de "onda livre". Mas se classicamente uma partícula não relativística sob a ação de um potencial $V_{(x)}$ (caso unidimensional) satisfaz $E = p^2/2m + V_{(x)}$, qual seria (por correspondência) o análogo quântico esperado? Segundo Schrödinger neste caso se deve ter

$$i\hbar \frac{\partial \varphi_{(x,t)}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi_{(x,t)}}{\partial x^2} + V_{(x)} \varphi_{(x,t)} .$$

Esta equação que não é demonstrada mas, sim, postulada, é (um caso particular de) a equação de movimento da Mecânica Quântica, como comprovam os inúmeros resultados experimentais descritos com o auxílio da mesma.

Observe-se que a equação atende a algumas considerações importantes. Primeiramente é linear, de forma que suas soluções podem ser superpostas para (re)produzir os fenômenos de interferência. De outro lado, os coeficientes não incluem parâmetros particulares de uma dada dinâmica (por exemplo momento ou energia) pois a equação deve permitir superpor soluções que tenham distintos valores para esses parâmetros (por exemplo, soluções com distintos valores de energia para uma mesma partícula). Portanto os parâmetros se reduzem a constantes, como a constante de Planck, a massa e a carga da partícula. (Como estamos trabalhando com uma teoria não-relativística, a massa não muda com o movimento da partícula.)

Podemos, ainda, ver que a equação de Schrödinger é uma equação na qual comparece a derivada primeira da função, no tempo. Isto significa que se conhecemos $\varphi(x, t_0)$, i.e., se conhecemos a solução da equação em um instante $t = t_0$, a equação permite determinar $\varphi(x, t_1)$, i.e., a solução da equação em um instante t_1, sem qualquer ambigüidade. Neste contexto podemos dizer que a equação de Schrödinger dá a evolução temporal dos objetos quânticos de forma completamente causal. (Isto não significa que a função φ não possa ser expressa como uma superposição de estados relativos a determinados observáveis.)

Observe-se também que mesmo no caso mais simples da equação de Schrödinger para partículas quânticas livres ocorrem soluções complexas ($\varphi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$).

Como veremos mais tarde ao estudar as soluções de problemas particulares, deve-se assegurar que todos os resultados de medidas de possíveis grandezas observáveis sejam expressos em termos de números reais. O módulo ao quadrado da função de onda deve conduzir à densidade de probabilidade, como proposto a partir da experiência de Young. Se, por exemplo, a equação de onda descreve o movimento de um elétron "confinado" a uma caixa, o elétron certamente se encontra dentro da caixa e portanto a soma das probabilidades sobre toda a região deve ser igual a 1. Isto é,

$$\int \left|\varphi(x,t)\right|^2 dx = 1,$$

que é conhecida como **condição de normalização** da função de onda.

Além disto a forma da função de onda que satisfaz a equação de Schrödinger depende do termo de potencial (aqui usamos somente V(x)), mas em geral exige-se que $\varphi(x,t)$ seja contínua pois a função de probabilidade $|\varphi(x,t)|^2$ não varia descontinuamente de ponto a ponto. Existem, então, importantes condições que a função de onda $\varphi(x,t)$, solução da equação de Schrödinger, deve cumprir.

Quando a interação (o potencial V) depende adicionalmente do spin, a função de onda também dependerá do spin, de tal modo que se pode escrever por exemplo $\Psi(x, s_e, t)$. Estas soluções podem em alguns casos ser **separáveis**, i. e., pode se ter $\Psi(x,S_e,t) = \varphi(x,t)\left|S_e\right\rangle$.

Equação de autovalores da energia

Se na equação de Schrödinger o potencial não depende do tempo existirão soluções estacionárias do tipo $\varphi(x,t) = e^{-i\omega t}.\phi_E(x)$ (separáveis). Para estas soluções, a equação de Schrödinger conduz à

$$E\phi_E(x) = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi(x)}{d^2x} + V(x)\phi_E(x),$$

para a parte espacial $\phi_E(x)$ de $\varphi(x,t)$. A equação acima é denominada de equação de autovalores para a energia e não é (mais) uma equação de evolução temporal.

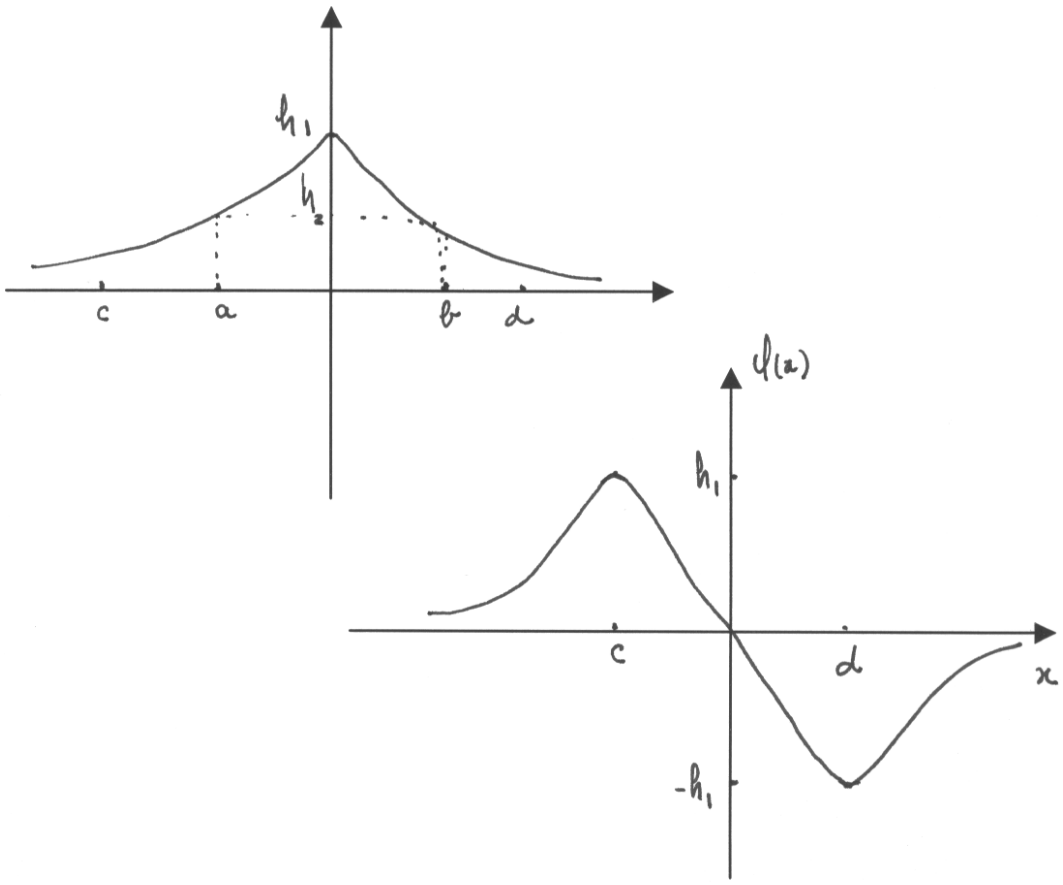
Dadas as condições de contorno do problema particular a resolver, esta equação dá os **únicos valores** que a energia pode adotar num problema particular.

Exercícios

1. Mostre que $Ae^{i(kx-\omega t)}$ é uma solução da equação de Schrödinger dependente do tempo para a partícula quântica livre. Verifique se $Ae^{-i(kx-\omega t)}$, $Ae^{+i(kx+\omega t)}$ e $Ae^{-i(kx+\omega t)}$ também o são.
2. Lembrando que $e^{\pm ikx} = \cos kx \pm i \operatorname{sen} kx$, construa outras possíveis soluções para a equação da questão 1.
3. Qual o valor do módulo ao quadrado de $\varphi(x,t) = A\, e^{i(kx-\omega t)}$ para kx = 0 , kx = 5 e kx = 100. Calcule estes valores para os instantes de tempo t_1 e t_2 tais que $\omega t_1 = 10$ e

$\omega t_2 = 200$. [Lembrar que módulo ao quadrado de um número complexo é o produto deste número pelo seu complexo conjugado $(a+ib)(a-ib) = a^2+b^2$.]

4. Trace um gráfico da intensidade de contagens relativo à função da questão anterior.
5. Determine $|\varphi(x,t)|^2$ para uma solução da equação de Schrödinger dada por $\varphi(x,t) = \left(\frac{1}{5}\right)^{1/2} e^{-(kx)^2/2} e^{-i\omega t} + \left(\frac{4}{5}\right)^{1/2} kx e^{-(kx)^2/2} e^{-i2\omega t\, t}$, para $kx = 1$ e $\omega t = 10$. Interprete o resultado.
6. Verifique se uma solução do tipo $\varphi(x,t) = e^{-i\omega t}\phi(x)$ da equação geral de Schrödinger dependente do tempo conduz a uma equação de autovalores.
7. Que condições deve cumprir uma função de onda para ser solução da equação de Schrödinger?
8. Dados os seguintes gráficos, da parte espacial $\varphi(x)$ da função de onda desenhe $|\varphi(x)|^2$ das possíveis soluções. Indique: a) no entorno de quais pontos é mais provável encontrar a partícula em cada caso; b) se é mais provável encontrar a partícula no entorno do ponto a no gráfico 1 do que no entorno do ponto c; c) se é mais provável encontrar a partícula no entorno do ponto c no gráfico 2 do que no entorno do ponto d.



Bibliografia

"Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei and Particles", de R. Eisberg & R. Resnick. John-Wiley & Sons, N. York, 1974.

AUTOVALORES DE ENERGIA - APLICAÇÕES.

Na última aula apresentamos a equação de autovalores do observável energia. Vamos agora resolvê-la para alguns potenciais particulares. A partir dos resultados obtidos para os autovalores de energia, i.e., do espectro de energia, discutiremos a questão da quantização da energia e dos estados quânticos estacionários. Veremos que o espectro de energia pode compreender valores isolados (espectro discreto) e/ou faixas de energias (espectro contínuo).

Vimos que a solução da equação de Schrödinger dependente do tempo para uma partícula livre (problema em uma dimensão espacial) pode ser dada por

$$\varphi(x,t) = A\, e^{i(kx-\omega t)}, \text{ sendo A uma constante, } \hbar k = p \text{ e } E = \hbar\omega = \frac{p^2}{2m}\ .$$

Pode-se mostrar que para um potencial constante em todo espaço $V(x) = V_0 < E$, a solução é do mesmo tipo, mas neste caso o valor do momento da partícula é $p = [2m(E-V_0)]^{1/2}$. O espectro de energia é continuo. Coisas mais interessantes começam a acontecer quando a forma do potencial varia.

Antes de descrever os estados de energia dos objetos quânticos elementares em distintos potenciais, analisaremos brevemente o que ocorre com uma partícula clássica sujeita a um dado potencial. Consideremos, por exemplo, o potencial e a orientação da Fig. 1. Sabe-se que as regiões permitidas para a partícula, i. e., as regiões onde é possível encontrar o objeto, variam com a energia E da partícula. Para uma energia $E_1 > V(x)$, a partícula pode ser encontrada em todo o intervalo: o movimento da partícula não sofre limitação. Para uma energia $E_2 < V_{max.}$, o ponto x_0, em que $E_2 = V(x_0)$, dito ponto de retorno, limita a região em que se pode encontrar a partícula e portanto em que se pode dar o movimento: não há limitação à esquerda mas a partícula não pode ser encontrada à direita do ponto x_0. Já para a energia E_3, a partícula se encontra "confinada" à região entre os pontos x_1 e x_2. Além disto, toda a região em que $E < V(x)$, é classicamente proibida. Em Mecânica Quântica, como veremos, não teremos todos estes resultados.

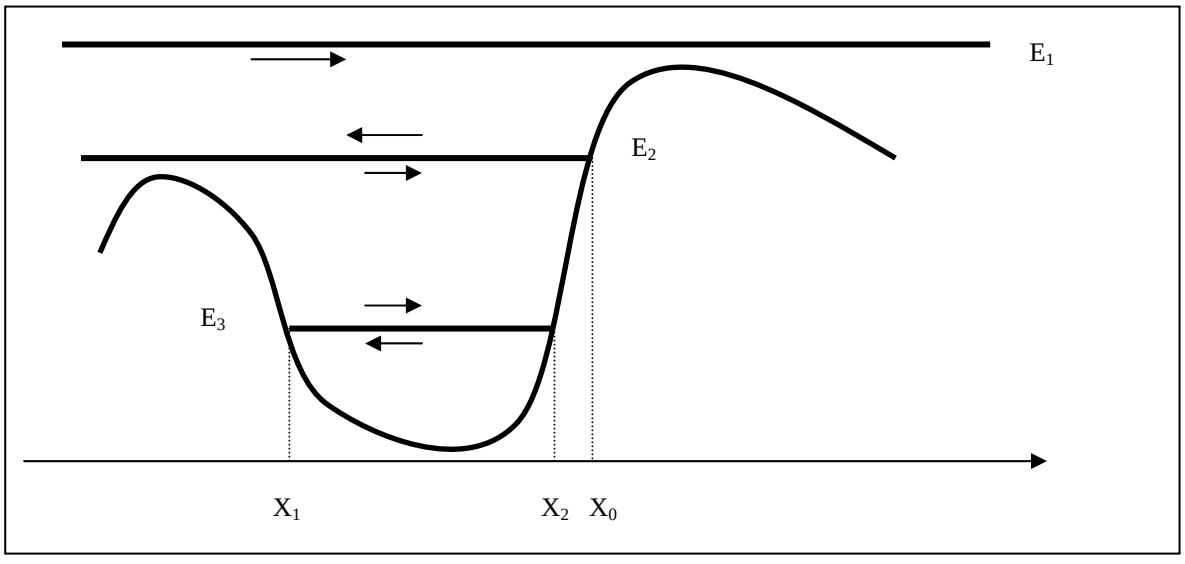


Figura 1

Exercícios

1. Apresentar 2 exemplos de potenciais variáveis como o da Fig. 1 e discutir as possibilidades de localização de uma partícula clássica no espaço.

Estudaremos a seguir alguns problemas quânticos simples que constituem "variações" de um potencial particular, o chamado poço quadrado de potencial unidimensional. Vide Fig. 2. Este problema pode ser resolvido "formalmente" por regiões, desde que as soluções nas distintas regiões sejam corretamente interligadas.

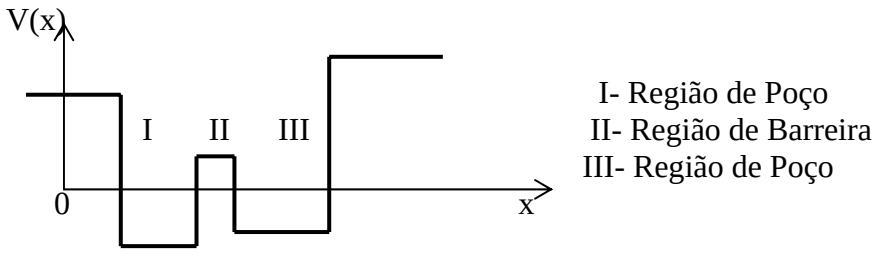


Figura 2

Embora este potencial seja muito simples (e por algum tempo tenha sido considerado como uma aproximação grosseira de potenciais "mais realísticos", como potenciais de moléculas, por exemplo), nos anos recentes conseguiu-se submeter objetos quânticos a potenciais deste tipo, i. e., foi possível construí-los com muita precisão. Os chamados "poços quânticos" são heteroestruturas, i.e., estruturas obtidas a partir da junção de distintos materiais, geralmente em camadas. Esta junção é feita ao nível atômico.

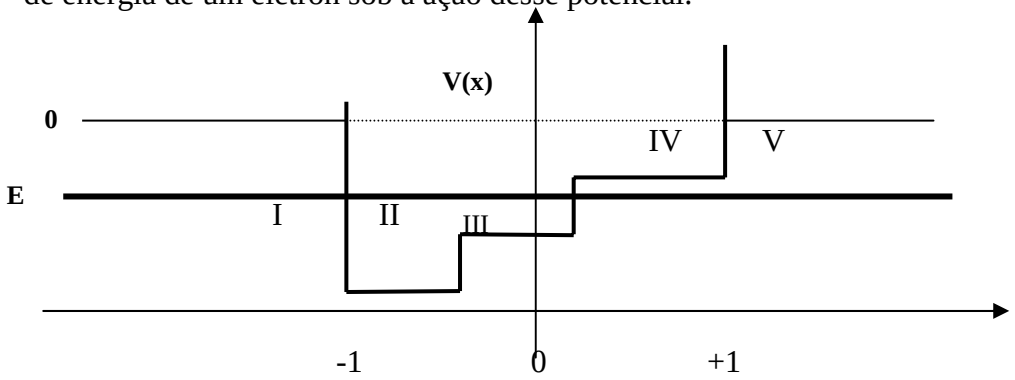
Muitas das propriedades especiais destes materiais derivam do confinamento quântico de elétrons de um material semicondutor[11] (que funciona como "poço") em camadas finas (da ordem de 40 átomos de espessura), material este que é colocado no meio de duas camadas de outros semicondutores, que atuam como "barreiras".

Estes poços, além de permitir estudar, observar e controlar muitos efeitos quânticos que antes "pertenciam" só à teoria, têm propriedades eletrônicas e óticas muito importantes. Por exemplo podem ser utilizados em dispositivos eletrônicos avançados (como transistores de heterojunção bipolar e dispositivos de tunelamento ressonante), em componentes óticos (guias de onda e microressonadores) e em dispositivos e estruturas ótico-eletrônicas (como laser de diodo e fotodetectores). Um aspecto importante dos poços quânticos é que permitem uma integração entre os campos da eletrônica e da ótica.

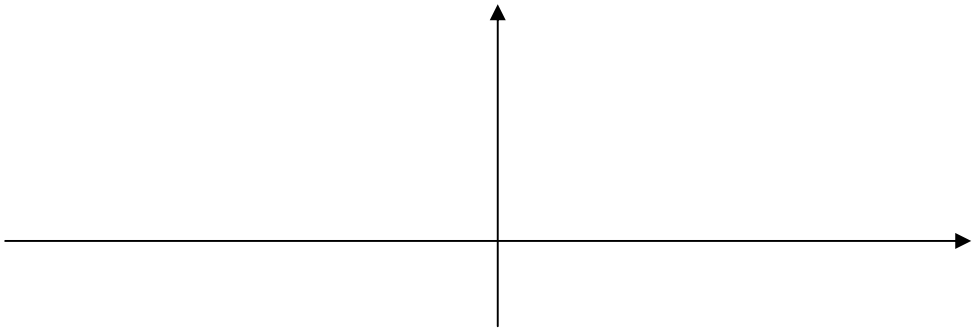
[11] Tipo de material que por sua estrutura aumenta a condutibilidade com o aumento da temperatura, ao contrário dos condutores.

Exercícios

2. Abaixo encontra-se o gráfico de um potencial unidimensional V(x) e da autofunção de energia de um elétron sob a ação desse potencial.



(As regiões II e III tem a mesma largura.)



2.1 Se o elétron estivesse se movendo classicamente (ou seja, segundo as leis de Newton) no potencial V(x) com energia E, quais das afirmações seguintes seriam verdadeiras?

a)A partícula se move mais rapidamente na região II do que na região III; b) a partícula se move mais rapidamente estivesse na região III do que na região I; c) fotografando a partícula em vários instantes, nunca a encontraremos na região IV; d) fotografando a partícula em vários instantes de tempo, seria mais provável encontrá-la na região II; e) se se tomasse uma fotografia da partícula num tempo qualquer, seria mais provável que a achássemos na região III.

2.2. Se a partícula estivesse se movendo segundo a equação de Schrödinger no potencial V(x) com energia E, quais das seguintes afirmações seriam verdadeiras?

a) Se medirmos a posição da partícula num instante qualquer, nunca a encontraremos na região V; b) se medirmos a posição da partícula num instante qualquer, nunca a acharíamos na região IV; c) se medirmos a posição da partícula num instante qualquer, seria mais provável achá-la na região II do que na região III; d) se medirmos a posição da partícula num instante qualquer, seria mais provável achá-la na região III do que na região IV.

Bibliografia

"Quantum mechanics" de L. Schiff. Mc-Graw-Hill Book Company, Tokyo, 1970.

PARTÍCULA EM UMA CAIXA - POÇO INFINITO

Vejamos então o comportamento dos objetos quânticos quando sujeitos a potenciais do tipo poço quadrado. Comecemos pelo caso de uma partícula quântica que esteja impedida de sair de uma determinada região, como se estivesse confinada a uma caixa com paredes de altura infinita. No exemplo, a caixa é unidimensional e de comprimento L.

Este potencial pode ser descrito como

$V(x) = 0$, para $0 < x < L$

$V(x) = \infty$, para $x \leq 0$ ou $x \geq L$,

i.e., no interior da caixa o potencial é nulo, enquanto fora da caixa é infinito.

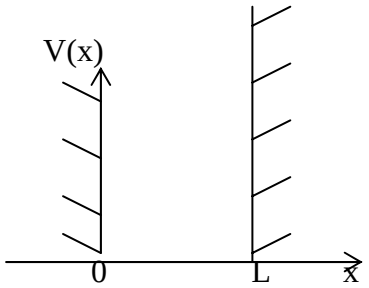


Figura 3

Como a partícula deve estar **dentro** da caixa, a probabilidade de ela estar fora terá que ser nula, e portanto $|\phi(x)|^2 = 0$ para todo ponto fora da caixa, ou seja $\phi(x) = 0$ para todo $x \leq 0$ e para todo $x \geq L$. Estas são as condições de contorno, impostas à função de onda calculada no interior da caixa, para que seja solução da equação de Schrödinger dada. Não existe uma solução para cada região. Existe uma solução global.

Consideremos então a equação de autovalores e calculemos os valores de energia que a partícula pode ter. Como V(x) = 0 dentro da caixa, resulta $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, e

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + k^2\phi(x) = 0$$

Duas possíveis soluções independentes desta equação são A sen(kx) e B cos(kx) (ou $A'e^{ikx}$ e $B'e^{-ikx}$, por exemplo). Portanto a solução geral da equação é a superposição das duas

$$\phi(x) = A \operatorname{sen}(kx) + B \cos(kx), \qquad (1)$$

com A e B constantes a determinar pelas condições de contorno.

Então, para $x = 0$, $\phi(x = 0) = A \operatorname{sen}(k0) + B \cos(k0) = 0$

Ou seja, $0 + B = 0 \Rightarrow B = 0$.

Com isto a solução (1) se torna

$$\phi(x) = A \operatorname{sen}(kx). \qquad (2)$$

Além disto, em x = L, ϕ (x = L) = A sen (kL) = 0. (3)

Esta condição será satisfeita se kL = *n*. π ($n = \pm 1, \pm 2, \pm 3...$) ou seja

$$k_n = \frac{n\pi}{L}. \quad (4)$$

Exercícios

3. Verifique se ϕ (x) = A e ^{ikx} + B e $^{-ikx}$ é solução da equação 1.
4. Por que a relação 4, não inclui o valor *n* = 0 ?

Então, para cada valor de *n* há uma função de onda ϕ_n (x) dada por

$$\boldsymbol{\phi_n (x) = A_n \text{ sen } (n\pi x/L).}$$

De outra parte, como $k_n^2 = 2m E_n / \hbar^2$, resulta

$$\mathbf{E_n = n^2}\left(\frac{\hbar^2\pi^2}{\mathbf{2mL^2}}\right) \quad (5)$$

A solução da equação de Schrödinger dependente do tempo para um estado com autovalor de energia E_n é, neste caso, da forma

$$\varphi_n(x,t) = \phi_n(x)e^{-i\omega_n t} = A_n \text{ sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right)e^{-iE_n t/\hbar} \quad . \quad (6)$$

Estes são os autovalores de energia ou seja, as **únicas** energias permitidas (que estão quadraticamente espaçadas) para as partículas quânticas dentro da caixa. Isto significa que o espectro de energia é discreto: a energia está **quantizada**, podendo adotar somente os valores dados pela relação (5). O espectro discreto de energias é característico de partículas que estão confinadas.

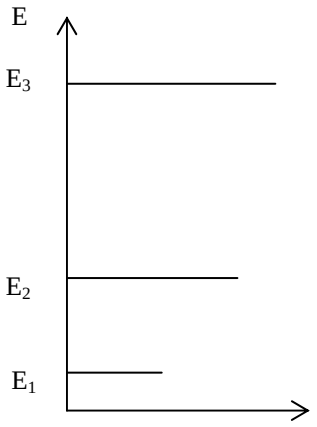


Figura 3

Observe a Fig. 3. Note que o primeiro valor de energia permitida (que corresponde a *n* = 1) está **acima** do fundo do poço. Essa energia mínima (a energia do estado fundamental) é dada pela equação (5), fazendo *n* = 1. Assim,

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}.$$

Exercícios

5. O que você pode dizer sobre o estado de energia de uma partícula quântica confinada a uma caixa antes de efetuar uma medição? E depois de efetuar uma medição?
6. Qual a energia mínima dada pela relação de incerteza para o estado fundamental de uma partícula confinada a uma caixa? Relacione essa energia com a dada pela relação (5) e interprete esse resultado.
7. Calcule a razão entre as energias do estado fundamental de uma partícula confinada a uma caixa quando a partícula é um elétron (m_e =9,1.10^{-31}kg) e quando a partícula é um próton (m_p=1,67.10^{-27}kg). Qual das duas energias é maior?

Qual seria a distribuição de probabilidades de localização da partícula para os diferentes autoestados de energia? Para isso precisamos calcular

$$P(x) = \left|\varphi_n(x,t)\right|^2 = \left|A_n\right|^2 \operatorname{sen}^2\left(\tfrac{n\pi x}{L}\right). \qquad (7)$$

Esta densidade de probabilidade **não** depende do tempo, é uma **distribuição estacionária.** Por isso não é adequado imaginar o elétron como uma partícula oscilando, para lá e para cá, entre as paredes da caixa. Uma visão possível do elétron é a de imaginá-lo como uma nuvem de carga distribuída com uma densidade de carga proporcional a $e^-.|\varphi|^2$. Assim, por exemplo, para o estado fundamental, em que $|\varphi|^2$ é da forma mostrada no gráfico abaixo, a nuvem eletrônica tem seu máximo no centro da caixa e se espalha por toda ela.

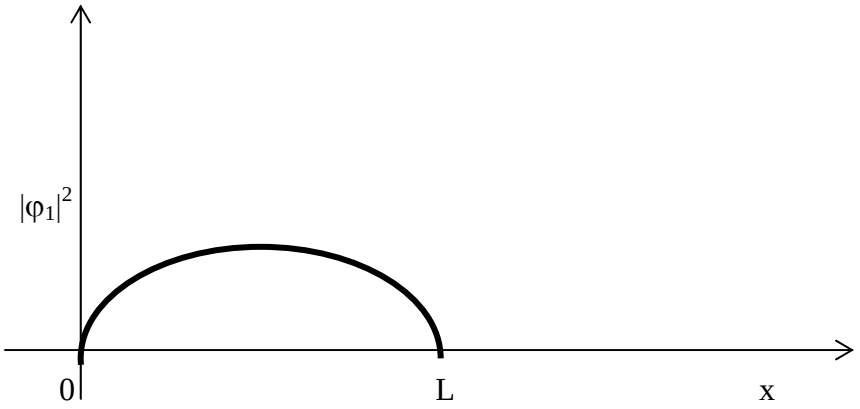
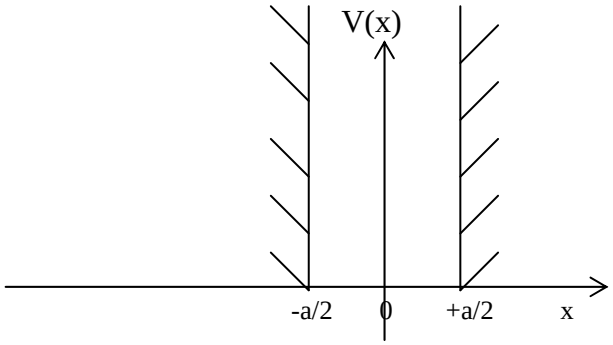


Figura 4

Exercícios

8. Qual seria o comportamento de uma partícula clássica sujeita a um potencial como o da caixa da Fig. 3?
9. Calcule o valor da constante A_n da solução (6) de modo a satisfazer a condição de normalização (norma igual a 1).
10. Encontre os valores de E_2, E_3 e E_4 no caso de uma partícula confinada numa caixa, em função de E_1, em unidades de E_1.

11. Faça um esboço das autofunções correspondentes aos quatro primeiros autoestados de energia para o potencial de caixa. Interprete os resultados com a imagem de distribuição de carga. Desenhe aproximadamente a solução para n = 20. Compare com a distribuição que esperaria no caso clássico.
12. Calcule os autovalores de energia para um poço de potencial infinito como o da figura abaixo.



Bibliografia

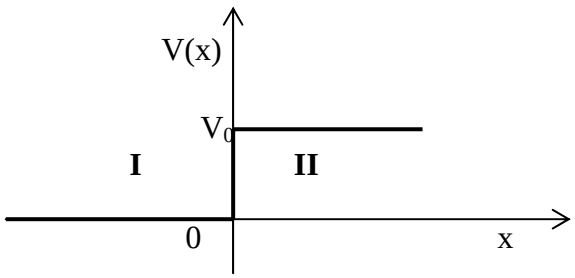
"Quantum mechanics" de L. Schiff. Mc-Graw-Hill Book Company, Tokyo, 1970.
"Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei and Particles", de R. Eisberg & R. Resnick. John-Wiley & Sons, N. York, 1974.

DEGRAU DE POTENCIAL.

Estudamos anteriormente as soluções da equação de autovalores para uma partícula quântica de massa m confinada a uma caixa (problema unidimensional). Este é o chamado potencial quadrado de poço infinito. Veremos agora outros problemas de autovalores de energia para potenciais constantes por regiões, mas variáveis de modo descontínuo de uma região a outra.

Potencial degrau (barreira de potencial).

$V(x) = 0$ para $x \leq 0$ e
$V(x) = V_0$ para $x > 0$



A equação de autovalores é

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + V(x)\phi(x) = E\phi(x)\,.$$

Pode-se ter $E > V_0$, $E = V_0$ e $E < V_0$.

a) $E > V_0$

Define-se $k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ e $k_2^2 = \frac{2m(E-V)}{\hbar^2}$.
As soluções nas regiões I e II são formalmente:

$\phi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$,
$\phi_2(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}$. (Lembrar que $e^{i(kx - \omega t)}$ corresponde a uma partícula com velocidade $\rightarrow$ e $e^{-i(kx - \omega t)}$, a uma com velocidade $\leftarrow$)

Se o objeto quântico incide da esquerda para a direita, D = 0 pois não há reflexão no "infinito".
(Em linguagem ondulatória, identificaríamos o termo $A\,e^{ikx}$ como o da onda incidente, o termo B e e^{-ikx} como o da onda refletida e o termo C e^{ikx} como o da onda transmitida.)

Exigindo continuidade para a função de onda e sua derivada primeira em x = 0 teremos
$\phi_1(x = 0) = \phi_2(x = 0)$ e
$\phi'_1(x = 0) = \phi'_2(x = 0)$, (1)

de onde se obtêm as relações:

$$A + B = C \qquad \text{e}$$
$$ik_1 (A - B) = ik_2 C,$$

de forma que

$$B = \frac{A(k_1 - k_2)}{(k_1 + k_2)} \qquad \text{e}$$
$$C = \frac{2Ak_1}{(k_1 + k_2)} \qquad (2)$$

Os coeficientes de reflexão (R) e de transmissão (T) são dados por

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} \qquad \text{e}$$

$$T = 1 - R = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{k_2}{k_1}\left|\frac{C}{A}\right|^2 .$$

Tem se aqui um efeito tipicamente quântico: na Mecânica Clássica, uma partícula com E > V é "totalmente transmitida" enquanto quanticamente ela tem uma probabilidade não nula de ser "refletida" (ainda que tenha energia suficiente para ultrapassar o degrau de potencial). Este efeito aparece exemplificado na Fig. 1, em que um pacote de ondas com energia E encontra um potencial V<E.

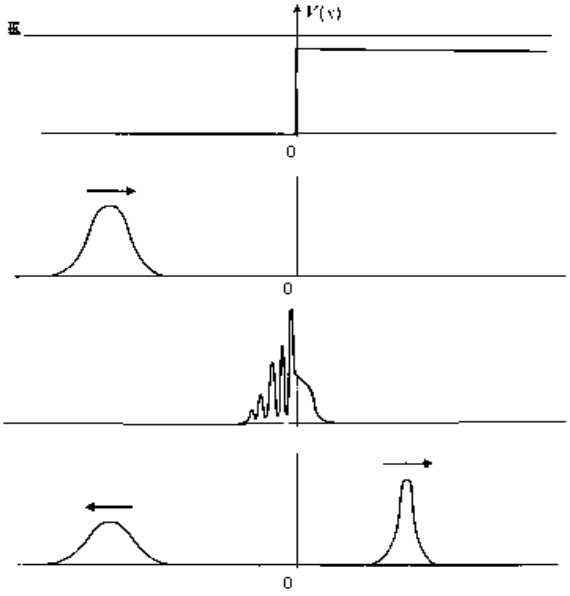


Figura 1

b) $0 \leq E < V_0$

As soluções para as regiões I e II são

$\phi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$

$\phi_2(x) = Fe^{-|k_2|x} + Ge^{|k_2|x}$, ou seja na região I a solução é ainda a mesma que no caso anterior, entanto que na região II muda porque $k_2^2 < 0$ ($E<V_0$) e portanto k_2 é imaginário.

Para que a solução não seja divergente a grandes distâncias, G = 0. (Este coeficiente se anula somente quando a barreira se estende a infinito como aqui.) Neste caso,

$$B = A\frac{(k_1 - i|k_2|)}{(k_1 + i|k_2|)} \quad \text{e}$$

$$C = A\frac{2k_1}{(k_1 + i|k_2|)}$$

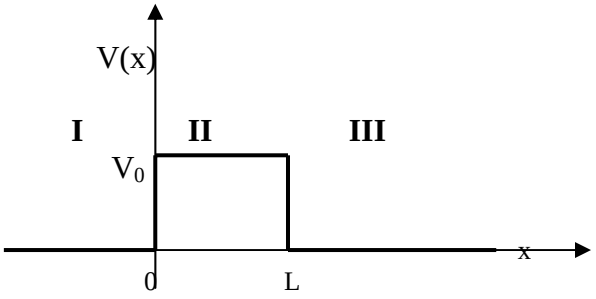
Então $R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = 1$!

Como se observa este tipo de solução dá uma função de onda oscilante fora do degrau e que decai exponencialmente na região II. Apesar de que a onda penetra ligeiramente na região classicamente proibida x > 0, ela é completamente refletida.

Barreira finita

Tomemos agora o caso em que temos uma barreira de altura e largura finita. Então,

V(x) = 0 para $x \leq 0$,
V(x) = V_0 para 0 < x < L,
V(x) = 0 para $x \geq L$



a) $E < V_0$

Consideremos uma partícula com energia E < V_0, incidindo da esquerda. Classicamente, em colisão elástica, ter-se-ia reflexão total. Quanticamente no entanto, a solução da equação de autovalores de energia dá uma distribuição de probabilidades como a que aparece na Fig. 2. Ou seja, existe uma certa probabilidade de que a partícula seja encontrada à direita da barreira.

Quando kL >>1 o coeficiente de transmissão é regulado por e^{-2Lk}, com $k = \left[\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\right]^{1/2}$. Neste caso a probabilidade de transmissão é pequena. Na Fig. 2 está representada a densidade de probabilidade para este caso.

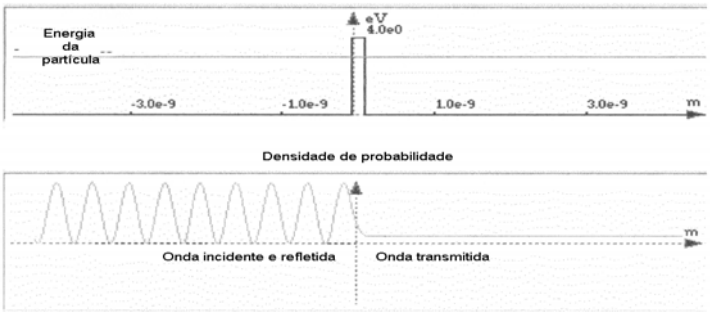


Figura 2

Ou seja, quanticamente, os objetos podem "tunelar" através de uma barreira: a probabilidade de transmissão é pequena, mas é distinta de zero. (A penetração de uma barreira também se pode observar, por exemplo, quando um raio de luz incide numa lâmina de faces paralelas.)

O tunelamento quântico se manifesta em uma grande variedade de fenômenos, dos quais o primeiro a ser estudado foi o da emissão de partículas α (núcleos de átomos de hélio) por núcleos radioativos. Uma partícula α é constituída por dois prótons e dois nêutrons fortemente ligados. Uma particularidade destas partículas é que a meia-vida de desintegração associada às mesmas é muito variável (de $\approx 10^{-7}$ s até $\approx 10^{10}$ anos) e se sabe que está vinculada à sua energia (quanto menos energética é uma partícula, maior é a sua meia-vida).

Para explicar este fenômeno, em 1928 o físico Gamow imaginou que os núcleos radioativos atuassem como um poço quadrado de potencial, como o da Fig. 3, em cujo interior estivessem as partículas α. Quando as partículas eram emitidas, eram repelidas por forças colombianas (a carga da partícula é + 2e e a carga do núcleo, depois da emitir a partícula é +(Z-2)e). Enquanto estivessem dentro do núcleo, no entanto, as partículas "sofreriam reflexão" nas paredes do poço. Cada vez que atingissem a parede, haveria uma pequena probabilidade de que conseguissem "tunelar". Como o tunelamento depende tanto da espessura da barreira quanto de sua altura relativa, um pequeno aumento na energia reduziria, ademais, a espessura da barreira (ver Fig. 3) e portanto aumentaria a probabilidade de a partícula α atravessar a barreira de potencial. Por isso, quanto menor a energia das partículas α, menor a probabilidade de as mesmas saírem do núcleo e portanto maior a sua meia-vida.

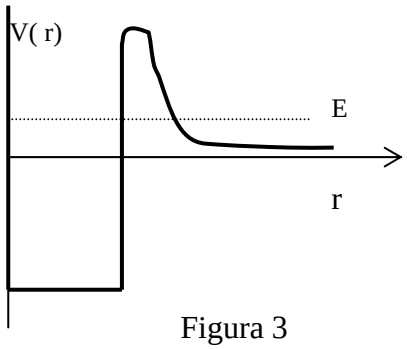


Figura 3

Outro exemplo de tunelamento que nos é muito familiar tem relação com a prática de muitos eletricistas, de reunião de dois fios. A forma habitual em que um eletricista junta dois fios é enrolando a extremidade de um na extremidade do outro. Normalmente existe uma camada fina de Óxido de Alumínio entre os dois fios, que é um isolante efetivo. Esta camada, no entanto, é fina o suficiente para permitir que os elétrons de um dos fios "tunelem" por essa barreira e efetivamente produzam a transmissão de corrente.

O tunelamento tem adicionalmente importantes aplicações tecnológicas, como no caso do microscópio eletrônico de varredura por tunelamento (Fig. 4). Neste microscópio existe uma distância muito pequena entre o material a ser observado e uma ponta delgada que atua como barreira para os elétrons da amostra, tipicamente da ordem de uns poucos diâmetros atômicos. Com uma pequena voltagem se pode conseguir que os elétrons menos ligados do material - os elétrons de condução - "tunelem" pela região de vácuo entre a amostra e a ponta. Como a relação entre a probabilidade de transmissão e a separação é exponencial, qualquer protuberância na amostra que modifica a distância de separação, provoca uma variação na corrente de tunelamento. As medidas da "corrente de tunelamento" (que é proporcional à probabilidade de transmissão) geram o mapa topográfico da amostra enquanto a ponta faz a varredura sobre a superfície do material. Assim é possível, ainda que não seja tecnologicamente simples, medir as características da superfície do material com uma resolução da ordem de grandeza do tamanho do átomo.

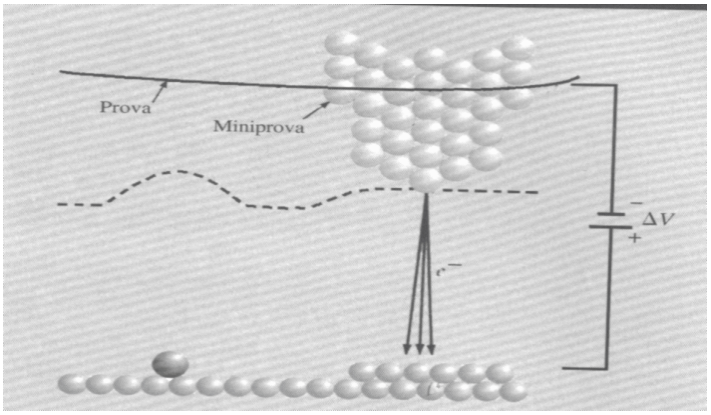


Figura 4

Exercícios

1. [*]Calcule a razão entre as energias E_2 e E_3, entre E_{15} e E_{16} e entre E_{35} e E_{36} para o caso do poço de potencial infinito. O que se poderia dizer sobre as razões entre as energias dos níveis quando *n* cresce?
2. [*]Indique o que acontece com os níveis de energia de um objeto quântico elementar sujeito a um poço de potencial quadrado finito quando a energia é maior do que a altura do poço.
3. Qual a descrição clássica de uma partícula em um potencial do tipo degrau para $E > V_0$, para $E = V_0$, e para $E < V_0$?
4. Explique porque vale a relação (1).
5. Verifique a relação (2).
6. O que acontece no caso do potencial degrau se a energia estiver muito próxima do valor máximo do potencial ($E \approx V_{max.}$)?
7. Como se pode aumentar o coeficiente de transmissão em uma barreira de potencial?
8. Analise o problema de autovalores de uma partícula sujeita a uma barreira finita em altura e largura, quando $E > V_0$.

[*] Estes problemas são continuação dos problemas correspondentes apresentados para o caso do poço de potencial infinito.
[*]

ÁTOMO DE HIDROGÊNIO

Nos primórdios da Mecânica Quântica, em um período que poderíamos chamar de "pré-quântico", Niels Bohr introduziu um modelo que permitia descrever quantitativamente o espectro do átomo de hidrogênio, embora à custa de algumas imposições bastante "estranhas". Assim, por exemplo, a teoria de Bohr não explicava o porquê e sim **postulava** que o elétron do átomo só podia existir em determinados estados de energia. Além disso a tentativa de aplicar esse modelo a átomos mais complicados que o de hidrogênio teve escasso sucesso. Já a Mecânica Quântica, obteve seu primeiro grande sucesso (através do estudo das soluções estacionárias da equação de Schrödinger com o potencial de Coulomb) ao propiciar a compreensão e descrição bastante detalhada do espectro do átomo de hidrogênio (e dos hidrogenóides), bem como o entendimento das periodicidades da tabela periódica.

Dada a sua importância descreveremos agora, ainda que não muito detalhadamente, o tratamento quântico do átomo de hidrogênio. O átomo de hidrogênio, o mais simples de todos, é um sistema ligado, constituído por um próton e um elétron que interagem como partículas carregadas, de cargas iguais e opostas. Para uma descrição completa deste átomo precisaríamos, então, considerar os termos de energia cinética das duas partículas de que está composto. No entanto como a massa do próton é muito grande se comparada com a do elétron (≈1856), pode-se recorrer a uma aproximação que trata o átomo como constituído por um núcleo "parado", o próton, e uma única partícula, o elétron, com a massa levemente modificada (massa reduzida do sistema), sujeito ao potencial decorrente da atração electrostática do próton. O estado do elétron ligado no átomo, então, será descrito por uma função de onda, $\Psi(\vec{r},t)$ - sendo $\vec{r}$ a distância do elétron ao próton - e o módulo ao quadrado de Ψ dará a probabilidade de localização do elétron em um instante de tempo, em uma certa região do espaço. Para as soluções estacionárias, da imposição das condições de contorno às soluções formais da equação de autovalores (funções de onda) se obterá a quantização da energia do elétron (do átomo).

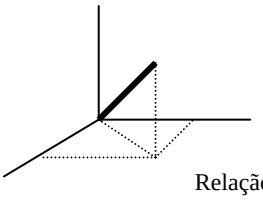
O potencial ao qual está sujeito o elétron é atrativo, tende a zero quando r cresce e tende em valor absoluto a infinito quando r tende a zero.

$V(r) = -k\frac{e^2}{r}$, sendo e a carga do elétron e $k = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}$.

E por isso as energias permitidas para o elétron, que está "confinado" ao potencial, são energias negativas.

Ainda que este problema seja tridimensional, o potencial só depende de r e portanto se tratarmos o problema em coordenadas esféricas a equação de Schrödinger pode ser separada em parte radial e parte angular. Como $\Psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})$. T(t) e buscando soluções da forma, em coordenadas esféricas,

$\psi(\vec{r}) \equiv \psi(r, \theta, \phi) = R(r).\ f(\theta).\ g(\phi)$,



Relação entre coordenadas retangulares e esféricas para um ponto P.

A equação de autovalores para $\psi(r, \theta, \phi)$ decorrente é

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right) - \frac{\hbar^2}{2mr^2}\left[\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}\right] + V_{(r)}\Psi_{(r,\theta,\phi)} = E\Psi_{(r,\theta,\phi)}$$

Esta equação resulta em três equações diferenciais ordinárias relativas a cada uma das variáveis r, θ, ϕ. A função energia potencial V(r) só ocorre na equação radial, de forma que não afeta a forma das soluções das equações em θ e ϕ.

Segundo vimos na aula sobre Equação de Schrödinger para que uma função de onda seja solução, com significado físico, da equação de Schrödinger, ela deve ser "bem comportada" (em geral contínua e com norma finita). No caso do poço quadrado infinito unidimensional esta exigência determina a existência de um número quântico *n* que caracteriza as únicas soluções possíveis para esse potencial e os únicos valores de energia vinculados a tais soluções (quantização da energia). No caso do átomo de hidrogênio, em que o problema é tridimensional, esta exigência determina a existência de **três** números quânticos, cada um deles associado à solução de uma das equações de autovalores das variáveis. Estes números estão relacionados e seus valores possíveis são:

n = 1, 2, 3,....(qualquer número inteiro positivo maior que zero);
l = 0, 1, 2,.....n-1(qualquer número inteiro positivo desde zero até *n*-1);
m = -l, -l+1, -l+2,..0,...+l(todos os inteiros desde -*l* até +*l*).

n é chamado de número quântico principal e está associado à solução da parte radial da equação (e, portanto, à probabilidade de encontrar o elétron a uma certa distância do núcleo). *l* é chamado de número quântico orbital e está associado ao momento angular orbital do elétron enquanto *m* é chamado de número quântico magnético e está associado à projeção do momento angular sobre uma direção escolhida. (Como em geral esta direção é a de um campo magnético externo aplicado, decorre o nome número quântico magnético.)

Níveis de energia do elétron no átomo de hidrogênio

Assim como no caso do poço quadrado os níveis de energia permitidos para as partículas nele confinadas estão caracterizados pelo número quântico, também aqui os números quânticos caracterizam as energias permitidas para o elétron do átomo de Hidrogênio. Para este átomo em particular os níveis de energia só dependem de *n* sendo dados por

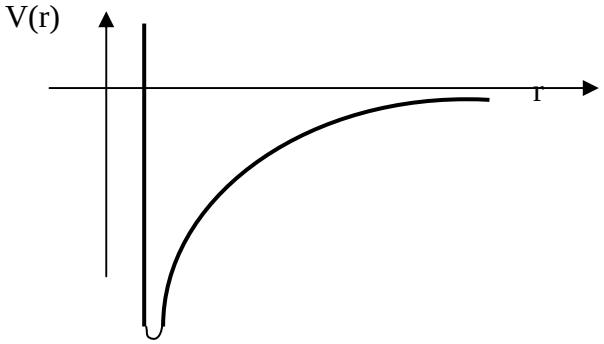
$$E_n = -E_0.\frac{1}{n^2}, \text{ com } n = 1, 2, 3,...$$

sendo $E_0 = \frac{me^4}{2\hbar^2}$ =13,6 eV.

Em geral, em átomos com mais elétrons, os níveis de energia dependem também do número quântico orbital *l*. Se o átomo estiver sob efeito de um campo magnético, a energia dependerá, além disto, do número quântico magnético *m*.

Exercícios

1. O que significa o fato de as energias dos estados possíveis do elétron no átomo de hidrogênio serem negativas?
2. Você diria que podem existir soluções da equação de Schrödinger para um elétron no potencial colombiano de um próton, em que as energias são positivas? Explique a sua resposta. Se a sua resposta for SIM, este sistema é um átomo de hidrogênio?



3. Para *n* = 3 que energia se obtém para o elétron do átomo de hidrogênio? Neste caso, quais os valores possíveis de *l*? Para cada valor de *l*, relacionar os possíveis valores de *m*. Qual é o número total de estados possíveis do elétron para *n* = 3? Quantas funções de onda diferentes apresentarão a energia calculada acima?

Como se pode observar para *n* = 1 tem-se o menor valor da energia possível para o átomo de hidrogênio, correspondente ao que chamamos de estado fundamental do sistema (átomo). Ainda que o elétron do átomo possa estar por alguma razão em uma superposição de estados de energia, (combinação de diferentes funções de onda associadas a diferentes *n*, *l* e *m* e portanto a diferentes valores de energia), como sempre ocorre na Natureza, ele tenderá a decair ao estado fundamental, ou seja ao seu estado de menor energia.

O que obteríamos do Princípio de Incerteza nesta situação?. A energia total do elétron compreende uma contribuição cinética e uma potencial. O potencial a que está submetido o elétron a uma distância r do próton, é $V(r) = -k.e^2 / r$. Se, em uma imagem semiclássica, o elétron pelo Princípio de Incerteza estivesse confinado a uma esfera de raio r teria uma energia cinética cujo mínimo é dado por

$$\left\langle E_{\text{cinética}} \right\rangle = \frac{\left\langle (\Delta p)^2 \right\rangle}{2m} \geq \frac{\hbar^2}{2mr^2}$$

Ou seja uma estimativa para a energia total seria

$$E(r) = V(r) + E_c = \frac{-ke^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2mr^2}.$$

Calculando o mínimo desta expressão em função de r se obtém uma distância (do elétron ao próton) "associada" ao estado fundamental. Esse valor, $a_0 = \frac{\hbar^2}{m}ke^2$, é chamado raio de Bohr.

O que o Princípio de Incerteza diz é que se o elétron está confinado a uma região muito pequena ao redor do núcleo a incerteza na sua posição é pequena mas a incerteza no seu momento será grande e portanto sua energia, devida a parte cinética, também é grande. Se queremos que a energia do elétron seja pequena, devemos "dar-lhe bastante espaço" de modo que a incerteza na sua posição se torne maior. O estado fundamental resulta então de um "compromisso" entre uma contribuição cinética e uma contribuição potencial, não muito pequenas nem muito grandes, à energia.

Exercícios

4. O elétron de um átomo de Hidrogênio se encontra no estado de menor energia possível. O que se pode dizer sobre a posição e o momento do elétron?

Funções de onda do átomo de hidrogênio

As funções de onda que são solução da equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio dependerão dos três números quânticos *n*, *l* e *m*. Segundo vimos, para cada valor de *n*, existem *n* valores possíveis de *l* e para cada valor de *l* existem 2*l*+1 valores distintos de *m*. Como a energia neste caso só depende de *n*, existem em geral muitas funções de onda diferentes que correspondem à mesma energia (ou seja, funções com o mesmo valor de *n* e com distintos valores de *l* e de *m*). Neste caso se diz que as soluções são degeneradas em energia. A Fig. 1 mostra o diagrama dos níveis de energia do elétron no átomo de hidrogênio. Aparecem ali os estados com a mesma energia (ou seja, o mesmo *n*) mas diferentes valores de *l*. Esses estados são identificados pelo valor de *n* e por uma letra simbólica: *s, p, d, f, g, ...* A letra *s* representa os estados que não possuem dependência angular ($l = 0$ e $m = 0$). Há um só desses estados para cada *n*. Para *n* fixo, quando o momento angular orbital é igual a 1, existem três possíveis funções (ou uma combinação linear delas) que dão conta da variação angular. Estes são os chamados estados *p*. Se o momento angular orbital é igual a 2 (e *n* é fixo), existem 5 possíveis funções associadas (ou combinações delas). Estes são os estados *d*.

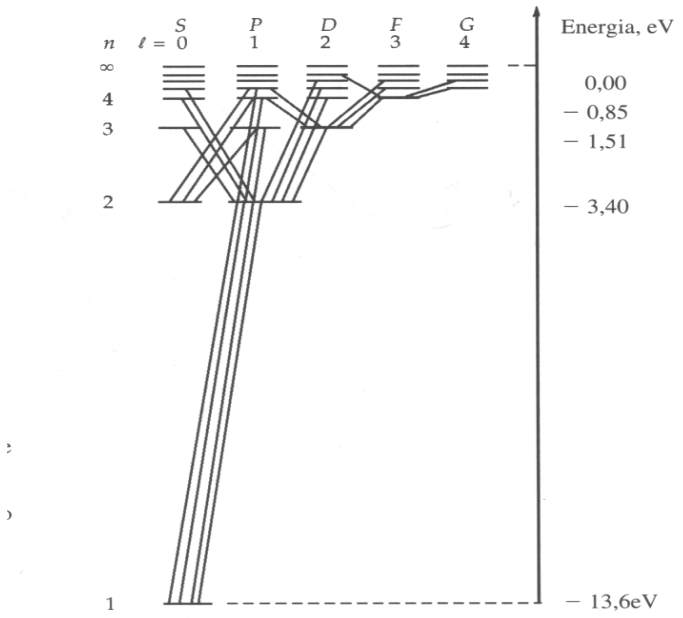


Figura 1

No estado fundamental, com energia -13,6 eV, temos $n = 1$, $l = 0$ e $m = 0$. A função de onda para este estado é $\Psi_{n=1,l=1,m=0} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-r/a}$, o fator $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}$ sendo uma constante determinada pela condição de normalização ($\iiint |\Psi(\vec{r})|^2 d\vec{r} = 1$).

Exercícios

5. Como surgem na Mecânica Quântica os distintos níveis de energia permitidos para o elétron em um átomo de hidrogênio?

O que se pode dizer sobre a "localização" do elétron quando está em seu estado fundamental? Para conhecer a sua provável localização devemos calcular a distribuição de probabilidade associada. Como o problema é tridimensional, procura-se achar a probabilidade em um determinado volume. A densidade de probabilidade radial, dada por $|\psi|^2$ vezes o volume da casca esférica que tem raio r e espessura dr é $P(r)dr = |\Psi|^2 4\pi r^2$. Esta densidade, ilustrada à esquerda na Figura 2, tem simetria esférica ou seja depende apenas de r com valor máximo em r = a_0. No gráfico à direita na Fig. 2 tem-se P(r) em função do raio. Em contraste com o modelo de Bohr, onde o elétron do átomo permanece em "uma órbita definida", de fato quando o elétron do átomo tem a menor energia possível podemos encontrá-lo a distâncias variadas do núcleo. A distância mais provável, no entanto, é a_0 (o raio de Bohr) e a probabilidade de encontrar o elétron a uma distância muito maior que a_0, é muito pequena.

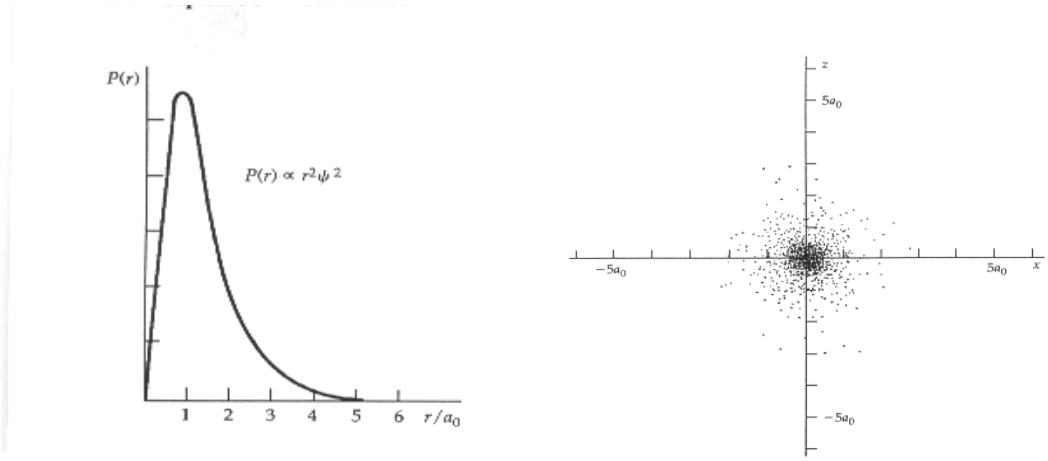


Figura 2

Na Fig. 3 aparecem as distribuições de probabilidades para outros dois possíveis estados do elétron. Nestes casos, não há simetria esférica e as funções de onda dos estados são

$$\Psi_{210} = C_{210}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}\cos\theta$$

$$\psi_{21\pm1} = C_{211}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}\,\mathrm{sen}\,\theta e^{\pm i\phi}$$

Distribuições de carga semelhantes a estas para os elétrons de valência de átomos mais complicados são importantes na química das ligações moleculares.

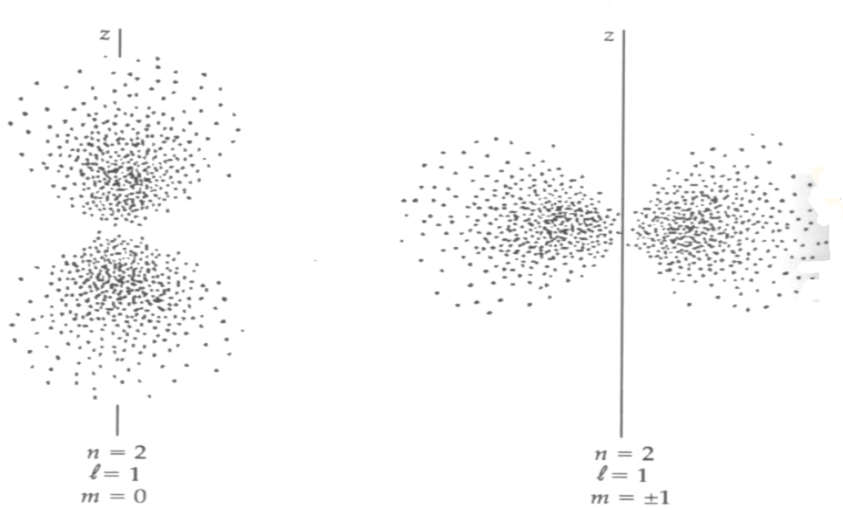


Figura 3

Exercícios

6. Qual, na sua opinião, seria o "tamanho" do átomo de hidrogênio?
7. Pode-se imaginar os orbitais como "trajetórias" percorridas pelo elétron?
8. Achar os valores de Ψ, $|\Psi|^2$ e a densidade de probabilidade radial em $r = a_0$ para o estado fundamental do átomo de hidrogênio. Dar as respostas em função de a_0.
9. Para um átomo de hidrogênio no estado fundamental, achar a probabilidade de se encontrar o elétron no intervalo $\Delta r = 0{,}02\ a_0$ no entorno de $r = a_0$ e no entorno de $r = 2\ a_0$.

Bibliografia

Quantum physics. Berkeley Physics Course, Vol. 4 de E Wichmann, E. Massachusetts: McGraw-Hill Book Company, 1971.

"IMPRESSÕES DIGITAIS" DOS ÁTOMOS

Ao estudar o átomo de hidrogênio vimos que seu elétron pode encontrar-se em determinados estados de energia, caracterizados pelo numero quântico *n*. Em particular, o elétron tende a estar no estado de menor energia, o estado fundamental. Para átomos com mais de um elétron os estados de energia permitidos para os elétrons são descritos em grande parte pelo número quântico principal *n* (relacionado com a dependência radial da solução) e pelo numero quântico orbital *l* (relativo ao momento angular dos elétrons). Os valores de *n* e *l* especificam a configuração eletrônica .

À medida que se reúnem elétrons para constituir átomos mais pesados, os elétrons tendem a ocupar os estados de menor energia possível. Em geral, para um mesmo *l*, quanto menores são os valores de *n* mais baixa é a energia. Há, no entanto, um princípio importante que governa a configuração eletrônica dos átomos. É o chamado Princípio de Exclusão de Pauli, segundo o qual dois elétrons não podem estar no mesmo estado quântico, ou seja, dois elétrons não podem ter exatamente o mesmo conjunto de números quânticos. Recorde-se que ocorriam restrições correspondentes aos números quânticos *n* (inteiro maior que zero), ao número quântico *l* (valores inteiros desde 0 até *n* -1) e ao número quântico *m* (valores inteiros desde -*l* até +*l*). Como o elétron é uma partícula com spin (momento angular intrínseco) 1/2 podemos acrescentar o número quântico m_s que só pode tomar valores +1/2 e -1/2.

Para formar, então, os átomos mais pesados, os elétrons se alocarão nos estados coerentes com o Princípio de Exclusão de Pauli, que propiciem a energia total mais baixa.

Quando um átomo está num estado excitado, i. e., quando um ou vários de seus elétrons estão em estados de energia maior do que as que lhes corresponderia se estivessem no estado fundamental, os elétrons realizam transições para os estados de energias mais baixas e, nestas transições, emitem energia. Um átomo pode ser excitado para um estado de energia mais elevado, por exemplo, bombardeando-se o átomo com um feixe de elétrons. De fato, se um átomo, no estado fundamental, colide com um elétron muito energético, o elétron pode transferir parte de sua energia ao átomo, fazendo com que este passe a um estado de energia maior. A radiação emitida quando um átomo passa de um estado mais excitado para outro de menor energia gera o espectro de emissão.

Como os níveis de energia dos elétrons nos átomos excitados são discretos, somente é emitida radiação de determinados comprimentos de onda. Este fato está relacionado com um dos aspectos mais intrigantes da Natureza qual seja o de que cada elemento químico (não só os átomos, mas também as moléculas) tem um espectro ótico único, uma "impressão digital" própria com a qual é possível identificá-los. Isto estudam os químicos e os físicos para determinar a estrutura dos diferentes compostos químicos e isto também é o que estudam os astrônomos para determinar as composições químicas de estrelas ou planetas distantes.

Estas "impressões digitais", os chamados espectros de energia (vide Fig.1), estão então relacionadas aos níveis de energia característicos (ou seja, os níveis de energia permitidos pela equação de autovalores) para os átomos e moléculas. A freqüência da

radiação emitida está relacionada às energias inicial e final dos estados da transição, e é dada por $f = \frac{E_i - E_f}{\hbar}$, onde E_i é a energia inicial, E_f a final e h a constante de Planck. O comprimento de onda da radiação está relacionado com a freqüência por $\lambda = c/f$.

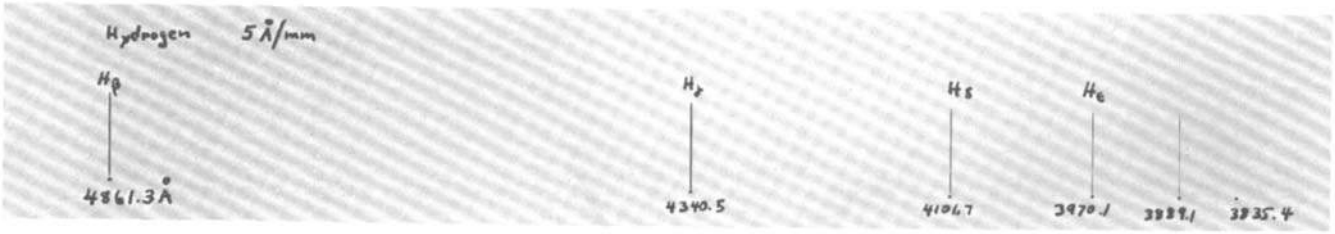


Figura 1. Espectro de H_2. (λ em Amstrongs)

Exercícios

1. Podem dois elétrons do átomo estar no estado fundamental (n = 1, l = 0, m_l = 0) e ter em ambos as projeções do spin "para cima"?
2. Descreva as configurações do hélio e do lítio no estado fundamental.
3. A qual dos elementos químicos hélio ou lítio, no estado fundamental, será menos dispendioso em energia (i. e., a qual dos dois será mais fácil) "arrancar" um elétron?
4. O que ocorre com o elétron de um átomo de hidrogênio que está inicialmente no estado fundamental quando interage com outra partícula que tem energia suficiente para ceder 2 eV?
5. Pode um elétron de um dado átomo transitar para um estado deste átomo que já esteja completo?

Salto quântico

Um fenômeno quântico, vinculado à transição entre níveis de energia, que desaparece quando vários átomos estão presentes é o chamado salto quântico. Transcorreram mais de 50 anos desde o desenvolvimento da Mecânica Quântica antes que fosse observado experimentalmente. Este mecanismo já fora proposto por Bohr em seu modelo de átomo de hidrogênio como mecanismo de transição (instantânea) entre os estados internos do átomo na absorção de um quantum de luz, mas foi contestado por muitos pesquisadores, inclusive o próprio Schrödinger que não acreditava na sua existência, apregoando que nunca se poderia "experimentar" com um só átomo ou elétron para verificá-lo. Estes saltos foram finalmente observados em íons de Ba, Hg, Mg, Ca e In e ainda em grandes moléculas (1995). O dispositivo, proposto por Dehlmet (1975), para observá-los e usado por primeira vez por Cook e Kumble (1987), funciona

como um "amplificador atômico" de detecção de transições entre estados muito estáveis, e é constituído por um íon frio que tem três níveis de energia. No esquema proposto, em forma de V (Fig. 2), encontram-se acopladas duas transições, uma permitida (do estado 2 ao 1) e uma proibida ou instável (de 3 ao 1).

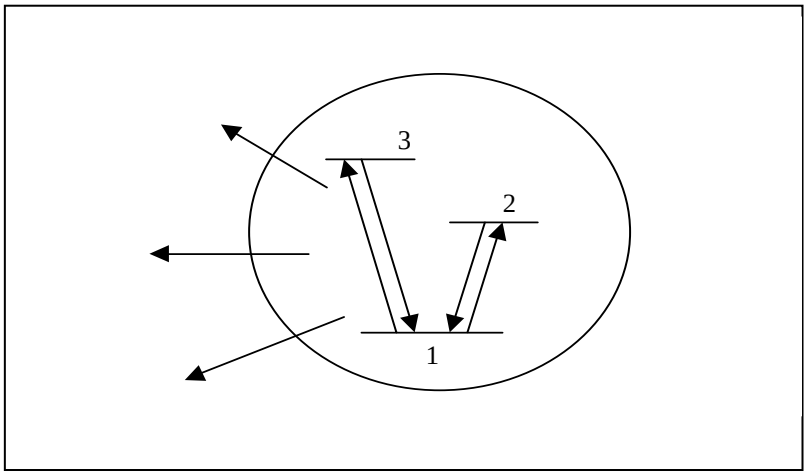


Figura 2

O íon no estado 1 é excitado de modo a que ocorram as duas transições (ao estado 2 e ao estado 3). A idéia é que a transição do estado de energia mais baixo ao estado mais alto (1 a 2) seja a que provoque uma forte emissão espontânea pois é a transição permitida. Mas algumas vezes a transição menos provável, ou seja, a mais fraca(1 a 3), pode vir a ser excitada, levando o átomo a um estado metaestável, e interrompendo a emissão de freqüência do outro nível. Ou seja, se se "ilumina" (se excita) o átomo com um laser que sintoniza a transição 1 a 2, o sistema se mantém entre esses estados, emitindo um fóton cada vez que o íon volta ao estado de menor energia (1). Assim, a detecção de fótons significa que o íon está transitando entre os estados 1 e 2. Esta emissão significa que o íon passou do estado 2 ao estado 1. Se agora se aplica outro laser, que permite a transição 1 a 3 (ou seja, que dá ao íon a energia necessária para que passe ao estado 3), algumas vezes ocorrerá tal transição. Estando o átomo no estado metaestável 3, a fluorescência correspondente à transição 1 a 2 deixará de ser observada, produzindo-se então um corte abrupto no fluxo dos fótons emitidos. Se a transição permitida tem uma vida média de 10^{-8} segundos e o estado metaestável, vida de 1 segundo, o salto produz uma amplificação de 10^{8}, passando a ser um sinal "macroscópico". Esta fluorescência recomeçará quando o átomo volte a cair ao nível fundamental por emissão espontânea. Ainda que o sistema seja excitado "continuamente", ele não responde de maneira contínua senão que apresenta a fluorescência da transição permitida interrompida de forma aleatória por *longos períodos de escuridão*. A presença ou ausência de luz fluorescente informa sobre o estado interno da partícula atômica (Vide Fig. 3). Este tipo de comportamento se perde quando se tem muitas partículas, pois os intervalos escuros decrescem significativamente em comparação aos do átomo isolado, dado que os períodos de emissão de várias das partículas se sobrepõem parcialmente sobre os de não emissão (escuridão) as outras. Este tipo de comportamento, o salto quântico, não tem análogo clássico.

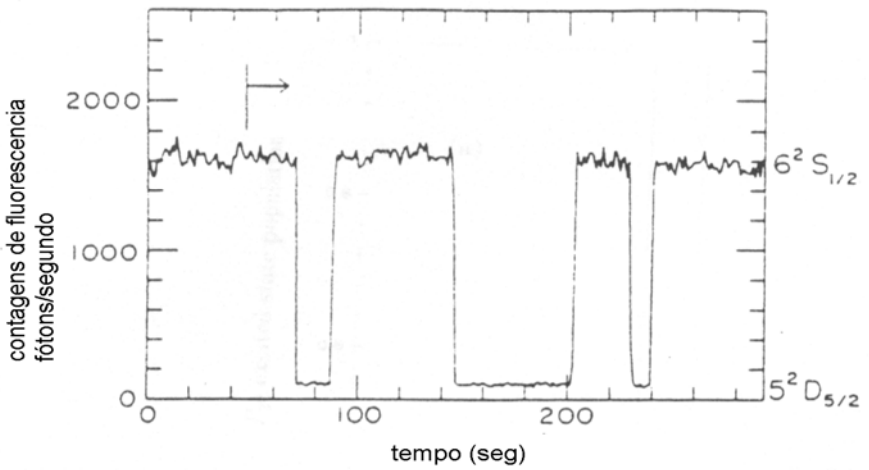


Figura 3

Exercício

6. Tente explicar porque o comportamento que resulta no salto quântico não tem análogo clássico. Exemplifique.

Paradoxo do Gato de Schrödinger

Devido ao seu caráter "antiintuitivo", a Mecânica Quântica gerou, desde suas origens, polêmicas a respeito de sua forma de descrever o mundo. Importantes cientistas como Einstein e Schrödinger, que contribuíram para o desenvolvimento da Mecânica Quântica, expressaram suas críticas e dúvidas na forma de paradoxos, ou seja na forma de argumentações que, **aparentemente**, geravam a partir dos conceitos aceitos pela Mecânica Quântica, situações absurdas. Responder a estes paradoxos serviu para melhorar a compreensão do mundo microscópico descrito pela Mecânica Quântica. É importante destacar que originalmente os paradoxos estavam propostos como "experimentos pensados" pois não se dispunha na época da tecnologia necessária para poder "enxergar" muitos aspectos do mundo microscópico. Ou seja, ainda que as **conseqüências** derivadas da Mecânica Quântica tenham servido de base para o desenvolvimento de importantes áreas científicas e tecnológicas, vários de seus próprios fundamentos não foram testados **diretamente** de forma experimental por muitos anos.

Um paradoxo famoso é o chamado paradoxo do Gato de Schrödinger. Neste paradoxo busca-se salientar como um pressuposto da Mecânica Quântica, que é a superposição de estados, poderia gerar situações absurdas quando levado ao nível macroscópico. Sabemos que a equação de Schrödinger incorpora todo o conhecimento possível acerca do objeto quântico que está sendo descrito pela equação, incluindo, por exemplo, seus possíveis (auto)estados de energia. Ou seja, a função de onda indica que os objetos quânticos podem estar em um estado que é superposição de todos (ou de alguns) possíveis estados de energia (ou momento, ou posição ou spin) simultaneamente. Por exemplo, a função de onda do spin pode ser uma superposição de

projeções de spin para cima e de projeções de spin para baixo. No entanto uma observação de uma propriedade física "obriga" a função de onda que descreve os objetos quânticos a "**colapsar**" a um só dos autoestados associados à propriedade física, dando assim o resultado da medição.

Se a Mecânica Quântica é mais fundamental que a Mecânica Clássica e deve servir para explicar não só os objetos microscópicos mas também os objetos macroscópicos construídos a partir dos objetos microscópicos, por que não observamos a superposição de estados distintos no nosso cotidiano? Para ressaltar o que significaria a superposição de estados para objetos macroscópicos e o absurdo a que isso, se fosse verdade, conduziria, o próprio Schrödinger em 1935 formulou o seu hoje famoso paradoxo nos seguintes termos (veja, por exemplo, Nussenzveig, 1998, p.413):

"Um gato em uma câmara de aço, juntamente com o seguinte mecanismo diabólico (inacessível ao gato): dentro de um contador Geiger, há uma pequena quantidade de material radioativo, tão pequena que no decurso de uma hora *talvez* um único átomo se desintegre, mas com igual probabilidade de que isto não aconteça. Se acontecer, o contador, através de um relais, ativa um martelo, que quebra um frasco de ácido prússico. Deixando o sistema isolado durante uma hora, resulta que o gato estará vivo caso nenhum átomo se desintegre ao longo deste período, mas que uma única desintegração basta para envenená-lo. A função de onda do sistema todo representa essa situação como uma superposição de gato vivo e de gato morto em partes iguais".

$$\left|\Psi_{gato}\right\rangle = \left(\tfrac{1}{2}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\left|vivo\right\rangle + \left|morto\right\rangle\right)$$

Ou seja, não é que apenas exista uma probabilidade que o gato esteja vivo e uma probabilidade de que o gato esteja morto, senão que ambas situações (ambos estados) **coexistem**. O paradoxo continua dizendo que se abrirmos a câmara encontraremos aleatoriamente um gato vivo ou um gato morto.

Com base nestas contestações muitas têm sido as vozes a dizer que a "superposição de estados" é só um efeito matemático decorrente do desconhecimento completo sobre o estado do sistema, o que é **incorreto**.

Certamente um dos aspectos mais fantásticos da questão da superposição de estados então é que na segunda metade desta década, cientistas têm conseguido criar "Gatos de Schrödinger" em pequena escala. Estes "gatos" são elétrons individuais e átomos que podem se encontrar em dois lugares simultaneamente. Em particular, em 1996, um grupo de cientistas do *National Institute of Standards and Technology* dos Estados Unidos criaram um "gato" com um íon de berílio. Primeiro "aprisionaram" o íon com campos eletromagnéticos e com ajuda de lasers o "congelaram" perto do zero absoluto. A seguir, com feixes de dois lasers com freqüências levemente distintas manipularam a projeção do spin do íon de forma a conseguir que o íon ficasse em uma superposição de projeções de spin para cima e de spin para baixo. Mediante um certo mecanismo conseguiram mostrar o estado da superposição com spin para cima separado de uma distância de 80 nanômetros (1 nanômetro = 10^{-7}cm) do estado com spin para baixo. Para a escala atômica (com distâncias da ordem de 10^{-8} cm - raio de Bohr - a 10^{-7} cm), 80 nanômetros é uma distância grande (como 80 metros frente a um metro).

Exercícios

7. Como seria a forma aproximada da função de onda dos objetos quânticos que passam pelas duas fendas na experiência de Young?
8. Discuta o paradoxo do Gato. Porque não se observam os fenômenos de superposição ao nível macroscópico?
9. Com relação ao Gato de Schrödinger, qual é a probabilidade de encontrar o gato vivo **depois** de abrir a caixa ?
10. Um conjunto de sistemas atômicos, preparados todos do mesmo modo, é submetido a uma série de medidas de energia, obtendo-se para alguns sistemas E1, para outros E2, etc. Como se pode interpretar tal resultado? Estamos particularmente interessados em obter alguma informação sobre o estado do sistema antes da medida.

Bibliografia

Curso de Física Básica, Volume IV, M. Nussenzveig, Editora Edgard Blüchter, 1998.
Quantum physics. Berkeley Physics Course, Vol. 4 de E Wichmann, E. Massachusetts: McGraw-Hill Book Company, 1971.
Illusion or reality: the measurement process in quantum optics de A. Schenzle. *Contemporary Physics*, Vol. 37, nro. 4, pp. 303-320. 1996.

COMO SABER SOBRE A EXISTÊNCIA DE UM OBJETO SEM INTERAGIR COM ELE.
(OU COMO É POSSÍVEL, NO MUNDO QUÂNTICO, VER NA ESCURIDÃO.)

Um fabricante conseguiu inventar uma classe de bombas, cheias de um gás altamente combustível, que explodem quando são atingidas por um único fóton. Dadas estas características, o processo de produção deve ser realizado na escuridão. Depois de construídas as bombas descobriu-se que por algum tipo de problema na fabricação algumas estavam cheias e outras não, pois sobrou parte do gás combustível. Como se poderia saber quais eram as bombas "boas" (que funcionavam), sem perder toda a produção?

Exercício

1: Por que o fabricante perderia toda sua produção?

O fabricante, desesperado, se encontrou com um amigo, por acaso físico, que lhe disse ser possível salvar parte dessa produção. (Naturalmente o fabricante, antes de obter a sua ansiada resposta, teve que assistir a uma aula de Mecânica Quântica.) Vamos agora discutir qualitativamente o problema e depois fazer algumas contas.

Um dispositivo muito usado em Física, o interferômetro, que aparece na Fig. 1, permite separar um raio de luz incidente em dois, de modo que na saída do interferômetro é possível observar fenômenos de interferência. O dispositivo, que consta de 2 espelhos que refletem completamente a luz que chega até eles e 2 semiespelhos que transmitem uma parte dos raios que chegam até eles e refletem a outra parte, possui também dois detetores com alarmes na saída de forma que a "interferência construtiva" é detectada por um detector D_1, enquanto D_2 coleta a "interferência destrutiva". Imaginemos que a fonte só emite um fóton por vez e que o interferômetro é ajustado de tal modo que só toca o alarme do detector D_1, ou seja, só chegam fótons a este detector.

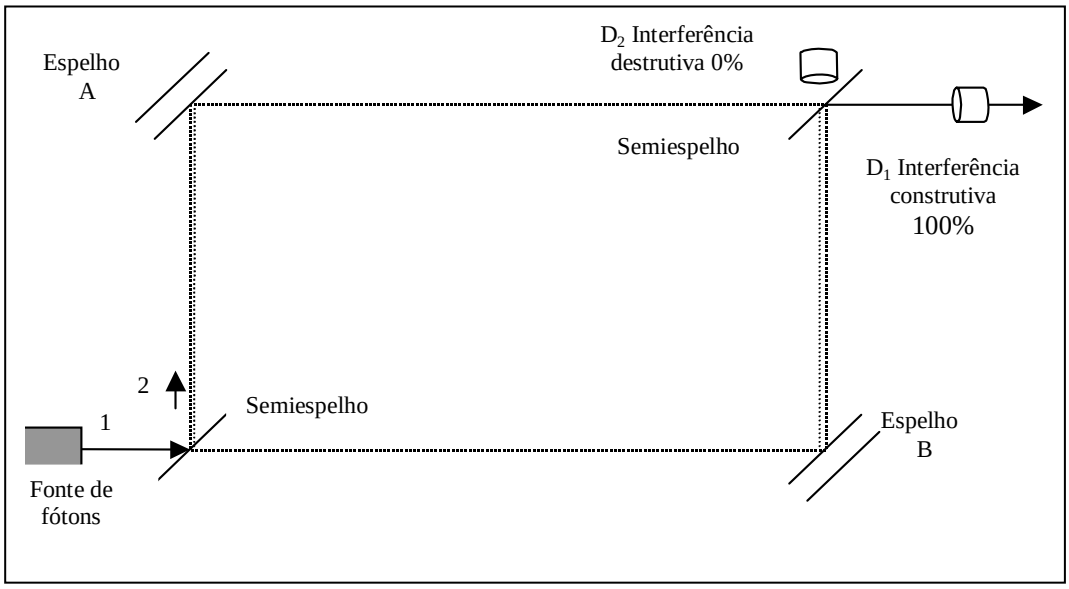


Figura 1

Exercício

2. Por que se obtém padrão de interferência para um fóton?

O que aconteceria se colocássemos um objeto bloqueando a passagem dos fótons por uma das direções? Os fótons que chegarem ao objeto (Fig. 2) são absorvidos, portanto se pode determinar por qual caminho passou cada fóton. Sabemos, pela experiência de Young, que se é possível determinar o caminho pelo qual passou um objeto quântico, não mais se obtém o padrão de interferência, existindo portanto probabilidades iguais de que o fóton seja detectado em cada um dos dois detetores.

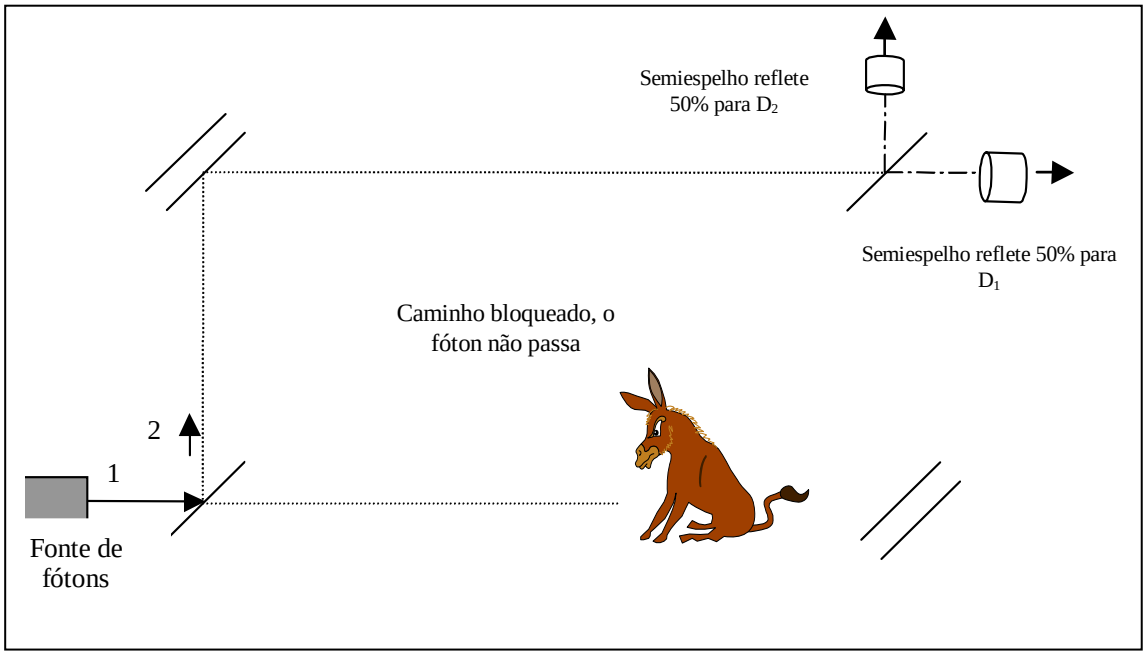


Figura 2

A interferência quântica acontece se não existe em princípio qualquer forma de determinar por qual dos caminhos alternativos o fóton (ou outro objeto quântico elementar) passou. Se, de alguma forma, podemos conhecer por onde passou, então a interferência desaparece.

Vejamos agora como auxiliar o nosso aflito fabricante com tal dispositivo. Coloquemos a bomba no interferômetro, bloqueando um dos caminhos. Se a bomba é ruim (ou seja, está sem gás, Fig. 3), é transparente e os fótons podem atravessá-la sem problemas e portanto soará apenas o alarme do detector D_1, pois se produzirá interferência. Este caso é idêntico ao da Fig. 1.

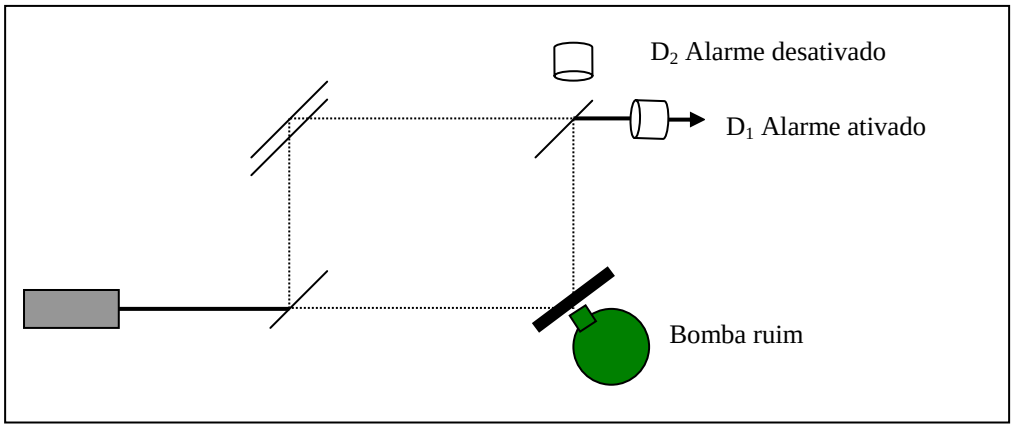


Figura 3

Exercício

3. Qual é a diferença entre as contribuições em D_1 para os casos apresentados nas Fig. 2 e 3?

Se a bomba, pelo contrário, é boa, i.e., está cheia de gás, pode absorver fótons e se poderia determinar em princípio o caminho escolhido pelos fótons. Portanto, não haverá padrão de interferência, podendo os fótons ser detectados tanto por D_1 como por D_2 aleatoriamente, pois o último semiespelho pode transmitir ou refletir aleatoriamente os fótons que chegam até ele, como acontece na Fig. 2.

Exercício

4. Por que não podem soar os alarmes dos dois detetores simultaneamente?

Neste caso, se se escuta o alarme de D_1 (Fig. 4) não se pode distinguir do caso anterior em que a bomba era ruim. Se se escuta o alarme de D_2 (Fig. 5), se sabe que a bomba é boa. Se se escuta o *Bang!* saberemos que a bomba era boa....(Fig. 6)

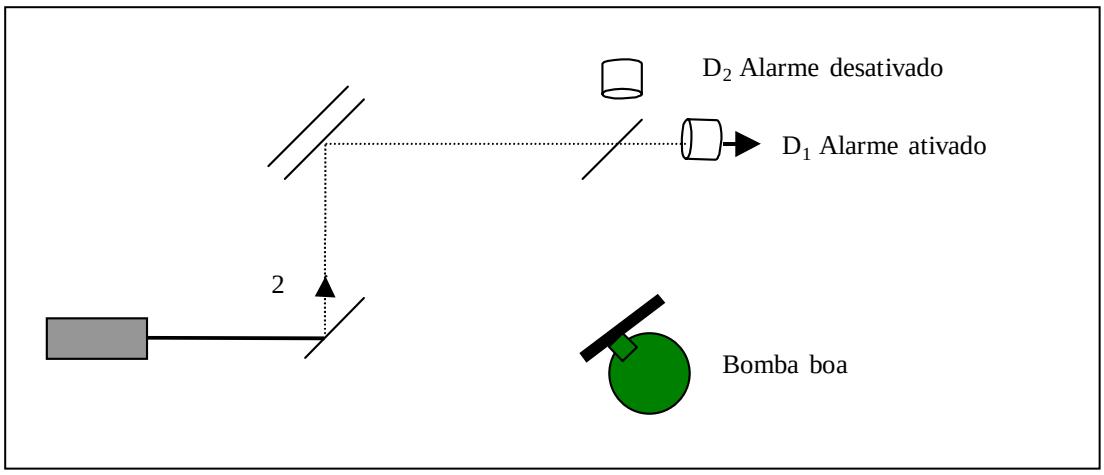


Figura 4

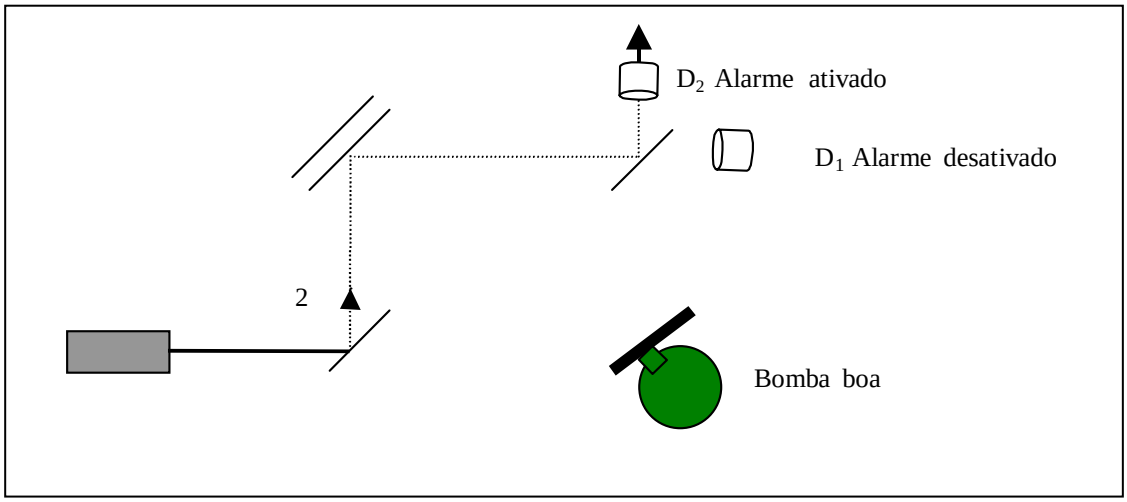


Figura 5

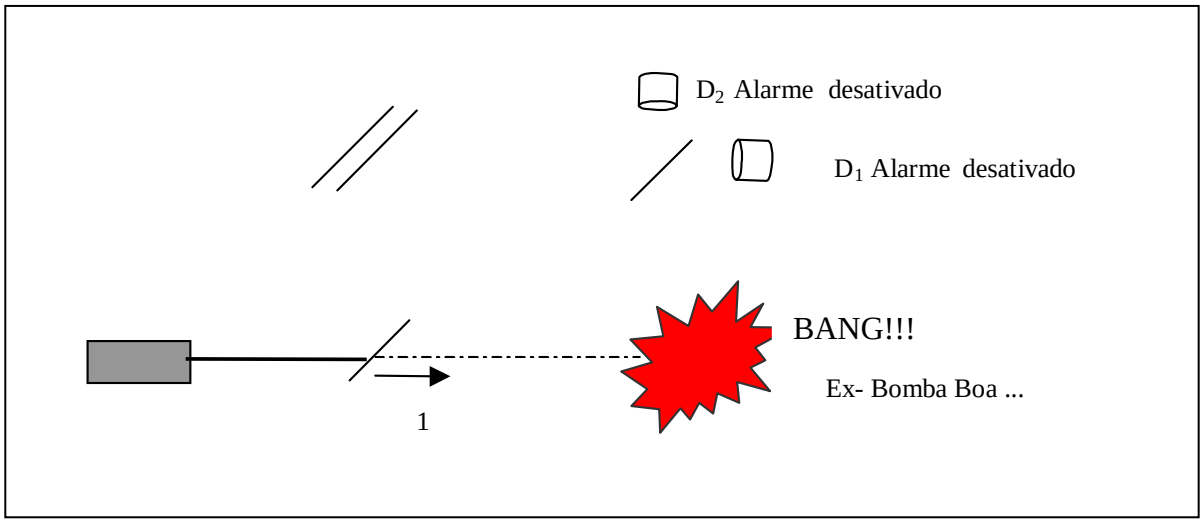


Figura 6

Exercícios

5. Por que se pode saber que a bomba está cheia de gás ao escutar o alarme de D_2?
6. Completar a seguinte planilha:

Estado da Bomba	Caminho do fóton	Padrão de interferência	Observação experimental	Conclusão

No terceiro caso (Fig. 5), quando se ouve o detector D_2, consegue-se uma informação (que a bomba colocada estava cheia de gás) **sem interagir** com o objeto (pois, se o fóton tivesse interagido com a bomba, esta teria explodido). Ou seja, ainda

que o fóton percorra o caminho onde não está a bomba, “tem-se” informação sobre o outro caminho que poderia ter escolhido. Ou seja, esta é uma "medida", sem o risco da interação com o objeto. Dispositivos utilizando estes fundamentos poderiam, por exemplo, "fotografar" átomos, sem mudar seu estado. Experiências mostrando que isto pode ser feito na prática foram desenvolvidas na Universidade de Innsbruck, Austria, em 1995.

Exercícios

7. Por que esta experiência não tem contrapartida no mundo clássico?

8. Determinar a probabilidade de que o alarme do detector D_1 dispare quando o recipiente da bomba está vazio, sabendo que:

$|1\rangle$ representa o fóton no caminho 1,

$|2\rangle$ representa o fóton no caminho 2,

que o espelho muda a direção do fóton (reflexão) segundo $|1\rangle \rightarrow \mathrm{i}\,|2\rangle$ e $|2\rangle \rightarrow \mathrm{i}\,|1\rangle$,

que o semiespelho muda a direção do fóton (reflexão e transmissão) segundo

$|1\rangle \rightarrow (1/2)^{1/2}\left[|1\rangle + i|2\rangle\right]$ e $|2\rangle \rightarrow (1/2)^{1/2}\left[|2\rangle + i|1\rangle\right]$

9. Determinar a probabilidade de que a bomba esteja cheia de gás, sem interagir com ela.

Para o caso, então, de que se disponha de um dispositivo do tipo proposto aqui, existe uma probabilidade de 1/4 de poder detectar as bombas boas. Pode-se mostrar que a probabilidade de "medições livres de interação" pode aproximar-se arbitrariamente a 1 se se dispõe de um número grande de dispositivos.

Exercício

10. Quais propriedades dos objetos quânticos permitem fazer estas medições livres de interação?

Bibliografia

"Quantum bombing reality", de S. Adams, *Physics Education*, 1998.Vol. 33, n^0 6, pp. 378-385.

"*Interaction-free measurement"*, de P. Kwiat, H. Weinfurt, T. Herzog, A. Zeilinger e M. Kasevich, *Physical Review Letters*, 1995. Vol. 74, n^0 24, pp. 4763-4766.

TELEPORTAÇÃO

Nas historias de ficção científica (por exemplo, em Jornada nas Estrelas), os personagens muitas vezes se "teletransportam", desintegrando-se em um lugar, enquanto uma réplica aparece em outro. Pareceria que este sistema consistisse de um "*scanning"* do original extraindo toda a informação sobre ele, da transmissão mais ou menos instantânea[12] desta informação ao receptor e da construção de uma réplica do original, formada por átomos similares em arranjos exatamente iguais aos do original. Este processo, ainda que similar ao de um *fax*, trabalha com objetos em três dimensões e cria uma réplica exata do original, não só um fac-símile aproximado. Além disto o original é, em geral, destruído. Desta forma a **teleportação** não seria um duplicador de corpos, mas sim um super dispositivo de transporte. Esta tecnologia ainda não existe, mas caberia perguntar se algum dispositivo de transporte deste tipo poderia ser construído um dia.

Até pouco tempo atrás a "teleportação" não era considerada seriamente porque se pensava que violaria o Princípio de Incerteza. No entanto em 1993 um grupo de físicos mostrou que a teleportação seria possível, em princípio, mas apenas se o original fosse destruído. Mais do que isso, em 1998, cientistas do Instituto de Tecnologia da Universidade de Califórnia nos Estados Unidos, da Universidade de Aarhus na Dinamarca e da Universidade de Gales, no Reino Unido, conseguiram criar uma réplica perfeita de um raio de luz a uma certa distância do mesmo.

Exercício

1. Por que a teleportação violaria o Princípio de Incerteza?

O impedimento dado pelo Princípio de Incerteza é superado mediante a utilização de outra característica peculiar do mundo quântico, que é a não-localidade. Segundo esta propriedade sob determinadas circunstâncias dois objetos quânticos que interagiram, continuam "emaranhados" (relacionados) de forma que perturbações em um deles afetam instantaneamente o outro, ainda que os dois objetos estejam muito distantes.

A teleportação quântica é um fenômeno de transmissão de informação, pois permite transferir o estado de um objeto quântico a outro objeto quântico, desde que não se procure ter informação sobre tal estado no transcurso da transmissão.

A explicação tradicional do processo nos faz imaginar que "Alice" é possuidora de uma partícula (P_1) em um estado $\left|\Psi\right\rangle_1$ e que "Bob", muito distante dela, é pretendente a possuir uma partícula neste mesmo estado $\left|\Psi\right\rangle_1$. Para tornar isto viável, um par de partículas correlacionadas (emaranhadas) (P_2 e P_3), participará da operação.

Desejando tornar a operação o mais simples possível imaginemos que as partículas individuais só possam existir em dois estados, que batizamos (como os

[12] Em Jornada nas Estrelas os personagens viajam em um "subespaço" que lhes permite superar a velocidade da luz.

qubits) de $|0\rangle$ e $|1\rangle$. Inicialmente Alice possui P_1 e P_2 e Bob possui P_3, sendo que P_1 está no estado $|\Psi\rangle_1$ (não necessariamente conhecido) e P_2 e P_3 estão "emaranhadas" no estado $|\Psi\rangle_{23} = \left(\frac{1}{2}\right)^{1/2}\left(|0\rangle_2|1\rangle_3 - |1\rangle_2|0\rangle_3\right)$.

O estado emaranhado escolhido implica que as duas partículas (P_2 e P_3) estão em uma superposição de estados, mas não fornece informação acerca do estado de cada partícula individual. Somente indica que as duas estão em estados opostos (distintos). Assim, ao efetuar uma medição sobre uma delas o estado da outra fica instantaneamente determinado.

Para realizar a teleportação devemos "emaranhar" P_1 e P_2 no estado $|\Psi\rangle_{12} = \left(\frac{1}{2}\right)^{1/2}\left(|0\rangle_1|1\rangle_2 - |1\rangle_1|0\rangle_2\right)$(projetar o par ($P_1$,$P_2$) neste estado).

Se isto ocorrer, então saberemos que P_3 está no estado $|\Psi\rangle_1$ pois no estado $|\Psi\rangle_{12}$, qualquer que seja o estado da partícula P_1, a partícula P_2 deve estar no estado oposto. Mas como P_2 e P_3 também estão em estados opostos, P_3 necessariamente estará, ao final, no estado $|\Psi\rangle_1$.

Observe-se que, como para as partículas P_1 e P_2 os estados emaranhados possíveis são

$|\Psi\rangle_I = |0\rangle_1|0\rangle_2$,

$|\Psi\rangle_{II} = \left(\frac{1}{2}\right)^{1/2}\left(|0\rangle_1|1\rangle_2 + |1\rangle_1|0\rangle_2\right)$,

$|\Psi\rangle_{III} = \left(\frac{1}{2}\right)^{1/2}\left(|0\rangle_1|1\rangle_2 - |1\rangle_1|0\rangle_2\right)$ e

$|\Psi\rangle_{IV} = |1\rangle_1|1\rangle_2$,

há 25 % de probabilidade de encontrá-las no estado desejado ($|\Psi\rangle_{III}$ em nosso exemplo), mas sempre que isto ocorrer, teremos "teletransportado" o estado inicial de P_1 a P_3 (ao final).

Como experimentalmente já foram "construídos" estados emaranhados em distâncias da ordem de 10 km, a teleportação poderia ocorrer em distâncias desta magnitude.

Foram usados fótons na experiência de teleportação, com polarizações horizontal e vertical.

Vale a pena salientar que a partícula 1 não está mais disponível no estado $|\Psi\rangle_1$, quando ocorrer a teleportação, pois foi emaranhada com a partícula 2, e não foi mencionada qualquer tentativa de determinar o estado $|\Psi\rangle_1$.

Para pesar dos amantes da ficção científica, parece difícil que este processo possa ser usado para transportar estados de objetos macroscópicos (seres humanos, por exemplo), em um futuro razoavelmente próximo. De fato, para contar uma das dificuldades associadas pergunta-se qual o tamanho da informação necessária para "teleportar" um objeto similar a um ser humano. Segundo o *American National Institute of Health* seriam necessários 10 *Gigabytes* para uma descrição do corpo humano em três dimensões com resolução de um milímetro. Para uma descrição com resolução de 1 átomo, seriam precisos 10^{32} bits, informação esta que para ser transmitida, ainda com as melhores fibras óticas, levaria cerca de 100 milhões de séculos. Empacotando isso em *Cdrom*, estes formariam um cubo de 1000 km de lado.

Passagem ao mundo macroscópico

Se a Mecânica Quântica é mais fundamental que as teorias clássicas, descrevendo o comportamento dos constituintes dos objetos macroscópicos, por que praticamente não observamos seus efeitos no mundo macroscópico? Por que não observamos padrões de interferência em uma experiência como a de Young quando utilizamos balas, ou superposição de estados "gato vivo - gato morto", estados emaranhados, quantização de inúmeros observáveis , luz em pacotes, saltos de estados? Qual é enfim a relação entre o mundo descrito pela Física Quântica e o descrito pela Física Clássica?

Nos primórdios da Mecânica Quântica, Bohr enunciou o chamado Princípio de Correspondência, que fazia a "ponte" entre as duas descrições. Segundo este princípio, a Física Clássica devia ser obtida como caso limite da Física Quântica. O Princípio de Correspondência ademais permite sugerir candidatos a grandezas observáveis, questão esta muito importante para que se possa saber que propriedades do mundo microscópico podem ser medidas. Como um objeto macroscópico é um agregado de objetos microscópicos, é possível extrapolar ao domínio quântico determinadas propriedades dos objetos macroscópicos. Isso fizemos, por exemplo, com a energia de um sistema ligado. Outras dessas grandezas são a posição, o momento linear e o momento angular. Estas propriedades devem recuperar a informação clássica no limite macroscópico. Ao longo deste curso, vimos alguns destes casos.

Exercícios

2. Em que situação se recupera a descrição clássica para os estados de energia do átomo de hidrogênio?
3. Em que situação se recupera a descrição clássica para a posição de um objeto quântico confinado a uma caixa unidimensional?

O Princípio de Correspondência, no entanto, nada diz sobre o que acontece com o estado quântico de um sistema em confronto com o conceito clássico de estado. Por exemplo, o Princípio de Correspondência não explica porque se perde a coerência entre

os estados superpostos do paradoxo do Gato de Schrödinger fazendo com que não se observe esse fenômeno para objetos macroscópicos. Lembremos que o estado do sistema antes da medição é uma superposição coerente de gato vivo e gato morto. Saber por que isto acontece é importante tanto desde o ponto de vista teórico, como também do tecnológico. Lembremos que o sucesso da computação quântica passa pela possibilidade de manter informação em estados superpostos ao longo de todo o processo de cálculo. O problema é que isto não é uma tarefa fácil. Por causa da **descoerência** (propriedade que impede que possamos observar na escala macroscópica a superposição de estados) a superposição dos estados quânticos se desvanece muito facilmente.

Recentemente ocorreram avanços importantes na elucidação de por quê acontece a descoerência. Quando se descreve um sistema macroscópico, observa-se somente uma parte muito pequena das variáveis necessárias para descrever o estado quântico do sistema, ocorrendo assim perda de informação. Em particular, não temos informação a respeito de muitas das interações do sistema físico com o meio circundante - por exemplo, a colisão de um átomo com outro átomo, que já constitui uma "medição" que pode levar o sistema a "optar" por um particular estado.

De fato, o tempo de descoerência é inversamente proporcional ao "grau de macroscopicidade" do sistema, o que faz com que a descoerência ocorra numa escala de tempo muitas ordens de grandezas menor que a dos tempos usualmente observáveis, passando assim desapercebida.

Segundo Nussenzveig (1998, p. 414) "A interação com o ambiente parece ser responsável, ao menos em parte, pelo carácter probabilístico da teoria quântica.....É um grande mérito - e não um defeito - da teoria quântica ter atingido a fronteira onde se torna aparente o efeito dessa interação sobre o mundo físico".

Exercício

4. Indique diferenças entre o conceito de estado na Física Quântica e o conceito de estado na Física Clássica.

Bibliografia

"Teleporting an unknown quantum state via dual classical and Einstein-Podolsky-Rosen channels" de C. Bennett, G. Brassard, C. Crépeau , R. Jozsa, A. Peres & W. Wootters, 1993, Phys. Rev. Lett. Vol. 70, pp. 1895-1899.

"Curso de Física Básica", Volume IV, de M. Nussenzveig, Editora Edgard Blücher, 1998.

"Experimental quantum teleportation" de D. Bouwmeester, J. Pan, K. Mattle, M. Eibi, H. Weinfurter e A. Zeilinger, 1997, Nature, Vol. 390, pp. 575-579.

LABORATÓRIO COMPUTACIONAL 1

O objetivo deste laboratório é o de você familiarizar-se com as soluções da equação de autovalores de energia de um elétron "confinado" a distintos potenciais. Serão usados para tanto modelos unidimensionais.

Vimos em aulas anteriores que um objeto quântico confinado a potenciais tipo caixa (E < V) não pode ter uma energia qualquer, senão que fica restrito a estados com determinados valores de energia. Esses estados são os chamados autoestados de energia e os autovalores correspondentes são as **únicas** energias permitidas para os objetos quânticos sob a ação desses potenciais. Isto significa que o espectro de energia é discreto: a energia está **quantizada**, podendo adotar somente os valores mencionados. O espectro discreto de energias é característico de partículas que estão confinadas.

Inicie o programa "*Bound States*" (Estados ligados)(c:..../vqm/vq_bs). Na esquerda da tela aparecerá um diagrama de um potencial, que corresponde a um poço finito quadrado. Aperte o botão esquerdo do mouse uma vez, em qualquer lugar dentro do poço. Este programa resolve a equação de Schrödinger para elétrons confinados a esses tipos de potencial. O gráfico da função de onda do elétron correspondente ao valor de energia escolhido aparecerá no lado direito da tela.

Exercícios

1: Para a energia que você escolheu, é a função de onda resultante uma onda estacionária? Justifique sua resposta.

2: A função de onda em questão é aceitável em termos de uma interpretação probabilística? Justifique sua resposta.

3: Como deve ser a função de onda que corresponde a um estado fisicamente aceitável?

Clique novamente dentro do diagrama do potencial, em algum lugar próximo ao do primeiro valor de energia escolhido. A função de onda resultante está mais próxima daquela que você considera aceitável?

Lembre que o módulo ao quadrado da função de onda representa a densidade de probabilidade da presença da partícula. Se a função de onda descreve o movimento de um elétron confinado a uma caixa, o elétron deve encontrar-se na caixa e portanto a soma das probabilidades deve ser igual a 1. Se a função de onda não cai a zero a grandes distâncias em ambos extremos do intervalo espacial, a probabilidade (total) de detectar o elétron no espaço todo pode ir a infinito. Por isso só tem sentido as funções de onda que caem a zero nos dois extremos do intervalo espacial, que determinam então os estados permitidos de energia.

4: Pode o elétron estar em estados em que a função de onda não caia para zero?

Use o programa para experimentar diversas energias até encontrar uma função de onda para um estado permitido. Para aproximar-se esta função, pode usar as teclas das setas, para pequenos saltos de energia.

5: Qual o valor aproximado da energia de um estado permitido para um elétron no diagrama de energia potencial?. Trace um gráfico aproximado da função de onda e da densidade de probabilidade para esse estado.

Tente encontrar outros estados permitidos para esse potencial. Em vez de repetir todo o processo descrito anteriormente, você pode usar o comando *Energies/List Eigenvalues* (Energia/Listar Autovalores). O programa calculará as energia dos estados permitidos.

6: Quais foram os estados permitidos? Trace um gráfico da função de onda e da densidade de probabilidade para esses estados.

Mude ora a largura, ora a profundidade do potencial. Para isso, abra a janela *Potential*, e utilize os comandos *Change Depth* (mudar a profundidade) e *Change Width* (mudar a largura). Ache os correspondentes autovalores de energias para cada caso. Desenhe a função de onda e a densidade de probabilidade para esses estados.

7: O que significa fisicamente a mudança de largura ou/e profundidade dos poços de potencial?

8: Como se altera o número de estados permitidos para o elétron com a largura do poço? Com a profundidade do poço?

9: Como é o espectro de energias para elétrons não-confinados aos potenciais apresentados acima?

Dissemos que o espectro discreto de energias é característico de objetos quânticos que estão confinados. Em um átomo, os elétrons ligados estão confinados, portanto só podem estar em alguns estados de energia.

10: Que propriedade(s) distingue(m) um átomo de um elemento químico de um átomo de outro elemento químico?

11: Como mudariam os diagramas de energia potencial para os diversos átomos de acordo com esta propriedade?

12: Diferentes elementos químicos terão distintos autovalores de energia? Justifique sua resposta. Pode utilizar o programa *Bound States* para isto.

Bibliografia

O programa "*Bound States*" é um *software* elaborado pelo ***Physics Education Research Group***, Kansas State University, dos EUA, no projeto "Visual Quantum Mechanics". Pode ser obtido na rede no site http://www.phys.ksu.edu/perg/vqm/programs/

LABORATÓRIO COMPUTACIONAL 2

O objetivo deste laboratório é o de você familiarizar-se com as soluções da equação de Schrödinger de objetos quânticos elementares sujeitos a potenciais do tipo "barreira" e compreender por que um microscópio de varredura por tunelamento pode medir uma superfície. Novamente usaremos modelos unidimensionais.

Começaremos estudando o que acontece em um potencial tipo degrau. Abra o programa *Quantum Tunneling.* Vá ao *File/Open* no menu principal e abra o arquivo *Step.txt*. Na parte superior da tela aparecerá o desenho de um potencial tipo degrau. Este tipo de potencial é muito semelhante ao que sofre um elétron no tubo de um aparelho de TV quando se aproxima da tela da TV. Na janela à esquerda aparecem os dados correspondentes ao potencial e à partícula, que podem ser mudados com os comandos *Barrier Parameters* e *Particle Parameters* que aparecem na janela inferior.

Clique na tela em *Redraw Graphs*. Depois de alguns segundos de cálculo, o programa mostrará, na seguinte janela da tela, a função de onda correspondente a um elétron nesse potencial.

Exercícios

1: Escreva os dados do potencial e da partícula. Desenhe a função de onda nas duas regiões. Como se modifica a probabilidade de encontrar o elétron à esquerda em relação à probabilidade à direita do degrau? (Na segunda janela, clicando em *Probability Density* e depois em *Redraw Graphs*, o programa desenha a densidade de probabilidade correspondente.)

A distância na região do degrau onde ainda há uma probabilidade significativa de se achar o elétron é chamada de "comprimento característico".

2: Se a energia total do elétron aumenta, como mudará o comprimento característico na sua opinião? Por que?.

Teste a sua predição, mudando a energia do elétron para 2,5 eV e para 3,5 eV. (Para variar a energia, utilize o cursor que aparece na escala na janela de *Particle Parameters*; depois clique em *Redraw Graphs* para cada caso).
3: Os resultados coincidiram com sua predição? Por que?

4: Se o elétron tem uma energia total maior que a energia potencial do degrau, como será sua função de onda? Apresente um gráfico da mesma.

Teste sua predição sobre a função de onda, mudando a energia do elétron para um valor maior que 4 eV. Observe a função de onda resultante. Desenhe a função de onda que o programa calculou.

5: A função de onda apresentado pelo programa coincide com a sua predição? Qual a razão para isto?

6: O que acontece na região em que a energia total do elétron é maior que a energia potencial do degrau? O que acontece na região em que a energia total do elétron é menor que a energia potencial do degrau? Relacione suas observações com o estudo feito na aula teórica.

7: Se o potencial é uma barreira finita, do tipo mostrado na Fig. 1, o que acontecerá com a função de onda de um elétron com energia total menor que a altura da barreira? Justifique sua resposta.

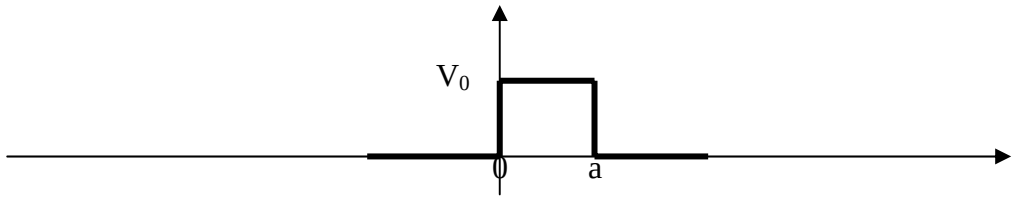


Figura 1

Teste sua predição, utilizando o programa. Para isso vá ao *File/Open* e abra o *Barrier.txt*. (Os parâmetros da barreira podem ser modificados na janela inferior no *Barrier Parameters*, movendo o cursor verde do *Right Level*.) Clique em *Redraw Graphs* e desenhe o que aparece na tela.

8: A função de onda apresentada pelo programa coincide com sua predição? Qual a razão para isto?

9: Se o elétron incide da esquerda, como se altera a probabilidade de achar o elétron no lado direito da barreira quando se modifica a energia do elétron? Utilize pelo menos três valores de energias diferentes. Procure encontrar alguma situação em que a probabilidade de tunelamento seja zero. Escreva os parâmetros utilizados e os resultados obtidos em cada simulação.

10: Se o elétron incide da esquerda, como muda a probabilidade de achar o elétron no lado direito da barreira quando se modifica a largura do potencial? Mantenha a energia do elétron constante e mude a largura da barreira, pelo menos três vezes. Escreva os parâmetros utilizados e os resultados obtidos em cada simulação.

11: Se o objeto incide da esquerda, como muda a probabilidade de achá-lo no lado direito da barreira quando muda a massa do objeto? Para responder isto, mude a partícula, no *Particle Parameters*, para próton e para píon. Escreva os parâmetros utilizados e os resultados obtidos em cada simulação.

12: A partir dos resultados obtidos nas questões anteriores, indique de que depende o comprimento característico de tunelamento.

Com esta atividade, você aprendeu que em determinadas condições, para um objeto quântico que incide da esquerda sobre uma barreira, existe alguma probabilidade de que o objeto possa ser detectado no lado direito da barreira. Este é o fenômeno de **tunelamento quântico**, assim chamado porque existe uma probabilidade, distinta de zero, de encontrar o objeto tanto na região da barreira como à sua direita. Isto não significa que fisicamente o objeto quântico "faça" um buraco na barreira, pois esta é uma barreira de energia. O tunelamento é um efeito puramente quântico e pode ser explicado resolvendo a equação de autovalores dos objetos quânticos.

Este é o mecanismo mediante o qual os elétrons da superfície de um material podem ser transferidos à ponta de prova de um microscópio eletrônico de varredura.

Bibliografia

O programa "*Quantum Tunneling"* é um *software* elaborado pelo ***Physics Education Research Group***, Kansas State University, dos EUA, no projeto "Visual Quantum Mechanics". Pode ser obtido na rede no site http://www.phys.ksu.edu/perg/vqm/programs/