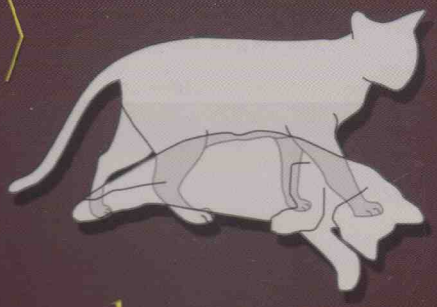
$$H|\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle$$



$$P_E = \left|\langle E|\psi\rangle\right|^2$$

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

Marcel Novaes
Nelson Studart

Mecânica Quântica Básica

VENDA PROIBIDA

MNPEF

LF
EDITORIAL

Uma das mais belas frases de Cora Carolina, que mantenho postada na porta de minha sala, para alentar meu espírito em cada novo dia de trabalho na universidade, é

"Feliz aquele que transfere o que sabe e aprende o que ensina"

Não posso pensar em frase mais apropriada para descrever o que deve estar passando pelo espírito dos professores de escolas do Ensino Médio que, com muito sacrifício e dedicação, estão se aperfeiçoando no programa do Mestrado Nacional Profissional em Ensino de Física! Na tarefa de ajuda-los a aprender e alegrar seus espíritos, estão envolvidos, com grande dedicação e profissionalismo, professores universitários de sessenta e três polos, espalhados por todo o país, e os membros da Comissão de Pós-Graduação da SBF, incluindo a Pró - Reitoria. Todos têm plena consciência de que, para que o programa tenha o êxito almejado, é absolutamente necessário disponibilizar instrumentos didáticos adequados para profissionais que, embora estejam ensinando a matéria no Ensino Médio, nem sempre tiveram acesso a uma formação satisfatória em Física. Para isso a Série MNPEF foi planejada – prover material didático adequado para os alunos do programa evitando as dificuldades de textos preparados para a formação sequencial tradicional dos cursos de licenciatura e bacharelado. Agradeço profundamente aos colegas que estão se empenhando nessa tarefa. A recompensa por sua dedicação provavelmente não virá de promoções ou recompensas acadêmicas, mas sim do lampejo de satisfação no olhar de cada aluno ao aprender um novo tópico através de seus livros!

Ricardo Galvão

Marcel Novaes
Nelson Studart

MECÂNICA QUÂNTICA BÁSICA

MNPEF

LF
EDITORIAL

Comissão editorial da Série MNPEF

Anderson Gomes
Ildeu de Castro Moreira
Iramaia Jorge Cabral de Paulo (Coordenadora)
Jorge Megid Neto
Rita Maria Cunha de Almeida

Copyright © 2016 Editora Livraria da Física
1ª Edição

Direção editorial
José Roberto Marinho

Revisão
Paula Santos

Projeto gráfico
Fabrício Ribeiro

Diagramação e capa
Fabrício Ribeiro

Edição revisada segundo o Novo Acordo Ortográfico da Língua Portuguesa

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

Novaes, Marcel
Mecânica quântica básica / Marcel Novaes, Nelson Studart. – São Paulo: Editora Livraria da Física, 2016. – (Série MNPEF)

Bibliografia.
ISBN 978-85-7861-426-3

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

16-05491 CDD-530.1207

Índices para catálogo sistemático:
1. Mecânica quântica: Física: Estudo e ensino 530.1207

Todos os direitos reservados. Nenhuma parte desta obra poderá ser reproduzida sejam quais forem os meios empregados sem a permissão da Editora.
Aos infratores aplicam-se as sanções previstas nos artigos 102, 104, 106 e 107 da Lei Nº 9.610, de 19 de fevereiro de 1998

LF EDITORIAL
Editora Livraria da Física
www.livrariadafisica.com.br

Apresentação da série

O Mestrado Profissional Nacional em Ensino de Física – MNPEF (PROFIS) é, como sugere o título, um programa nacional de caráter profissionalizante voltado a professores de Física da Educação Básica com vistas a melhorar, recuperar, atualizar o ensino de Física no país. É uma iniciativa da Sociedade Brasileira de Física, com apoio da CAPES e de várias Instituições de Ensino Superior que atuam como Polos do MNPEF.

O ensino de Física na Educação Básica precisa passar por mudanças significativas, pois está desatualizado em termos de conteúdos e metodologias. Embora possam constar nos programas das disciplinas, conteúdos de Física Moderna e Contemporânea não são abordados. Os conteúdos trabalhados são, majoritariamente, do século XIX e as metodologias de ensino são, predominantemente, aulas expositivas e resolução de exercícios, sem incorporar as tecnologias de informação e comunicação.

A proposta do MNPEF procura contribuir para essa mudança: o currículo enfatiza conteúdos de Física mais atualizados e o uso de tecnologias de informação e comunicação, mas também dá atenção a marcos históricos e epistemológicos no desenvolvimento da Física, assim como para teorias de aprendizagem. Além disso, o trabalho de conclusão

do mestrado deve incluir um produto educacional que tenha sido usado em condições reais de sala de aula e possa ser utilizado por outros professores de forma independente do mestrado.

Para alcançar os objetivos dessa proposta é preciso que os mestrandos passem por um ensino diferente do tradicional e que disponham de materiais instrucionais adequados a esse ensino.

Materiais instrucionais incluem livros como os da Série MNPEF. São textos sobre conteúdos de Física, por exemplo, de Mecânica Quântica, com um enfoque mais conceitual e fenomenológico, porém sem descuidar de um formalismo básico. São também textos sobre o uso de estratégias como modelagem e simulação computacionais ou sobre marcos no desenvolvimento de Física. Outra possibilidade é a inclusão de textos que abordem tópicos como Física e música, Física e arte, Física e medicina, Física e engenharia, porém sempre com o objetivo de ensinar Física.

É nesse sentido que é feita a apresentação desta Série do MNPEF. O ensino de Física carece de livros que não sejam centralizados em questões de exames ou de problemas a serem resolvidos mecanicamente com aplicações de fórmulas.

Marco Antonio Moreira

Marcel Novaes dedica o livro a sua esposa, Alessandra Arantes,
e Nelson Studart a seus filhos André, Juliana e William.

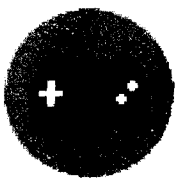
Ícones de objetos educacionais usados no livro

- texto/artigo

- simulações

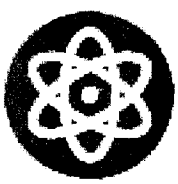
- audiovisual

- games



- infográfico animado (animações)

- laboratório virtual



tarefa

Prefácio

Este livro foi escrito como um texto de apoio aos docentes e alunos da disciplina de Mecânica Quântica do Mestrado Nacional Profissional de Ensino de Física (MNPEF-SBFCapes) e aborda os temas gerais propostos na ementa da disciplina. A escolha dos tópicos e sua apresentação são, obviamente, autorais. Consequentemente, não se trata de um livro didático de Mecânica Quântica independente de outros bons textos disponíveis. No entanto, pode ser de interesse para uso em disciplinas de Física Contemporânea de Cursos de Licenciatura em Ciências Exatas.

O livro discute os fundamentos básicos da Mecânica Quântica, assumida como um campo do conhecimento bem definido, com uma teoria formal consolidada, comprovada por experimentos bem conduzidos e com aplicações extraordinárias no domínio tecnológico. A abordagem utilizada visa a uma aprendizagem acerca dos fenômenos atômicos e subatômicos sem nenhuma referência à Física Clássica. Ondas e partículas, por exemplo, são conceitos clássicos fundamentais para a compreensão do mundo macroscópico, mas que não precisam ser usados no estudo da Mecânica Quântica. Essa visão puramente quântica elimina interpretações espúrias do tipo dualidade onda-partícula, que a nosso ver podem dificultar a aprendizagem por serem de difícil assimilação

pelos alunos. Nesse sentido, elétrons, fótons, prótons, átomos e moléculas são considerados simplesmente objetos quânticos, com características próprias como carga, massa e spin, descritos por estados quânticos que satisfazem os princípios e regras da teoria.

Não tratamos da transição clássico-quântica, como na maioria dos textos didáticos introdutórios da disciplina. Em vez disso, remetemos o estudo da Teoria Quântica Antiga (1900-1925) para os cursos de História da Física. Assim, o quantum de ação de Planck, o indefectível modelo atômico de Rutherford-Bohr e a famosa dualidade onda-partícula de de Broglie, entre outros consideráveis avanços na evolução da Física, estão ausentes desta obra.

Entendemos que, no atual nível de compreensão do leitor, o conceito de probabilidade é o conceito-chave na descrição dos fenômenos quânticos e é a partir dele que a teoria quântica é construída nesse livro. Embora esse conceito seja fundamental em outras áreas do conhecimento, mais especificamente na Mecânica Estatística no caso da Física, o conceito de probabilidade é essencialmente intrínseco à Mecânica Quântica e sua interpretação é diferente da que é utilizada no caso clássico, embora a fundamentação matemática seja a mesma.

O livro, de início, discute o princípio da incerteza de Heisenberg a partir da interpretação probabilística e assume que a evolução dinâmica da amplitude de probabilidade, denotada pela famosa função "psi", é dada pela equação de Schrödinger, cuja solução é apresentada para alguns sistemas físicos. A interpretação probabilística considerada é a tradicional, conhecida como a de Copenhague, mas outras interpretações são mencionadas ao final. Os problemas unidimensionais, tratados como *toy models* em outros textos, são resolvidos por meio de exemplos de sistemas do mundo manométrico: poços, fios e pontos quânticos.

A teoria completa da Mecânica Quântica é apresentada a seguir, estabelecendo os postulados básicos dentro do formalismo de Dirac e discute algumas aplicações por meio do consagrado sistema de dois níveis. Destaque seja feito à discussão do tópico bastante contemporâneo da Informação Quântica e ao capítulo que discute o uso do computador para obtenção de soluções aproximadas

O livro busca incentivar o uso de objetos educacionais digitais, tais como artigos, vídeos e simulações, por meio de inserções ao longo do texto que são indicadas por ícones específicos. Consideramos essencial que esses recursos sejam utilizados durante o curso para complementação do conteúdo. O professor também deve buscar outros materiais instrucionais, disponíveis em livros e na internet, em particular exercícios e problemas de aplicação dos conceitos. Depois do texto principal, oferecemos uma lista (não exaustiva) de sites, livros e artigos concernentes ao tema de Mecânica Quântica que pode ser usada para ampliar o conhecimento sobre a disciplina.

Marcel Novaes e Nelson Studart

Sumário

Capítulo 1 – Densidades de probabilidade clássicas 17

Capítulo 2 – Densidades de probabilidade quânticas ... 25
2.1 – Discussão de experiências sobre o caráter de objetos quânticos 25
2.2 – Funções de onda 30
2.3 – Função de onda de momento 31
2.4 – Princípio da incerteza 33
2.5 – Evolução temporal e medição 35
2.6 – Interferência quântica 38

Capítulo 3 – Estados quânticos estacionários 43
3.1 – Equação de Schrödinger independente do tempo 43
3.2 – Sistemas unidimensionais 46
3.2.1 – Partícula Livre 46
3.2.2 – Poço de Potencial Infinito 47
3.2.3 – Poços finitos acoplados 49
3.2.4 – O oscilador harmônico 53
3.3 – Momento Angular 54
3.4 – Estados de Landau 56
3.5 – Átomo de hidrogênio 58

Capítulo 4 – Elétrons confinados em baixa dimensionalidade 67
4.1 – Elétrons em duas dimensões 67
4.2 – Elétrons em uma dimensão 70
4.3 – Elétrons em zero dimensão 73

Capítulo 5 – Formalismo 75
5.1 – Notação de Dirac 75
5.2 – Observáveis 77
5.3 – Postulados da Mecânica Quântica 80

Capítulo 6 – Aproximações 85
6.1 – Soluções numéricas 85
6.1.1 – Solução de Equações Transcendentes 85
6.1.2 – Diagonalização de matrizes 86
6.2 – Teoria de perturbação 88
6.3 – Método variacional 91
6.4 – Solução numérica exata da equação de Schrödinger ... 93

Capítulo 7 – Sistemas de dois níveis 95
7.1 – Spin do elétron 95
7.1.1 – Spin em um campo magnético 100
7.2 – Polarização do fóton 102
7.3 - Interferômetro de Mach-Zehnder 104
7.4 – Férmions e bósons 108

Capítulo 8 – Informação Quântica 113
8.1 – Introdução 113
8.2 – Matriz Densidade 114
8.3 – Emaranhamento Quântico 116
8.4 – Decoerência 119
8.5 – Teleporte quântico 122
8.6 – Computação Quântica 124
8.7 – Interpretações da Mecânica Quântica 127

Referências 135

Capítulo 1

Densidades de probabilidade clássicas

Julgamos apropriado começar este curso introduzindo noções de probabilidade que são muito usadas em teorias da Física, como a Teoria Cinética dos Gases, a Mecânica Estatística e evidentemente a Mecânica Quântica, objeto de nosso estudo. Iniciamos pelo processo clássico da medição e por uma afirmação: não é possível encontrar valores experimentais de uma grandeza que tenham precisão infinita. Essa constatação não tem nada a ver com Mecânica Quântica; ela decorre do simples fato de que qualquer instrumento de medição, seja ele uma régua ou um microscópio, possui uma resolução máxima. Tal instrumento sempre mede uma grandeza, x, dentro de um limite de precisão, ou incerteza, Δx. O resultado de tal medição costuma ser expresso como $x \pm \Delta x$. Pode ser que a incerteza presente em uma determinada medida seja muito pequena, talvez sem qualquer efeito prático. Mas é preciso reconhecer que ela está sempre presente.

Isso significa que, ao fazermos a medição de uma grandeza física qualquer, não podemos representar a medida

por um ponto, digamos x. É mais correto representá-la por uma pequena região, ou intervalo, de tamanho Δx. Sabemos que o valor da medida corresponde a algum ponto dentro daquele intervalo, mas não podemos dizer exatamente qual porque nossa medição não tem precisão infinita.

Voltemos à nossa descrição acerca das medições: É mais provável que a medida corresponda a um ponto no meio do intervalo do que a um ponto muito perto das bordas do intervalo. Há uma gradação contínua de probabilidades. Podemos levar isso em conta definindo uma função, $f(x)$, cujo valor representa o quão provável é que a grandeza medida possua o valor x. Atribuiremos grandes valores de $f(x)$ aos valores de x que julgamos mais prováveis corresponder ao valor real e pequenos valores de $f(x)$ aos valores de x que julgamos pouco prováveis. Mais concretamente, definimos a integral de $f(x)$ sobre um intervalo qualquer,

$$\int_a^b f(x)dx \,, \quad (1.1)$$

como igual à probabilidade de que o resultado de nossa medição esteja dentro daquele intervalo. Isso vale para qualquer intervalo. Uma função cuja integral é sempre uma probabilidade é chamada de *densidade de probabilidade* ou função de distribuição.

Toda densidade de probabilidade deve necessariamente satisfazer duas condições: ela nunca é negativa, $f(x) \geq 0$, e ela é *normalizada*, isto é, sua integral em todo o espaço deve ser

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx = 1 \,. \quad (1.2)$$

Essa igualdade expressa o fato de que a grandeza deve necessariamente corresponder a algum ponto nesse intervalo, ou seja, a chance de que ela seja encontrada entre $-\infty$ e ∞ é de 100%. Uma vez que possuímos a densidade de

probabilidade que representa o conjunto de medições, o *valor médio* da grandeza, $\langle x \rangle$, é dado por

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x f(x) dx \,. \quad (1.3)$$

De forma geral, o valor médio de uma função qualquer g(x) é definida como

$$\langle g(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} g(x) f(x) dx \,. \quad (1.4)$$

Note que essa definição nada mais é do que aquilo que chamamos de uma média ponderada: somamos todos os valores possíveis da função, cada valor sendo ponderado pela chance de ocorrência do correspondente valor de x.

É claro que a diferença entre a grandeza e seu valor médio, $x - \langle x \rangle$, é uma quantidade que possui, por sua vez, valor médio nulo, i.e. $\langle x - \langle x \rangle \rangle = 0$. Entretanto, o mesmo não é verdade para seu quadrado, chamado de *variância*:

$$\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \int_{\infty}^{\infty} x^2 f(x) dx - \langle x \rangle^2 \quad (1.5)$$

A variância está diretamente relacionada à incerteza da medida da grandeza: $\Delta x = \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle}$.

Considere, por exemplo, a posição de uma partícula. Se sabemos que a partícula está localizada dentro de um certo intervalo, entre a e b, e supomos que todos os pontos do intervalo são igualmente prováveis, então podemos representar essa situação por uma densidade de probabilidade que se anula fora do intervalo e é constante dentro dele. Para garantir a normalização, o valor da função deve ser o inverso do tamanho do intervalo. Nesse caso, teremos $\langle x \rangle = (a+b)/2$.

Uma outra função que se presta bem a ser interpretada como uma densidade de probabilidade é a função *Gaussiana*, dada por

$$G(x) = \frac{e^{-(x-x_0)^2/\sigma^2}}{(\pi\sigma^2)^{1/2}} . \quad (1.6)$$

Essa função é caracterizada pelos parâmetros x_0 e σ, cuja interpretação é imediata, pois nesse caso temos as igualdades $\langle x \rangle = x_0$ e $\Delta x = \sigma / \sqrt{2}$. A Gaussiana tem seu valor máximo quando $x = x_0$ e decai suavemente quando nos afastamos desse ponto: ela se torna menor quanto maior é a distância entre x e x_0. Note que o parâmetro σ fornece uma medida da localização da partícula, ou seja uma escala típica dentro da qual podemos esperar encontrá-la, e que

$$G(x_0 + \sigma) = e^{-1} G(x_0) \approx 37\% G(x_0) . \quad (1.7)$$

A Gaussiana descreve exatamente o que queremos: a partícula tem grande chance de estar numa certa região, e pouca chance de estar em outras regiões. Usaremos frequentemente funções Gaussianas como exemplos de densidades de probabilidade.

Na Figura 1.1 mostramos os gráficos das duas densidades de probabilidade discutidas anteriormente. A primeira é constante no intervalo (0,4) e a segunda é uma função Gaussiana para a qual $x_0 = 2$ e $\sigma = 1$. No segundo gráfico, marcamos as posições onde a função assume aproximadamente 37% de seu valor máximo. Esses pontos estão a uma distância σ do ponto médio. Note que a Gaussiana também é muito próxima de zero fora do intervalo (0,4), mas não possui descontinuidade.

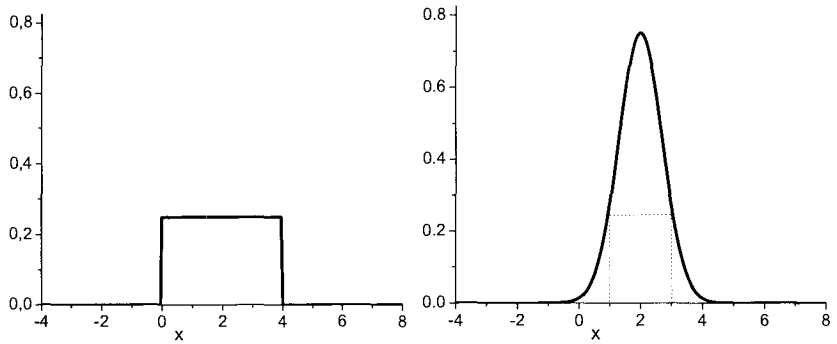


Figura 1.1 – Esquerda: densidade de probabilidade constante no intervalo (0,4). Direita: Densidade de probabilidade Gaussiana, com média 2 e variância 1. A linha pontilhada horizontal mostra os pontos onde a função assume aproximadamente 37% de seu maior valor.

É importante considerar a seguinte questão. Conhecida a densidade de probabilidade $f(x)$, considere uma nova variável $y = g(x)$. Qual é a densidade de probabilidade $\tilde{f}(y)$ associada à variável y? A solução desse problema se baseia na ideia de conservação de probabilidade. Imagine um intervalo infinitesimal dx que é levado pela função g em um intervalo infinitesimal dy. A probabilidade de que o valor de y esteja nesse intervalo deve ser igual à probabilidade de que x estivesse no intervalo original. Ou seja,

$$\tilde{f}(y)dy = f(x)dx. \quad (1.8)$$

Note que não é a densidade de probabilidade que necessita ser conservada, mas a probabilidade mesma. Escrevendo em termos da função g, ficamos com

$$f(x) = \tilde{f}(g(x))\left|\frac{dg}{dx}\right| \text{ ou } \tilde{f}(y) = \frac{f(g^{-1}(y))}{|dg/dx|}. \quad (1.9)$$

É preciso introduzir o módulo da derivada, pois caso ela seja negativa isso iria arruinar nossa densidade (densidades de probabilidade nunca podem ser negativas).

Suponha que um ponteiro gira livremente, de modo que todos os ângulos θ entre 0 e π são igualmente prováveis. Encontre a densidade de probabilidade de $\cos\theta$. Encontre seu valor médio e sua variância.

Suponha agora que medimos a posição da partícula em dado sistema físico e que o valor da posição medida é x_0 com incerteza Δx. Decidimos representá-lo por uma densidade Gaussiana. A questão que se coloca agora é: dada essa condição inicial, o que acontece depois? Como será a evolução temporal da densidade de probabilidade? Naturalmente, essa evolução temporal será uma outra densidade, $G(x,t)$, cuja integral sobre uma região qualquer fornece a probabilidade de que o sistema esteja naquela região em qualquer tempo t. Essa nova função não precisa necessariamente ser uma Gaussiana. Na verdade, ela pode ser bem mais complicada do que uma Gaussiana. Conforme o tempo passa, ela pode até deixar de estar concentrada numa região pequena e começar a se espalhar.

Como exemplo, vamos considerar um sistema muito simples: a partícula livre. Digamos que a velocidade v seja conhecida.[1] Nesse caso, todos os pontos se movem com velocidade v e a chance de que a partícula esteja na posição x no tempo t deve ser igual à chance que ela tinha de estar inicialmente em $x - vt$. Ou seja, se a densidade original era dada por (1.6), então a densidade como função do tempo será dada por

$$G(x,t) = \frac{e^{-(x-x_0-vt)^2/\sigma^2}}{(\pi\sigma^2)^{1/2}} . \quad (1.10)$$

1 Deveríamos admitir que também existe algum grau de incerteza na determinação da velocidade, o que nos levaria a introduzir densidades de probabilidade que fossem funções de x e v simultaneamente. Preferimos evitar essa complicação adicional e levar em conta apenas a incerteza na posição. A incerteza na velocidade será considerada no contexto da Mecânica Quântica.

Em palavras, a densidade inicial se propaga com velocidade v, mantendo sua forma original indefinidamente. Na Figura 1.2, mostramos uma densidade Gaussiana inicial, com $x_0 = 0$ e $\sigma = 1$, propagando-se com velocidade $v = 3$ em unidades arbitrárias, para mostrarmos o resultado em três instantes de tempo, $t = 0,1,2$.

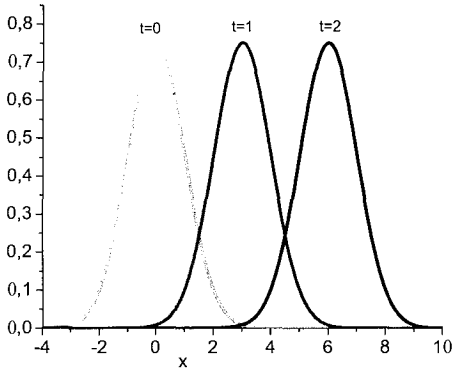


Figura 1.2 – Evolução de uma densidade Gaussiana, inicialmente centrada na origem, para uma partícula livre com velocidade v=3. Note como a função se propaga sem alterar sua forma.

Vamos aproveitar para apresentar uma situação que será importante para futura comparação com o caso quântico. Digamos que uma partícula se aproxima com velocidade de módulo v, mas não sabemos se a velocidade é positiva ou negativa, ou seja, não sabemos se ela está vindo da direita ou da esquerda. Em $t = 0$ essa partícula pode estar na vizinhança da posição -Q com velocidade $+v$, ou então na vizinhança da posição +Q com velocidade $-v$. Nesse caso, é natural representá-la pela seguinte densidade

$$f(x,t) = \frac{e^{-(x-Q+vt)^2/\sigma^2}}{2(\pi\sigma^2)^{1/2}} + \frac{e^{-(x+Q-vt)^2/\sigma^2}}{2(\pi\sigma^2)^{1/2}} . \quad (1.11)$$

Conforme o tempo passa, as duas componentes se aproximam, se cruzam e depois se afastam. Note que quando as duas componentes estão uma sobre a outra (em $t = Q/v$), o valor da densidade é o dobro do valor que cada componente possuía, pois elas se somam. A razão é simples: há o dobro de chance de a partícula estar na origem nesse instante, pois

pode ter vindo da esquerda ou da direita. Assim, as densidades se reforçam.

Vale observar que a evolução temporal da função densidade é um caso particular de mudança de variável, em que passamos da posição no tempo inicial para a posição no tempo final. Por exemplo, para a partícula livre temos $x(t) = x(0) + vt$. É claro que $dx(t)/dx(0) = 1$. Assim, as relações (1.9) nos dizem que $\tilde{f}(x(t)) = f(x(t) - vt)$, o que corresponde exatamente à relação que existe entre (1.6) e (1.10). [Atenção: não confundir $x(0)$, a posição inicial, que é indeterminada, com a constante x_0, que é seu valor médio!]

O exemplo da partícula livre talvez seja muito simples. Considere então um oscilador harmônico de frequência angular ω. A relação entre a posição inicial e a posição em um instante qualquer é $x(t) = x(0)\cos(wt)$. Nesse caso, a derivada necessária é $dx(t)/dx(0) = \cos(wt)$. Se a função densidade de probabilidade associada à posição inicial é dada pela Eq. (1.6), as relações (1.9) fornecem

$$\tilde{f}(x(t)) = \frac{e^{-\left(\frac{x(t)}{\cos(\omega t)} - x_0\right)^2}}{|\cos(\omega t)|\sqrt{\pi\sigma^2}} \qquad (1.12)$$

Sugerimos que seja realizada uma animação no computador da evolução dessa função densidade com o tempo. Escolha $\sigma = 1$, $x_0 = -10$ e $\omega = 2\pi$, por exemplo.

Observe algo curioso com a função densidade dada pela Eq. (1.12) quando $t = \pi/2\omega$. Preste atenção a esse valor do tempo durante a animação. Você consegue explicar fisicamente o que está acontecendo?

Capítulo 2

Densidades de probabilidade quânticas

2.1 – Discussão de experiências sobre o caráter de objetos quânticos

São bem conhecidas as experiências mentais sobre o comportamento de elétrons e fótons que, após atravessarem um par de fendas, atingem um detector. Feymann, no Capítulo 1 do volume 3 de suas *Lições de Física*, discute com maestria os resultados sutis que se espera observar acerca do comportamento desses objetos quânticos (elétrons e fótons) em comparação com objetos clássicos (balas). Nos últimos anos, as experiências de dupla-fenda tornaram-se reais, tanto para fótons quanto para elétrons.

Consulte http://en.wikipedia.org/wiki/Double-slit_experiment para uma revisão, em especial as referências ali colocadas para estudo mais aprofundado.

Faça também a simulação, que pode ser encontrada no site http://phet.colorado.edu/pt/simulation/quantum-wave-interference.

Esses experimentos de dupla-fenda demonstraram que elétrons e fótons apresentam características tanto de ondas como de partículas e revelam a natureza probabilística dos fenômenos quânticos. Existe enorme admiração por grande parte dos físicos e interessados em ciência pela chamada dualidade onda-partícula e o correspondente princípio da complementaridade de Niels Bohr.

Como exemplo, podemos mencionar um recente resultado, muito divulgado nas redes sociais e anunciado com o título "The first ever photograph of light as both a particle and wave" no portal physics.org (http://phys.org/news/2015-03-particle.html#ajTabs), que foi publicado na Nature Communications em março de 2015 (Disponível em: <http://www.nature.com/ncomms/2015/150302/ncomms7407/full/ncomms7407.html>).

Contudo, na nossa concepção, ondas e partículas devem ser considerados conceitos essencialmente clássicos, que não precisam ser estendidos para o universo quântico. Elétrons, fótons, átomos e até mesmo moléculas são *objetos quânticos* descritos pela Mecânica Quântica, que é bastante diferente da Mecânica Clássica que descreve os fenômenos macroscópicos.

Considere o seguinte experimento mental: um feixe de elétrons incide sobre uma placa metálica que possui duas fendas paralelas. Elétrons podem passar livremente pelas fendas, mas ficam retidos se atingirem a placa. Atrás da placa metálica encontra-se um detector, que registra um ponto luminoso sempre que atingido por um elétron. Imagine que o

feixe é extremamente fraco, com os elétrons incidentes bem separados temporalmente, chegando ao detector, depois de passar pela placa metálica, um de cada vez. A pergunta é: depois de um longo tempo, o que veremos?

Uma versão desse experimento foi de fato realizada, e o resultado pode ser visualizado em http://www.hitachi.com/rd/portal/research/em/movie.html. Assista ao filme antes de prosseguir a leitura.

Duas características são marcantes nesse experimento. Primeiro, os elétrons não chegam todos ao mesmo lugar. Inicialmente, não parece existir nenhuma regularidade no registro dos pontos luminosos. Pelo contrário, eles vão surgindo ao acaso. Somente depois de muito tempo é que percebemos um padrão: existem regiões nas quais é mais provável que o elétron incida (faixas verticais mais brilhantes), e regiões nas quais isso é menos provável (faixas verticais mais escuras). Note que esse é um padrão *estatístico*, ou seja, a incidência de um único elétron não nos diz nada, apenas o comportamento de todos eles juntos ao longo do tempo é que revela o padrão.

Somos obrigados a tirar duas conclusões das observações citadas. A primeira é que devemos descrever os elétrons usando uma linguagem probabilística. Essa é uma das principais novidades da física quântica em relação à física clássica: objetos quânticos devem ser *sempre* representados por densidades de probabilidade. A segunda conclusão a ser tirada é que a função densidade de probabilidade que descreve o experimento em questão não é uma simples Gaussiana, concentrada em uma única região do espaço. Em vez disso, é uma função que oscila periodicamente no espaço, alternando regiões de maior e menor probabilidade. Ou seja, é uma função que, de certa maneira, possui um comportamento *ondulatório*.

O elétron é certamente um objeto quântico, mas nem todos os objetos quânticos precisam ter massa tão pequena quanto um elétron. Um próton, por exemplo, tem uma massa quase 2.000 vezes maior que a do elétron, e ainda é um objeto quântico. Os átomos, que são milhares de vezes maiores que os prótons, também são quânticos. Mesmo moléculas grandes, contendo dezenas ou centenas de átomos, podem exibir propriedades quânticas. Por exemplo, o mesmo experimento que você acabou de assistir foi realizado com moléculas chamadas de fulerenos (C60), que contêm 60 átomos de Carbono. O resultado é o mesmo: as moléculas são detectadas de forma aleatória, mas o acúmulo de um grande número de detecções revela um padrão que consiste de franjas nas quais a detecção é alternadamente mais e menos provável.

O experimento com fulerenos foi descrito no artigo *Wave-particle duality of C60 molecules*, publicado em 1999 na revista *Nature* (disponível em: http://julianvossandreae.com/wp-content/uploads/1999/12/c60article.pdf). As moléculas foram aquecidas em um forno a temperaturas da ordem de 1.000 K, e depois passaram por um conjunto de fendas (mais de duas) que tinham 50 nm de largura cada uma. A detecção foi realizada a uma distância de 1,25 m atrás das fendas. O resultado experimental mostra um corte da função densidade de probabilidade representada pelo número de detecções em 50 segundos; infelizmente, apenas uma região brilhante central e duas regiões brilhantes laterais podem ser identificadas.

Uma versão mais didática, "Quantum interference experiments with large molecules", foi publicada pelo mesmo grupo no American Journal of Physics, volume 71, número 4, 2003, p. 319 e pode ser lida em http://130.58.92.210/Students/phys%205_2010/zeilinger%20ajp%202003.pdf

Em 2011, mais de uma década depois do experimento mencionado anteriormente, foi possível utilizar uma tecnologia mais refinada para observar o mesmo efeito usando moléculas muito maiores, com até 430 átomos e quase 10 vezes mais massivas que o C60. Os resultados, apresentados no artigo *Quantum interference of large organic molecules*, publicado na revista eletrônica *Nature Communications* (http://www.nature.com/ncomms/journal/v2/n4/full/ncomms1263.html), têm uma qualidade maior do que aquela obtida em 1999, pois é possível ver a alternância de várias franjas.

Realizando o experimento de dupla-fenda com diferentes objetos, observa-se que o tamanho das franjas, vamos chamá-lo de λ, diminui se a velocidade do objeto aumenta, e também é menor quanto maior for a massa do objeto. Ou seja, matematicamente, podemos escrever $\lambda \propto (mv)^{-1}$. A constante de proporcionalidade entre essas quantidades é conhecida como constante de Planck, e denotada pelo símbolo h. Assim, podemos escrever

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{p} \quad , (2.1)$$

em que aproveitamos para introduzir a quantidade $p = mv$, conhecida como *momento* (ou "quantidade de movimento"). Em física quântica é muito mais comum usar o momento como variável do que a velocidade. Além disso, também é mais comum fazer referência à constante denotada por $\hbar$, conhecida como "h-cortado", que é dada por $\hbar = h / 2\pi$.

O valor da constante de Planck é da ordem de 10^{-34} em unidades de Joule-segundos, ou de 10^{-16} em unidades de elétron-volts-segundos. A quantidade λ é comumente chamada de *comprimento de onda*. Uma bola de tênis tem cerca de 50g de massa; se estiver se movendo a 100 km/h, seu comprimento de onda será da ordem de 10^{-34} metros. Esse tamanho é muitíssimo menor que o diâmetro de um próton (da ordem de 10^{-15} metros), de modo que a observação de efeitos

de interferência em um experimento com bolas de tênis está fora de cogitação. Em outras palavras, sua natureza quântica não pode ser observada. Por outro lado, como a massa de um elétron é muito pequena (da ordem de 10^{-30} kg), ele pode possuir comprimentos de onda mensuráveis (por exemplo, cerca de 10^{-5} metros se estiver se movendo a 100 km/h).

2.2 – Funções de onda

Recapitulando, objetos quânticos são representados por densidades de probabilidade. Como vimos no Capítulo anterior, o valor da função densidade $f(x,t)$ indica o quão provável é que o objeto seja detectado na posição x no instante de tempo t. Além disso, resultados experimentais indicam que essa função pode ter um comportamento oscilante, variando em uma escala dada por λ.

Na mecânica quântica, é necessário escrever a densidade de probabilidade como o módulo quadrado de uma outra função, denotada pela letra grega Ψ:

$$f(x,t) = |\Psi(x,t)|^2 . \quad (2.2)$$

(Note que um módulo quadrado nunca é negativo, o que é satisfatório). A função $\Psi(x,t)$ é universalmente conhecida como *a função de onda* do sistema, ou também como *o estado* do sistema. Em termos dessa função, o valor médio da posição, por exemplo, pode ser escrito como

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x\,|\Psi(x,t)|^2\,dx . \quad (2.3)$$

Veremos mais adiante como obter outros valores médios importantes. Vale notar que nesse contexto também é preciso que a seguinte igualdade, chamada de *condição de normalização*, seja verificada para todo valor de t:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2\,dx = 1 . \quad (2.4)$$

É preciso enfatizar a diferença entre o papel das probabilidades em Mecânica Clássica e em Mecânica Quântica. No primeiro caso, o uso de probabilidades reflete tão-somente a ignorância de quem está descrevendo o sistema. Imagine que um amigo seu deixa cair uma moeda sobre uma mesa. Você não sabe qual lado caiu para cima, então diz que há 50% de chance de o resultado ser "cara" e 50% de ser "coroa". Se seu amigo puder ver a moeda, a descrição que fará do resultado será inteiramente diferente, pois não terá necessidade de introduzir nenhuma probabilidade.

Por outro lado, em Mecânica Quântica o uso de probabilidades é *intrínseco* à teoria. Quando dizemos que $|\Psi(x,t)|^2$ é a densidade de probabilidade de um objeto quântico estar na posição x no tempo t, estamos descrevendo uma situação em que não é possível saber mais do que isso. Essa probabilidade não se refere à nossa ignorância, mas à própria natureza dos objetos quânticos.

De acordo com a interpretação mais comum da Mecânica Quântica, um objeto quântico não possui posição definida antes que seja realizada uma medição de sua posição. É como se as propriedades que um objeto quântico possui fossem criadas por sua própria medição. Vamos falar um pouco mais sobre medições na seção 2.5, e mencionamos outras possíveis interpretações da teoria no Capítulo 8.

2.3 – Função de onda de momento

Assim como a posição de um objeto quântico é incerta, também o seu momento é incerto. Ou seja, é preciso descrevê-lo por meio de uma função densidade de probabilidade. Assim, existe uma função $\Phi(p,t)$ chamada de *função de onda de momento*, tal que $\int_a^b |\Phi(p,t)|^2 \, dp$ é a probabilidade de que o momento do objeto quântico em questão, no instante de tempo t, seja medido entre os valores a e b.

Funções de onda, em geral, são funções complexas, ou seja, quantidades escritas na forma $z = a + ib$, onde o i, conhecido como unidade imaginária, satisfaz a igualdade $i^2 = -1$. O conjugado de $z = a + ib$ é o número $z^* = a - ib$, e seu módulo quadrado é $|z|^2 = z^* z = (a - ib)(a + ib) = a^2 + b^2$. Note que o módulo quadrado de z é sempre real, enquanto que o quadrado de z pode ser complexo, já que $z^2 = (a + ib)(a + ib) = a^2 - b^2 + 2iab$.

Os dois tipos de função de onda vistos anteriormente estão relacionados através das equações

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar} \Phi(p,t) dp \quad , (2.5)$$

e

$$\Phi(p,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \Psi(\mathrm{x},t) dx \, , (2.6)$$

conhecidas como *transformadas de Fourier*. Está fora do escopo desse curso um estudo detalhado das transformadas de Fourier, mas existem inúmeros livros de Física Matemática que abordam esse tema.

O valor médio do momento pode ser calculado a partir da função $\Phi(p,t)$ através da integral

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} p \, |\Phi(p,t)|^2 dp \, , (2.7)$$

mas também é possível calculá-lo usando a função de onda de posição. Substituindo a igualdade (1.7) na equação anterior, e realizando algumas integrais adequadamente, chegamos à expressão

$$\langle p \rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(\mathrm{x},t) \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x,t) dx \, . (2.8)$$

Essa equação é interpretada da seguinte maneira: quando estamos lidando com a função de onda de posição, a variável momento deve ser *representada* pela derivada:

$$p \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad (2.9)$$

de modo que o cálculo do valor médio do momento é equivalente ao cálculo do valor médio da derivada da função de onda.

2.4 – Princípio da incerteza

As propriedades matemáticas das transformadas de Fourier são muito bem conhecidas. Por exemplo, sabe-se que se uma das funções for uma Gaussiana, a outra também será uma Gaussiana. Entretanto, quanto mais estreito for o pico para uma delas, mais largo será o pico da outra.

Podemos considerar, por exemplo, a função de onda $\Psi(x) = \frac{e^{-x^2/2\sigma^2}}{(\pi\sigma^2)^{1/4}}$, cujo módulo quadrado é a densidade de probabilidade que aparece na equação (1.6), com posição média nula. A incerteza de posição associada a essa função é $\Delta x = \sigma / \sqrt{2}$. É possível calcular a função de onda de momento correspondente: o resultado é $\Phi(p) = \frac{e^{-p^2\sigma^2/2\hbar^2}}{(\pi\hbar^2/\sigma^2)^{1/4}}$.

A partir dessa função, podemos obter a incerteza de momento, que é $\Delta p = \hbar / \sqrt{2}\sigma$. Observe que a incerteza na posição aumenta de forma proporcional à quantidade σ, enquanto que a incerteza no momento diminui de maneira inversa a essa quantidade. Assim, o produto das duas incertezas é sempre o mesmo, $\Delta x \Delta p = \hbar / 2$.

É possível mostrar que o produto das incertezas de posição e de momento, para qualquer objeto quântico descrito por qualquer função de onda, não pode nunca ser menor do que o valor que acabamos de calcular. Concretamente, temos

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (2.10)$$

Esse é o chamado *Princípio da Incerteza*. Quanto mais certos estivermos da posição de um objeto quântico, menos certeza teremos de seu momento (ou de sua velocidade). Inversamente, quanto mais certos estivermos de seu momento, mais incertos estaremos a respeito de sua posição.

É importante enfatizar novamente a diferença que existe entre a situação clássica e a situação quântica. Conforme discutimos no Capítulo anterior, em física clássica também faz sentido levar em conta a incerteza que sempre existe na determinação da posição e, por isso, usar funções densidade de probabilidade. Entretanto, o princípio da incerteza não tem consequência em mecânica clássica, porque o limite inferior que ele determina para o produto $\Delta x \Delta p$ é muito menor do que é possível realizar em laboratório. Para todos os efeitos práticos, em física clássica é possível determinar simultaneamente a posição e o momento de um objeto com precisão tão grande quanto se queira. Em física quântica, existe um limite intrínseco para essa determinação.

Note que o princípio da incerteza é uma decorrência da própria estrutura matemática da teoria quântica, ou seja, do fato de que as funções de onda de posição e momento estão relacionadas de uma maneira específica. A validade desse princípio não guarda relação direta com características detalhadas de situações experimentais. Ainda assim, é possível interpretá-lo de um ponto de vista operacional. Para determinar a posição de um objeto, é preciso que de algum modo se interaja com ele, por exemplo, com um facho de luz. No mundo clássico, essa interação pode ser fraca o bastante para deixar inalterado o estado de movimento do objeto em questão. Entretanto, suponha que queremos medir a posição de um elétron, que é muito leve. Ao interagir com esse elétron para que a medição seja realizada, o seu estado de movimento será inevitavelmente alterado. Mesmo a interação mais fraca que se possa imaginar (a incidência de um único fóton!) sempre é suficiente para modificar o objeto

cuja posição deseja-se conhecer. Nenhuma interação pode ser descartada.[2]

Avance na compreensão do Princípio da Incerteza realizando a animação do site http://standrews.ac.uk/physics/quvis/simulations_phys/ph10_Heisenberg_Uncertainty_Principle.swf

2.5 – Evolução temporal e medição

Da mesma maneira que no Capítulo anterior, podemos perguntar: uma vez conhecida a densidade de probabilidade em um determinado instante, o que se pode dizer acerca da sua evolução temporal? A evolução temporal na Mecânica Quântica é radicalmente diferente da evolução clássica. Para evoluirmos uma função densidade na Mecânica Clássica, basta saber a posição do objeto no passado. Na Mecânica Quântica, a evolução é bem mais complicada e, por isso mesmo, efeitos muito mais interessantes são produzidos.

É justamente na questão da evolução temporal que reside a importância da função de onda. É muito difícil tratar diretamente a dependência com o tempo da densidade de probabilidade $f(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$. Em vez disso, considera-se a evolução temporal da função de onda $\Psi(x,t)$, que é determinada pela famosa *Equação de Schrödinger*

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x,t). \quad (2.11)$$

Do lado esquerdo, temos a derivada primeira da função de onda em relação ao tempo, enquanto do lado direito temos a derivada segunda em relação ao espaço. Essa é a única equação fundamental da física em que aparece o

2 É comum encontrar menções à importância do "observador" em Mecânica Quântica. O problema dessa formulação é que ela sugere que são os seres humanos, ou algum tipo de consciência, os responsáveis pela "observação". É mais correto falar de "interação", que pode ocorrer entre objetos inanimados. A consciência humana não tem qualquer papel na física.

número imaginário i. As outras quantidades que aparecem são a massa do objeto, m, a constante de Planck e a energia potencial do objeto, $V(x)$.

Vejamos como funciona essa equação na prática. Para isso, vamos considerar novamente o exemplo da partícula livre, em que $V(x)=0$. Nesse caso, ficamos com

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} \quad . (2.12)$$

Já sabemos que a função de onda

$$\Psi(x,0)=\frac{e^{-x^2/2\sigma_0^2}}{(\sqrt{\pi}\sigma_0)^{1/2}} \quad . (2.13)$$

representa um objeto localizado, quando $t=0$, na vizinhança de $x=0$ com incerteza $\Delta x=\sigma_0/\sqrt{2}$. O que acontece com essa função inicial conforme o tempo passa?

A resposta é que a função de onda (2.13) se transforma, depois de decorrido um intervalo de tempo t, numa nova função de onda, dada por

$$\Psi(x,t)=\frac{e^{-x^2/2\sigma_0\sigma(t)}}{(\sqrt{\pi}\sigma(t))^{1/2}} \quad , (2.14)$$

em que a quantidade $\sigma(t)$ é dada por $\sigma(t)=\sigma_0+it\hbar/m\sigma_0$. Para verificar que essa função de onda realmente satisfaz a equação de Schrödinger, basta notar que

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)=-\frac{\hbar^2}{2m\sigma_0^2\sigma(t)^2}x^2\Psi(x,t)+\frac{\hbar^2}{2m\sigma_0\sigma(t)}\Psi(x,t) \quad . (2.15)$$

A função de onda (2.14) está sempre concentrada em $x=0$, mas a incerteza na posição vai aumentando com o tempo, $\Delta x=\sqrt{\sigma_0^2/2+\hbar^2t^2/2m^2\sigma_0^2}$. Por outro lado, a incerteza no momento permanece constante, $\Delta p=\hbar/\sigma_0\sqrt{2}$. Assim, o produto das incertezas começa com o valor mínimo possível, mas cresce com o tempo.

Acesse http://www.st-andrews.ac.uk/physics/quvis/index_phys.php, clique na pasta "Wave packets" e selecione a animação *Gaussian Wave Packet* e visualize a animação da evolução temporal da função de onda inicialmente Gaussiana associada a uma partícula livre.

Observe que a rapidez com que o pico da função de onda se alarga é inversamente proporcional à sua largura inicial. Assim, funções inicialmente com pico mais estreito se alargam mais rapidamente. Isso pode ser entendido com base no princípio da incerteza: a uma função de onda de posição mais estreita deve corresponder uma função de onda de momento mais larga, contendo valores maiores de momento, que por sua vez levam ao alargamento mais rápido da função de onda de posição. Por outro lado, a uma função de onda de posição mais larga corresponde uma função de onda de momento mais estreita, com pequena variação de momento, que leva a um alargamento mais lento do pico da função de onda de posição.

Considere agora uma função de onda que representa um objeto que se move e cuja posição média varie linearmente com o tempo:

$$\Psi(x,t) = \frac{e^{-(x-vt)^2/2\sigma_0\sigma(t)}e^{imv(x-vt/2)/\hbar}}{(\sqrt{\pi}\sigma(t))^{1/2}} \quad . (2.16)$$

Mostre que essa função satisfaz a equação de Schrödinger da partícula livre, e que seguintes valores médios são obtidos:

$$\langle x\rangle = vt \quad , \quad \langle p\rangle = mv \quad . (2.17)$$

É importante frisar que a equação de Schrödinger governa apenas a *evolução* da função de onda de um sistema quântico. O processo de *detecção* do objeto, quando a posição ou alguma outra grandeza é efetivamente medida, é algo

distinto, cujo resultado geralmente não pode ser previsto com antecedência. Ou seja, a equação de Schrödinger determina exatamente o valor de $\Psi(x,t)$, mas isso não significa que os resultados de processos de medida estejam determinados de antemão.

Quando se realiza uma medição de uma grandeza física qualquer, temos em geral uma gama de resultados possíveis. Mesmo sabendo qual é a função de onda, normalmente não é possível saber qual será o resultado de uma medição. Duas medições iguais, realizadas em dois objetos preparados igualmente, podem resultar em medidas diferentes. Apenas a probabilidade de ocorrência de cada medida pode ser prevista com certeza. Vamos discutir esse assunto novamente no Capítulo 5.

2.6 – Interferência quântica

A equação de Schrödinger possui uma propriedade muito importante: é uma equação linear. Isso significa que se Ψ_1 e Ψ_2 são soluções quaisquer da equação de Schrödinger, então a soma das duas soluções $\Psi_1 + \Psi_2$ também é solução, i.e. também satisfaz a equação de Schrödinger. Entretanto, o que importa realmente não é a função de onda, mas a função densidade de probabilidade, que é seu módulo quadrado. O que faz toda a diferença é que o módulo quadrado de uma soma não é a soma dos módulos quadrados,

$$|\Psi_1 + \Psi_2|^2 = (\Psi_1 + \Psi_2)^*(\Psi_1 + \Psi_2) = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + \Psi_1^*\Psi_2 + \Psi_1\Psi_2^* \quad . \quad (2.18)$$

O termo $\Psi_1^*\Psi_2 + \Psi_1\Psi_2^*$ que aparece do lado direito da equação anterior é chamado de termo de interferência, porque é por meio dele que as funções de onda Ψ_1 e Ψ_2 estão interligadas uma à outra, ou seja, *interferem* entre si.

Como exemplo, usamos novamente a partícula livre. Assim como fizemos no Capítulo 1, vamos supor que sabemos que uma partícula se aproxima com velocidade de

certa magnitude, mas não sabemos se vem da direita ou da esquerda. Digamos que em $t=0$ essa partícula tem grande chance de estar perto da posição $-Q$ com velocidade $+v$, ou perto da posição $+Q$ com velocidade $-v$. Nesse caso, é natural representá-la pela seguinte função de onda:

$$\Psi(x,t)=\Psi_1(x,t)+\Psi_2(x,t)=\frac{e^{-(x+Q-vt)^2/2\sigma_0\sigma(t)}e^{imv(x-vt/2)/\hbar}}{(2\sqrt{\pi}\sigma(t))^{1/2}}+\frac{e^{-(x-Q+vt)^2/2\sigma_0\sigma(t)}e^{-imv(x+vt/2)/\hbar}}{(2\sqrt{\pi}\sigma(t))^{1/2}} \quad (2.19)$$

Aqui usamos novamente a notação $\sigma(t)=\sigma_0+it\hbar/m\sigma_0$. Se a incerteza inicial σ_0 for pequena, o produto dos dois termos é nulo. Assim, temos inicialmente $|\Psi(x,0)|^2\approx|\Psi_1(x,0)|^2+|\Psi_2(x,0)|^2$ (compare essa igualdade com a equação (1.11) que usamos no Capítulo anterior). Conforme o tempo passa, as duas corcovas Gaussianas se aproximam e o termo de interferência começa a ficar importante. Que consequência isso tem para a densidade de probabilidade?

Vemos na Figura 2.4 um diagrama da evolução temporal descrita anteriormente, para $Q=10$ e $v=1$ (usamos um sistema de unidades especial, no qual $m=1$, $\hbar=1$, e $\sigma=2$). Mostramos três quadros, correspondentes a diferentes instantes de tempo. Inicialmente, vemos os dois termos que compõem a função densidade de probabilidade: são duas Gaussianas que se aproximam. Depois de algum tempo, elas começam a se superpor e a interferir; aparecem então pequenas oscilações na densidade. No terceiro momento, os dois termos estão perfeitamente superpostos e a interferência se mostra totalmente. A partir daí as duas componentes passam uma pela outra e se afastam. Você já teve oportunidade de visualizar essa interferência nas animações aqui propostas.

É interessante notar que no terceiro quadro há regiões nas quais a probabilidade de detecção vai a zero! É como se as possibilidades de o objeto ter chegado àquele ponto pela esquerda ou pela direita, em vez de se reforçarem, se cancelassem mutuamente. Esse efeito, chamado de *interferência*

destrutiva, não possui análogo na física clássica. Ele se origina do fato de que precisamos somar funções de onda e, como funções de onda são funções complexas, o resultado total não precisa ser maior do que cada parte. Por outro lado, nos pontos onde as funções de onda se somam e se reforçam, dizemos que há interferência construtiva.

Acesse http://www.cond-mat.de/teaching/QM/JSim/wpack.html e visualize a evolução temporal da densidade de probabilidade correspondente a uma função de onda que é a soma de duas Gaussianas que se movem em sentido contrário. Note o aparecimento de interferência quando elas se superpõem.

Você acaba de constatar que o experimento de dupla-fenda mencionado no início deste Capítulo trata justamente da observação de um efeito de interferência. Em um ponto qualquer do detector, existe a possibilidade de o objeto quântico estar vindo de uma fenda ou da outra. Essas duas possibilidades são representadas por funções de onda complexas que, quando somadas para produzir a função densidade de probabilidade final, produzem interferência, da maneira que acabamos de discutir. Assim, as franjas mais luminosas correspondem às regiões onde há interferência construtiva, enquanto as franjas escuras revelam interferência destrutiva.

Acesse http://www.embd.be/quantummechanics/double_slit.html e visualize várias animações de funções de onda Gaussianas passando por duas fendas e exibindo o típico padrão de interferência.

Terminamos este Capítulo analisando um pouco melhor a natureza das oscilações que aparecem na função densidade de probabilidade associada à função de onda (2.19). Calculemos essa densidade no instante de máxima sobreposição das componentes, que é $\tau = Q/v$. Nesse caso, temos

$$|\Psi(x,\tau)|^2 = \left| \frac{e^{-x^2/2\sigma_0\sigma(\tau)}}{(2\sqrt{\pi}\sigma(\tau))^{1/2}} \right|^2 \left| e^{imv(x-Q/2)/\hbar} + e^{-imv(x+Q/2)/\hbar} \right|^2 . \quad (2.20)$$

O comportamento Gaussiano global está determinado pelo primeiro módulo quadrado. Por outro lado, a interferência advém do segundo módulo quadrado, que é dado por

$$\left| e^{imv(x-Q/2)/\hbar} + e^{-imv(x+Q/2)/\hbar} \right|^2 = \left| e^{imvx/\hbar} + e^{-imvx/\hbar} \right|^2 = 4\cos^2(mvx/\hbar) . \quad (2.21)$$

Portanto, as regiões com máximos e mínimos valores da densidade de probabilidade de detecção do objeto quântico se alternam justamente de acordo com o comprimento de onda $\lambda = h/mv$.

2.7 – Exercícios

1. Partindo da equação de Schrödinger, obtenha a lei de conservação

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0 ,$$

onde $\rho(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$ e $J(x,t) = \frac{\hbar}{m} \mathrm{Im}\left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right)$.

2. Interprete a equação como uma conservação de probabilidade, definindo

$$P_{ab}(t) = \int_a^b \rho(x,t)dx$$

e calculando $\frac{dP_{ab}}{dt}$.

Capítulo 3

Estados quânticos estacionários

3.1 – Equação de Schrödinger independente do tempo

A função de onda descreve um estado quântico do sistema. Por isso, é comum chamá-la de "estado do sistema" em vez de "função de onda". Uma classe muito importante de estados quânticos são os estados *estacionários*. Esses são estados em que a função de onda é dada pelo produto de uma parte que depende somente da posição e outra parte que depende apenas do tempo:

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}. \quad (3.1)$$

Essa expressão indica que a função de onda oscila, como função do tempo, com a mesma frequência em todos os pontos do espaço (ou seja, é algo semelhante aos *modos normais de vibração* de uma corda ou de uma membrana). Substituindo a igualdade anterior na equação de Schrödinger (2.11), obtemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (3.2)$$

Essa nova equação, na qual não aparece nenhuma dependência temporal, é chamada de *equação de Schrödinger independente do tempo.*

A quantidade E, que em princípio pode ter qualquer valor real, é interpretada como sendo a energia do estado $\psi(x)$. Como $V(x)$ é a energia potencial, a quantidade $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)$ deve estar ligada com a energia cinética, o que é consistente com a ideia de que o momento está associado com o operador $-i\hbar\partial/\partial x$.

Quando um objeto quântico está restrito a existir apenas em uma determinada região restrita do espaço, existe um conjunto específico de valores que sua energia pode assumir. Isso resulta no famoso efeito de *quantização* da energia, em que essa quantidade não varia continuamente mas assume valores discretos, os chamados níveis de energia. Denotamos esses estados estacionários por $\psi_n(x)$, cada um com a energia correspondente E_n. Uma propriedade muito importante desses estados é a chamada relação de ortonormalidade, dada por:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*{}_n(x)\psi_m(x)dx = 0 \text{ se } n \neq m \text{ e}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*{}_n(x)\psi_n(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2\, dx = 1. \quad (3.3)$$

Importante assinalar que mesmo quando a função de onda inicial $\Psi(x,0)$ não corresponder a um estado estacionário, ela sempre pode ser escrita como uma composição desses estados,

$$\Psi(x,0) = \sum_n c_n\psi_n(x). \quad (3.4)$$

Os valores dos coeficientes nessa composição sempre podem ser descobertos, se soubermos a função de onda inicial.

Uma vez que a função de onda inicial tenha sido escrita nessa forma particular, sua evolução temporal é obtida através de uma composição semelhante, em que cada estado estacionário comparece com um fator de fase correspondente,

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} \quad . \quad (3.5)$$

Use a relação de ortonormalidade para mostrar que

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\Psi(x,0)dx$$

Temos assim uma maneira de obter a evolução temporal de qualquer função de onda, que consiste em uma sequência de passos: 1) decomposição da função inicial em estados estacionários; 2) evolução de cada estado em separado; 3) recomposição da função final. Esse procedimento é possível porque a equação de Schrödinger é uma equação *linear*, ou seja, a evolução temporal de uma soma de funções, como $\Psi_1(x,0)+\Psi_2(x,0)$, é igual à soma das evoluções temporais individuais, ou seja, $\Psi_1(x,t)+\Psi_2(x,t)$.

A decomposição de um estado qualquer em estados estacionários também é útil caso a energia média de uma função de onda precise ser determinada. Como o estado estacionário ψ_n possui energia E_n, a energia média da soma é simplesmente a soma das energias das componentes, cada uma delas sendo considerada com um fator-peso que depende dos coeficientes da composição. Isso permite escrever que

$$\{\text{Energia média do sistema descrito por } \Psi(x,t)\} = \sum_n |c_n|^2 E_n \quad . \quad (3.6)$$

Repare que a energia média de um estado não depende do tempo, o que está de acordo com o princípio da conservação da energia.

É importante frisar que, assim como não se pode atribuir uma posição bem determinada a um objeto quântico, assim também uma energia bem determinada não pode ser atribuída a ele caso cuja função de onda não represente um estado estacionário.

Sempre que é realizada uma medida da energia de um sistema, o valor obtido deve pertencer ao conjunto dos valores permitidos, E_n. Nenhuma medida de energia pode resultar um valor que não seja um desses números. Caso seja medida a energia de um objeto cuja função de onda é dada por (3.4) ou (3.5), o resultado *não será* igual ao valor médio da energia. Em vez disso, teremos uma situação em que o resultado da medida será uma variável aleatória! Várias medições exatamente iguais poderão dar resultados diferentes, e o resultado de uma medição específica não poderá ser previsto antecipadamente.

Cada um dos possíveis resultados, que são os valores E_n, terá uma probabilidade diferente de ocorrer, que depende da função de onda e é dada por $|c_n|^2$. Assim, caso sejam realizadas muitas medições diferentes sobre a mesma função de onda, a média dos valores obtidos para a energia será igual a (3.6). Ou seja, assim como o módulo quadrado da função de onda está ligado à probabilidade dos resultados em uma medida de posição, o módulo quadrado dos coeficientes c_n está ligado à probabilidade dos resultados em uma medida de energia.

3.2 – Sistemas unidimensionais

3.2.1 – Partícula Livre

O sistema mais simples é uma partícula livre se propagando em uma dimensão. Como nenhuma força age sobre essa partícula, podemos colocar V(x) = 0. Nesse caso, a equação de Schrödinger independente do tempo fica sendo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = E\psi(x)\,. \quad (3.7)$$

Há duas soluções linearmente independentes para essa equação, que são

$$\psi_{+p}(x) = e^{ipx/\hbar} \text{ e } \psi_{-p}(x) = e^{-ipx/\hbar} \quad (3.8)$$

sendo que a quantidade p é dada por $p = \sqrt{2mE}$.

Essas duas soluções descrevem partículas que possuem valores bem definidos de momento (e também de energia, que é essencialmente o quadrado do momento). Uma das funções descreve uma partícula que se move com momento constante para a direita, enquanto a outra representa uma partícula que se move com momento constante para a esquerda.

A partícula livre não é um sistema físico que apresenta quantização da energia. Ao contrário, há estados estacionários para qualquer valor real de E. Outra propriedade bastante peculiar é que as funções de onda em (3.8) não são normalizáveis, ou seja, não é possível fazer com que a integral de seu módulo quadrado sobre todo o espaço seja igual a 1. Essas duas propriedades (energia não quantizada, estados estacionários não normalizáveis) são comuns em sistemas abertos, nos quais uma partícula pode se mover por distâncias infinitamente longas.

3.2.2 – Poço de Potencial Infinito

O sistema quântico mais simples que apresenta a quantização de energia é formado por um objeto quântico, digamos um elétron, que pode se mover em apenas uma dimensão e está restrito ao intervalo $(0, L)$. Esse sistema é descrito por uma estrutura de poço de potencial de largura L, uma "caixa" de paredes impenetráveis. Portanto, fora da caixa a energia potencial é infinita, enquanto que dentro da caixa a energia potencial é nula e a equação de Schrödinger independente do tempo é dada por (3.7).

Entretanto, é preciso impor que o objeto não tem nenhuma probabilidade de ser encontrado fora do poço, ou seja, que $\psi(x)=0$ se $x<0$ ou se $x>L$.

Verifique que as soluções de (3.7) são da forma

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin(n\pi x/L)$$

Existe um estado estacionário ψ_n para cada inteiro positivo n. A energia associada pode ser facilmente obtida a partir da equação (3.7). O resultado é

$$E_n=\frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2mL^2}. \quad (3.9)$$

Existe, portanto, uma energia que é a menor possível, E_1, e que é diferente de zero. Assim, é preciso uma energia mínima para que um objeto quântico de massa m possa habitar um poço de largura L. O estado de menor energia, ψ_1, é chamado de *estado fundamental* do sistema. Os outros estados são chamados em geral de *estados excitados*.

Note que a energia do estado fundamental aumenta se o tamanho da região confinante diminuir. Esse fenômeno é muito curioso, pois nada parecido acontece para objetos clássicos. É como se objetos confinados em regiões menores ficassem naturalmente com energia maior. De certa maneira, isso é consequência do princípio da incerteza: uma caixa menor implica menos incerteza na posição do objeto, o que deve ser acompanhado por uma maior incerteza no momento e, consequentemente, uma maior energia.

Notamos novamente que não é necessário que a função de onda de um objeto seja um estado estacionário. Caso a função de onda inicial $\Psi(x,0)$ não seja um desses estados, o que acontece é que o objeto irá evoluir dentro do poço de alguma maneira complicada, de acordo com a equação (3.5).

Acesse http://www.falstad.com/qm1d/ para simular a evolução temporal de uma função de onda com forma inicial Gaussiana, colocada dentro de um poço infinito.

3.2.3 – Poços finitos acoplados

Uma variação interessante do problema de um sistema limitado é um poço de potencial finito, representando um objeto contido em uma caixa que não é perfeitamente fechada. Digamos que o poço tenha profundidade V, ou seja, a diferença de energia potencial entre o topo é o fundo seja V. Nesse caso, ainda vão existir estados estacionários, que descrevem um objeto para sempre confinado dentro da caixa. Entretanto, há diferenças importantes em relação ao poço de paredes impenetráveis.

As funções de onda estacionárias continuam apresentando um comportamento oscilatório dentro do poço. Mas, em contraste com o poço infinito, essas funções não precisam ser exatamente nulas quando $x<0$ ou $x>L$. Em vez disso, elas decaem a zero suavemente, apresentando um comportamento exponencial. Ou seja, temos $\psi(x)\sim e^{kx}$ para $x<0$, enquanto que $\psi(x)\sim e^{-kx}$ para $x>L$. Desse modo, sempre existe uma probabilidade de que o objeto quântico em questão seja encontrado do lado de fora do poço, caso se realize uma medida da sua posição.

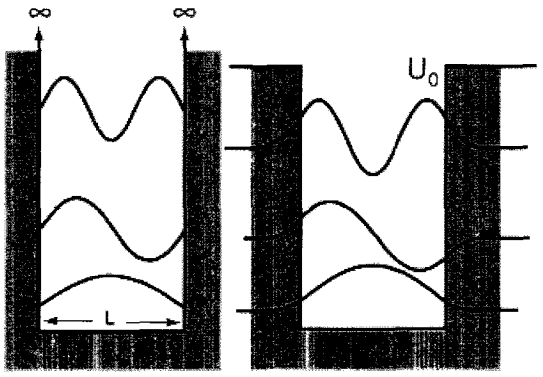


Figura 3.1 – Comparação entre o poço infinito e um poço finito. No segundo caso, as funções de onda estacionárias decaem exponencialmente a zero fora do poço.

Uma segunda diferença importante entre os poços infinito e finito é que no segundo caso o número de estados estacionários restritos ao poço é limitado: não podem existir níveis discretos de energia maiores que V. Por exemplo, vemos na Figura 3 um poço finito que contém apenas três níveis de energia quantizados. Esses estados são chamados de *confinados*.

Por outro lado, existem estados estacionários com energia maior que V, mas que não estão restritos ao poço e não são normalizáveis. Eles representam partículas que se movem eternamente para a esquerda ou para a direita, rumo ao infinito. Assim como ocorre para a partícula livre, esses estados não têm energia quantizada.

Visite a página https://phet.colorado.edu/en/simulation/bound-states, clique em "Run Now!" e simule os níveis de energia e os estados estacionários de um poço finito. Repare que: 1) quanto maior é a profundidade do poço, mais níveis existem; 2) quanto mais estreito é o poço, maior é a energia de cada nível.

É interessante considerar a situação em que há dois poços de potencial finitos iguais, um ao lado do outro. Por simplicidade, suponhamos que os poços possuem apenas um estado estacionário confinado cada, respectivamente denotados $\psi_E(x)$ e $\psi_D(x)$. Se a distância entre os poços for muito grande, então $\psi_E(x)$ e $\psi_D(x)$ basicamente nunca podem se misturar. Cada uma dessas funções está concentrada em um dos poços e decai exponencialmente para fora dele, sendo praticamente nula na região do outro poço. Ou seja, os poços comportam-se como dois poços independentes.

Entretanto, se os poços estiverem próximos, a situação é diferente. Digamos que eles são aproximados lentamente, até que as funções de onda comecem a se superpor. Nesse caso, um objeto quântico colocado no poço da esquerda terá uma probabilidade, ainda que pequena, de ser detectado no poço da direita, caso seja feita uma medida de sua posição, e vice-versa. Essa é uma manifestação do famoso *efeito túnel*: o objeto quântico "escapa" do poço em que foi colocado, mesmo não tendo energia suficiente.

Uma descrição mais precisa da situação envolve o conceito de *hibridização*. As funções de onda $\psi_E(x)$ e $\psi_D(x)$ não são estados estacionários do sistema contendo dois poços acoplados. Em vez delas, os estados estacionários verdadeiros são a sua soma e a sua diferença,

$$\psi_0(x) = \frac{\psi_E(x) + \psi_D(x)}{\sqrt{2}} \text{ e } \psi_1(x) = \frac{\psi_E(x) - \psi_D(x)}{\sqrt{2}} \quad (3.10)$$

A função $\psi_0(x)$ é o estado fundamental do sistema composto e $\psi_1(x)$ é o estado excitado, ou seja, suas energias satisfazem $E_1 > E_0$. Reparemos que um objeto quântico com função de onda $\psi_0(x)$ tem a mesma probabilidade de estar no poço da esquerda ou no da direita, e o mesmo vale para $\psi_1(x)$. Como os dois poços são indistinguíveis, esse sistema possui simetria bilateral; as funções em (3.11) respeitam essa simetria ao não privilegiar nenhum dos poços.

Um exemplo concreto de sistema aproximadamente descrito por dois poços acoplados é a molécula de hidrogênio, H_2. Nessa molécula temos dois núcleos de hidrogênio, ou seja, prótons, em torno dos quais os elétrons estão distribuídos. Esses prótons funcionam como centros atrativos simétricos, produzindo uma situação bastante semelhante àquela que acabamos de discutir.

Na mesma animação da atividade anterior, mudando para a segunda aba, *Two Wells*, é possível observar os níveis de energia e estados estacionários de poços finitos colocados lado a lado. Comece com poços estreitos e próximos, para ver os estados ψ_0 e ψ_1. Afaste os poços e veja como níveis de energia próximos se tornam indistinguíveis.

Vamos supor um objeto quântico que está inicialmente localizado no poço da esquerda, descrito pela função de onda $\psi_E(x)$. Esse objeto não está em um estado estacionário. Portanto, sua função de onda irá variar com o tempo. Escrevendo $\psi_E(x) = (\psi_0(x) + \psi_1(x))/\sqrt{2}$, obtemos a evolução temporal, dada por

$$\psi(x,t) = \frac{\psi_0(x)\mathrm{e}^{-iE_0t/\hbar} + \psi_1(x)\mathrm{e}^{-iE_1t/\hbar}}{\sqrt{2}} = \frac{\mathrm{e}^{-iE_0t/\hbar}}{\sqrt{2}}(\psi_0(x) + \mathrm{e}^{-i(E_1-E_0)t/\hbar}\psi_1(x)). \quad (3.10)$$

Repare que, para $t = \pi(E_1 - E_0)/\hbar$, temos $|\psi(x,t)|^2 = |\psi_D(x)|^2$, ou seja, um objeto quântico colocado no poço esquerdo eventualmente passa para o poço direito. Na verdade, ele executa um movimento periódico, oscilando eternamente entre os dois poços.

Uma análise ampla sobre efeitos de tunelamento na Mecânica Quântica pode ser encontrada em https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_tunnelling

O efeito túnel está na base da tecnologia que permite o funcionamento dos modernos microscópios do tipo STM (Scanning Tunneling Microscope), cuja invenção rendeu o Prêmio Nobel de Física de 1986 e que permitem visualização e manipulação de materiais na escala atômica.

Uma manifestação do efeito de tunelamento quântico é o diodo túnel. Acesse http://nanohub.org/resources/8799 e visualize o funcionamento de um diodo de tunelamento ressonante em que elétrons tunelam através de um estado de um poço ensanduichado por duas barreiras de potencial.

Detalhes sobre STM e outros microscópios com resolução na escala atômica podem ser encontrados em "Efeito Túnel e Microscopia Com Resolução Atômica", de A. V. Andrade-Neto e Ariel Almeida Abreu Silva no Caderno de Física da UEFS, 07 (01 e 02), 115-132, 2009. (Disponível em: <http://dfis.uefs.br/caderno/vol7n12/NetoAriel.pdf>).

3.2.4 – O oscilador harmônico

Dentre os sistemas envolvendo forças que variam suavemente com a posição, o mais simples é o oscilador harmônico, em que a partícula experimenta uma força de restauração que cresce linearmente com sua distância da origem. A energia potencial desse sistema é dada por

$$V(x) = \frac{kx^2}{2}, \quad (3.12)$$

e o movimento clássico é periódico, com frequência angular $\omega = \sqrt{k/m}$.

Os estados estacionários do sistema quântico satisfazem a equação de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_n(x) + \frac{kx^2}{2}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x) \quad . \quad (3.13)$$

A simplicidade do oscilador harmônico se reflete no fato de que essa equação pode ser resolvida explicitamente. O estado fundamental, $\psi_0(x)$, é uma função Gaussiana proporcional a $e^{-x^2/2a^2}$ com $a^2 = \hbar/m\omega$. Essa função descreve um objeto quântico com alta probabilidade de estar próximo da origem, dentro de um intervalo de tamanho da ordem de a. Os estados estacionários $\psi_n(x)$ são dados pelo produto dessa função Gaussiana por polinômios chamados *polinômios de Hermite*.

Os níveis de energia são quantizados, de acordo com a regra

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad . \quad (3.14)$$

Assim, o estado fundamental tem energia $E_0 = \hbar\omega/2$. Curiosamente, a diferença de energia entre dois estados excitados adjacentes é sempre a mesma, $E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$. Em outras palavras, os níveis de energia são *igualmente espaçados*. Em última análise, esse fato deriva da seguinte característica peculiar do oscilador harmônio: a frequência de oscilação é a mesma para qualquer condição inicial, independentemente da energia.

3.3 – Momento Angular

O momento angular é definido como $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = L_x\hat{i} + L_y\hat{j} + L_z\hat{k}$. A componente na direção do eixo z, por exemplo, é $L_z = xp_y - yp_x$. Na mecânica quântica, vimos que o momento deve ser substituído por uma derivada, $p_x \to -i\hbar\partial/\partial x$. Com o momento angular acontece coisa parecida. O operador correspondente é obtido trocando os momentos lineares pelas derivadas apropriadas. Para a componente z ficamos com

$$L_z \to -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \quad . \quad (3.16)$$

Se usarmos coordenadas polares,

$$x = r\cos\theta\,,\quad y = r\sin\theta \quad (3.17)$$

as derivadas devem ser expressas da mesma forma, ou seja,

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin\theta\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\,,\quad \frac{\partial}{\partial x} = \cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\,. \quad (3.18)$$

Usando esses resultados, temos simplesmente

$$L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\theta}\,. \quad (3.19)$$

Consideremos, como ilustração, uma partícula de massa μ que se move livremente em duas dimensões. Sua energia cinética é dada por $(p_x^{\,2} + p_y^2)/2\mu$, quantidade que quanticamente deve ser associada com $-\hbar^2(\partial_x^2 + \partial_y^2)/2\mu$. Em coordenadas polares, isso é dado por

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\right) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{2\mu r^2}L_z^2 \quad (3.20)$$

O segundo termo na energia, envolvendo o momento angular, é conhecido na mecânica clássica como *potencial centrífugo*.

De posse da expressão para a energia, sabemos que a equação de Schödinger independente do tempo fica sendo

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\right)\psi(r,\theta) = E\psi(r,\theta) \quad (3.21)$$

Se fizermos a hipótese de que as autofunções dependem das coordenadas de forma separável, ou seja, que $\psi(r,\theta) = R(r)\Theta(\theta)$, ficamos com

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{d^2R}{dr^2}\Theta + \frac{1}{r^2}\frac{d^2\Theta}{d\theta^2}R\right) = ER\Theta \quad (3.22)$$

Multiplicando tudo por r^2 e dividindo por $\psi(r,\theta)$, encontramos

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{r^2}{R}\frac{d^2R}{dr^2}+r^2E+\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{\Theta}\frac{d^2\Theta}{d\theta^2}=0\,. \quad (3.23)$$

Os dois primeiros termos dessa equação dependem apenas de r, enquanto o terceiro termo depende apenas de θ. A igualdade só pode valer para todos os valores das coordenadas se forem satisfeitas duas equações independentes:

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{r^2}{R}\frac{d^2R}{dr^2}+r^2E=K \text{ e } \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\Theta}{d\theta^2}=-K\Theta\,. \quad (3.24)$$

Não vamos nos ater à equação radial (ela pode ser resolvida em termos de funções de Bessel). A equação angular pode ser escrita como $L_z^2\Theta=2\mu K\Theta$, de modo que a quantidade $\sqrt{2\mu K}$ deve ser interpretada como a componente z do momento angular do sistema. Essa equação é de fácil solução: temos $\Theta_m(\theta)=e^{\pm im\theta}$, com $m=\sqrt{2\mu K}/\hbar$.

Aqui encontramos novamente o papel crucial das *condições de contorno*. No caso do poço de potencial infinito, o fato de a função de onda ter de se anular nas extremidades levou à quantização da energia. No presente caso, temos de impor uma condição diferente: que a função $\Theta(\theta)$ seja periódica de período 2π, ou seja, temos de impor a identidade $e^{\pm im(\theta+2\pi)}=e^{\pm im\theta}$. Isso só é verdade se m for um número inteiro. Assim, encontramos não a quantização da energia, mas a quantização da componente z do momento angular; esta deve ser um múltiplo inteiro de $\hbar$, já que $L_z\Theta=m\hbar\Theta$.

3.4 – Estados de Landau

Uma maneira bastante simples de forçar uma partícula carregada a permanecer restrita a uma região e espaço é submetê-la a um campo magnético. No caso mais simples de um campo constante na direção vertical $\vec{B}=B\hat{z}$, o potencial vetor pode ser escolhido como $\vec{A}=-\frac{1}{2}\vec{r}\times\vec{B}$. Esse é o chamado "calibre simétrico", um caso particular de calibre de

Coulomb (note que $\vec{\nabla}\cdot\vec{A}=0$ e $\vec{\nabla}\times\vec{A}=\vec{B}$), de modo que suas componentes sejam

$$A_x=-yB/2 \quad A_y=xB/2 \quad (3.25)$$

Sabemos que nessa situação o momento total $\vec{p}$ não é apenas o momento mecânico $m\vec{v}$, mas contém uma contribuição do potencial vetor: $\vec{p}=m\vec{v}+e\vec{A}$. A energia total é simplesmente cinética,

$$\frac{m\vec{v}^2}{2}=\frac{(\vec{p}-e\vec{A})^2}{2m}=\frac{\vec{p}^2}{2m}+\frac{e^2\vec{A}^2}{2m}-\frac{e}{m}\vec{p}\cdot\vec{A} \quad (3.26)$$

No calibre simétrico, o último termo é

$$\vec{p}\cdot\vec{A}=-\frac{1}{2}\vec{p}\cdot(\vec{r}\times\vec{B})=\frac{1}{2}\vec{B}\cdot(\vec{r}\times\vec{p})=\frac{1}{2}BL_z. \quad (3.27)$$

No contexto quântico, devemos partir da equação de Schrödinger, obtida da expressão para a energia trocando $\vec{p}$ por $-i\hbar\vec{\nabla}$. No calibre que escolhemos, e reconhecendo a frequência de ciclotron, $\omega_C=eB/m$, temos

$$H\psi=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+\frac{m\omega_C^2}{8}(x^2+y^2)\psi-\frac{\omega_C}{2}L_z\psi=E\psi \quad (3.28)$$

Os dois primeiros termos da equação lembram o oscilador harmônico. Na verdade, temos a soma de dois osciladores harmônicos, ambos de frequência $\omega_C/2$. Um deles depende apenas da coordenada x e o outro depende apenas da coordenada y. Como vimos na seção anterior, seus níveis de energia são $(n_x+1/2)\hbar\omega_C/2$ e $(n_y+1/2)\hbar\omega_C/2$, respectivamente, onde n_x e n_y são números inteiros quaisquer.

O estado fundamental desse oscilador harmônico bidimensional é, como vimos anteriormente, uma função proporcional a $e^{-(x^2+y^2)/2a^2}$, onde $a^2=2\hbar/m\omega_C$. Nesse estado, o elétron tem alta probabilidade de ser encontrado em uma região, uma pequena "célula", de área πa^2. O fluxo magnético

que atravessa essa área é $B\pi a^2 = 2B\pi\hbar / m\omega_C = 2\pi\hbar / e$. A quantidade $2\pi\hbar / e$ é chamada de *quantum de fluxo*.

A componente vertical do momento angular é uma constante de movimento para esse sistema, como consequência da simetria de rotação (a força magnética é centrípeta e não exerce torque). A relação entre simetria e conservação é um princípio fundamental, que vale tanto na física clássica quanto na física quântica.

Os níveis de energia quantizados de uma partícula carregada sujeita a um campo magnético intenso são comumente chamados de *níveis de Landau*.

3.5 – Átomo de hidrogênio

De acordo com Feynman, a descoberta científica mais importante de todos os tempos é o fato de que todas as coisas são compostas por átomos. O átomo mais simples de todos é o hidrogênio, que consiste de um próton, de carga elétrica positiva, e um elétron, de carga elétrica negativa. Em uma descrição extremamente simplificada, a energia do elétron é a soma de dois tipos de energias: a energia cinética e a energia potencial, sendo que a última é dada pela interação de Coulomb. Assim, temos:

$$E = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q_1 q_2}{r^2} \quad (3.29)$$

Energias são definidas a menos de uma constante, já que a escolha do nível zero para a energia potencial é arbitrária. Quando resolvemos um problema de queda livre na vizinhança da superfície terrestre, por exemplo, existem duas escolhas naturais para o nível zero do potencial gravitacional: a posição inicial do corpo e o chão. Uma peculiaridade da energia de interação de Coulomb é que seu nível zero é usualmente escolhido no *infinito*. Assim, duas cargas que estejam a uma distância qualquer uma da outra sempre têm energia

potencial negativa. A energia total pode ser negativa ou positiva, dependendo da energia cinética.

Considerando o referencial em que o próton está parado[3], um elétron que possui energia negativa está efetivamente restrito a uma região do espaço: não pode se afastar infinitamente. Isso faz com que os estados estacionários possíveis sejam quantizados. Há o estado fundamental, de menor energia, e infinitos estados excitados. O estado fundamental é aquele em que o elétron está, em média, mais próximo ao próton. A distância média entre o elétron e o próton no estado fundamental do átomo de hidrogênio é chamada de *raio de Bohr*. Essa quantidade é usualmente denotada pela letra a e vale cerca de 5×10^{-11} metros, ou 0.5 Angstrom.

Vale notar que a existência de níveis quantizados foi percebida experimentalmente para átomos de mercúrio já em 1914, no experimento de Franck-Hertz. Se um átomo está em seu estado fundamental, a menor quantidade de energia que ele consegue absorver é a diferença entre esse estado e o primeiro estado excitado. Acelerando elétrons através de um gás de mercúrio, percebe-se que a corrente elétrica diminui periodicamente como função da voltagem. Isso é interpretado da seguinte maneira: quando a voltagem atinge um valor tal que a energia cinética dos elétrons é igual à do primeiro estado excitado, essa energia passa a ser transferida para os átomos de mercúrio.

Uma realização recente do experimento de Franck-Hertz é discutida no artigo "New features of the Franck-Hertz experimente", publicado em 2006 no volume 74, p. 423 da American Journal of Physics (Disponível em: <http://grundpraktikum.physik.uni-saarland.de/scripts/New_features.pdf>).

3 Como a massa do próton é muito maior que a do elétron, a existência desse referencial é uma boa aproximação.

Execute a simulação da experiência de Franck-Hertz, do laboratório virtual indiano Amrita em vlab.amrita.edu/?sub=1&brch=195&sim=355&cnt=1

Vejamos agora uma discussão um pouco mais aprofundada da teoria do átomo de hidrogênio. Começamos pelo fato de que esse átomo precisa necessariamente ser estudado em três dimensões. Assim, seus estados estacionários dependerão de (x,y,z).

Para esse sistema, a equação de Schrödinger independente do tempo é dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\psi(x,y,z)-\frac{K}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z). \quad (3.30)$$

A equação (3.9) está escrita no sistema de coordenadas cartesiano, mas esse não é o melhor sistema de coordenadas para esse problema justamente por causa da forma complicada da energia potencial. Como essa energia depende apenas da distância ao próton, é mais conveniente utilizar o sistema de coordenadas esféricas. Nesse sistema, usamos as variáveis (r,θ,ϕ) relacionadas às variáveis cartesianas pelas equações

$$x=r\sin\theta\cos\phi\,,\quad y=r\sin\theta\sin\phi\,,\quad z=r\cos\theta\,. \quad (3.31)$$

Usando essas coordenadas, a equação de Schrödinger fica

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)-\frac{K}{r}\psi+\frac{1}{2\mu r^2}L^2\psi=E\psi\,, \quad (3.32)$$

Onde vemos novamente, assim como na seção anterior, o aparecimento do potencial centrífugo $\frac{L^2}{2\mu r^2}$. Nesse caso, deevemos usar o valor total do momento angular, e não só da componente z, pois estamos tratando um sistema tridimensional. O operador que corresponde à quantidade $L^2=L_x^2+L_y^2+L_z^2$ é o seguinte:

$$L^2 = \frac{\hbar^2}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{\hbar^2}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} = \frac{\hbar^2}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}L_z^2 \quad (3.33)$$

A equação (3.32) tem uma aparência bem mais complicada que a (3.30), mas na verdade é mais simples de resolver. A simplicidade reside no fato de que ela, assim como aconteceu para a partícula livre na seção anterior, admite soluções separáveis,

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi). \quad (3.34)$$

Substituindo essa igualdade na equação, obtemos três equações independentes:

$$L_z^2\Phi = -\hbar^2\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = m^2\hbar^2\Phi, \quad (3.35)$$

$$-\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\frac{m^2}{\sin^2\theta}\Theta = \ell(\ell+1)\Theta, \quad (3.36)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}R-\frac{K}{r}R = ER. \quad (3.37)$$

As constantes m e ℓ são chamadas de constantes de separação, e precisam ser *quantizadas*, ou seja, o problema só admite soluções razoáveis para alguns valores dessas constantes. Em particular, ambas devem ser números inteiros. A primeira das equações apresentadas é a quantização da componente z do momento angular, que já encontramos anteriormente.

Vejamos a última das equações, chamada equação *radial*. É possível mostrar que para raios grandes a solução deve se comportar como $R(r)\sim e^{-kr}$, com $k=\sqrt{-2mE}/\hbar$, enquanto que para raios pequenos ela deve se comportar como $R(r)\sim r^{\ell+1}$. Portanto, escrevemos $R(r)=r^{\ell+1}e^{-kr}f(r)$, de modo a isolar os comportamentos já identificados, e buscamos encontrar a função $f(r)$. Ao fazer isso, descobrimos que ℓ deve ser um inteiro positivo e que as energias admissíveis são dadas por

$$E_n = -\frac{K^2\mu}{2\hbar^2 n^2} = \frac{\hbar^2}{2\mu a^2 n^2} = \frac{E_1}{n^2}, \quad (3.38)$$

onde n é um outro inteiro positivo, a é o raio de Bohr e E_1 é a energia do estado fundamental. Essa energia é de $E_1 = -13.6$ elétrons-Volt. Essa é a mínima energia que é preciso dar ao átomo de hidrogênio para ionizá-lo, ou seja, separar seu elétron de seu próton. A função $f(r)$ que buscávamos resulta ser um polinômio diferente para cada par de valores n, ℓ. Esses polinômios são conhecidos como polinômios de Laguerre.

Os números ℓ e n são chamados de *números quânticos*, sendo n o número quântico principal e ℓ o número quântico azimutal. A interpretação física dessa quantidade advém da equação $L^2\Theta(\theta)\Phi(\phi) = \ell(\ell+1)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$. Ou seja, o valor $\ell(\ell+1)$ está associado ao quadrado do momento angular total.

As energias permitidas do átomo de hidrogênio, na descrição aproximada que estamos usando aqui,[4] dependem apenas do número quântico principal. O leitor perceberá imediatamente uma diferença grande com as energias do poço infinito unidimensional. Naquele caso as energias eram proporcionais ao quadrado de um número inteiro, enquanto aqui elas são *inversamente* proporcionais a n^2. Isso significa que conforme n cresce as energias vão diminuindo e ficando mais próximas, tendendo a zero. Isso é compreensível se nos lembrarmos que colocamos o zero da nossa energia potencial a uma distância infinita do próton. Assim, um elétron que esteja em um estado altamente excitado, com n grande, estará longe do próton e terá energia próxima de zero.

O átomo pode absorver energia de modo que o elétron passe de um nível para outro mais alto. Entretanto, também

4 Levamos em conta apenas as energias cinética e potencial, mas existem outras energias em jogo no átomo de hidrogênio, advindas de correções relativísticas.

é possível o processo contrário, em que o elétron se transfere para um nível mais baixo e a diferença de energia é liberada. A pergunta natural é: em que essa energia se transforma? A resposta é que ela se manifesta na forma de radiação eletromagnética. Cada vez que um elétron atômico realiza uma transição entre níveis energéticos, uma pequena quantidade, um *quantum*, de radiação é emitida pelo átomo. Esse quantum de radiação é chamado de *fóton*.

Se um elétron passa de um nível de energia E_1 para outro de energia E_2, a frequência do fóton correspondente (emitido ou absorvido) deve ser igual a $\nu = (E_2 - E_1)/2\pi\hbar$. Em outras palavras, a energia de um fóton e sua frequência devem estar relacionadas pela igualdade $E = 2\pi\hbar\nu$. Essa relação foi inicialmente postulada por Planck para explicar o espectro de radiação de corpo negro. Nesse caso a frequência ν é a de um conjunto de osciladores harmônicos carregados, modelando a matéria contida no corpo negro. Em contexto completamente diferente, Einstein fez a hipótese de que a radiação eletromagnética era formada por quanta de luz (fótons) com energia dada pela mesma expressão, mas agora ν é a frequência da luz. Ele usou essa hipótese para explicar o efeito fotoelétrico.

Sabendo que $\nu = c/\lambda$, onde c é a velocidade da luz, temos a igualdade $E = 2\pi\hbar c/\lambda$. Assim, o comprimento de onda de um fóton que é produzido pela transição entre estados de números quânticos principais n_1 e n_2 deve satisfazer a relação

$$\frac{1}{\lambda} = \mathcal{R}\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right), \quad (3.39)$$

onde $\mathcal{R} = K^2\mu/4\pi\hbar^3 c$ é chamada de constante de Rydberg. Transições com $n_1 = 1$ estão no ultravioleta e são conhecidas como série de Lyman; transições com $n_1 = 2$ estão na região visível e são conhecidas como série de Balmer; transições com $n_1 = 3$, conhecidas como série de Paschen, já estão no

infravermelho. Essas transições estão esquematizadas na Figura 3.2.

Para finalizar, voltemos às equações (3.13) e (3.14). Não vamos discutir em detalhes sua solução, mas podemos mencionar que os produtos $\Theta(\theta)\Phi(\phi) = Y_{\ell,m}(\theta,\phi)$ são funções conhecidas como *harmônicos esféricos*. Essas funções são os famosos *orbitais* que aparecem nas aulas de química do ensino médio.

O número quântico m, chamado número quântico magnético, também deve ser um número inteiro. Ele pode ser negativo, mas deve satisfazer a condição $-\ell \leq m \leq \ell$. Como também existe a condição $0 \leq \ell < n$, vemos que a cada nível de energia corresponde na verdade um total de

$$\sum_{\ell=0}^{n-1}\sum_{m=-\ell}^{\ell} 1 = \sum_{\ell=0}^{n-1}(2\ell+1) = n^2 \quad (3.40)$$

estados estacionários. Esses estados são diferentes, mas possuem a mesma energia. Essa "coincidência" (também chamada de "degenerescência") decorre da grande simplicidade do átomo de hidrogênio na aproximação considerada aqui. Se introduzirmos correções relativísticas, os níveis de energia passam a depender de ℓ; se colocarmos o átomo em um campo magnético, os níveis de energia passam a depender também de m.

Acesse http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/hyde.html#c4 para a discussão da física do átomo de hidrogênio. Pule a introdução e siga direto para o quadro Hydrogen Energy Level Plot.

Trabalhe com o simulador Emission spectra do Laboratório Virtual Amrita em vlab.amrita.edu/?sub=1&brch=195&sim=359&cnt=1

Vemos que o conhecimento das frequências dos fótons que um dado elemento pode emitir permite que se obtenham

informações sobre seus níveis de energia. De fato, ainda no século XIX, antes do estabelecimento da teoria quântica, já se conhecia experimentalmente o fato de que átomos emitem e absorvem radiação em apenas algumas frequências, e existiam tabelas com as frequências características de vários elementos.

Desde a década de 1990, é possível usar espelhos de altíssima qualidade para aprisionar luz, produzindo um estado estacionário de fótons. Metade do prêmio Nobel de física de 2012 foi dada a Serge Haroche por suas pesquisas nesse campo. Vale mencionar aqui o artigo "Quantum jumps of light recording the birth and death of a photon in a cavity", publicado por seu grupo em 2007, no volume 446 da revista *Nature* (Disponível em: http://arxiv.org/abs/quant-ph/0612031). Nesse artigo, um feixe de átomos é usado para medir indiretamente o estado quântico do fóton. Dessa maneira, é possível ver o momento em que ocorre uma transição abrupta no estado, quando um fóton é produzido ou destruído.

3.6 – Exercícios

1. Considere um oscilador harmônico cujo período de movimento clássico é T. Mostre que, para esse sistema, toda função de onda inicial possui uma evolução temporal periódica: $|\Psi(x,t)|^2$ tem período T e $\Psi(x,t)$ tem período 2T, sendo que $\Psi(x,t+T)=-\Psi(x,t)$.

2. Para um objeto de massa m confinado a um poço de potencial infinito de largura L, o período de movimento clássico não é único como para o oscilador harmônico, mas depende da energia. Mostre que, ainda assim, toda função de onda inicial possui uma evolução temporal periódica com período $T=2\pi\hbar/E_0$, onde E_0 é a energia do estado fundamental (note que essa escala de tempo não é clássica).

Capítulo 4

Elétrons confinados em baixa dimensionalidade

Vamos discutir brevemente neste Capítulo um tipo muito importante de sistemas quânticos, que são os elétrons confinados. Consideramos inicialmente confinamento em duas dimensões, ou seja, elétrons que podem se mover em um plano. Em seguida, tratamos os chamados *fios quânticos*, em que elétrons estão restritos a uma dimensão. Finalmente, mencionamos sistemas em que elétrons estão confinados em todas as direções, conhecidos como *pontos quânticos*.

4.1 – Elétrons em duas dimensões

Vimos na Seção 3.2.1 um tipo de sistema quântico bastante simples, que é o poço infinito unidimensional. Um objeto quântico colocado dentro de um poço desses dispõe de infinitos estados estacionários, com energias que crescem com o quadrado de um número inteiro.

Imaginemos uma folha de metal muitíssimo fina, que está no plano x-y. Podemos considerar que na direção z temos justamente um poço de potencial infinito, cuja largura

é igual à espessura da folha. Elétrons livres do metal podem se mover com qualquer energia no plano x-y, mas estão confinados na direção z. Nessa direção eles são obrigados a estar em um dos estados estacionários do poço.

Se a energia dos elétrons for pequena, podemos ter quase certeza de que eles estarão sempre no estado fundamental desse poço. Ou seja, temos uma onda que é sempre a mesma na direção z, e só há dinâmica interessante no plano x-y.

Por incrível que pareça, a situação apresentada pode ser realizada em laboratório. Em lugar de uma folha finíssima, utiliza-se a superfície de contato entre dois materiais semicondutores. Costuma-se dizer que os elétrons que ficam aprisionados nessa superfície formam um *gás de elétrons bidimensional*.

O artigo "Quantum Wells for Photonics" de Daniel Chemla (Physics Today 38(5), 56, 1985) é uma excelente introdução aos poços quânticos formados por materiais semicondutores.

Uma aplicação muito famosa do gás de elétrons bidimensional foi no estudo do efeito Hall quântico. Lembremos primeiro o que é o efeito Hall clássico. Temos uma folha condutora que experimenta uma diferença de potencial V entre duas extremidades ao longo do eixo x, de modo que ela é atravessada por uma corrente elétrica I, da esquerda para a direita. Aplica-se então um campo magnético B transversalmente à folha. Como resultado, aparece uma voltagem entre beiradas superior e inferior da folha, chamada de tensão Hall.

A teoria do efeito Hall clássico é relativamente simples. Os elétrons que estão viajando para a direita sofrem, devido à presença do campo magnético, uma força para cima, se concentrando na extremidade superior da folha. A extremidade inferior, em contraste, fica com carência de elétrons.

Portanto, é produzida uma diferença de potencial elétrico. Eventualmente essa diferença de potencial equilibra a força magnética $E_y = vB$, de modo que a corrente continua sendo horizontal.

A voltagem Hall é dada por $V_H = wE_y = wvB$, sendo w a largura da folha. A resistência Hall, por sua vez, é definida como $R_H = V_H / I_x$. Se todos os elétrons têm carga e e velocidade v, então o valor da corrente será $I_x = dwev$, onde d é a densidade superficial de elétrons. Em conclusão, temos que a resistência Hall é dada por $R_H = B / de$. Vale notar que a teoria prediz um crescimento linear com o campo magnético.

Como será que as leis de mecânica quântica afetam o efeito Hall? Com a aplicação do campo magnético, os elétrons ficam confinados em regiões do plano com estados quânticos bem definidos chamados de níveis de Landau, como discutido na Seção 3.4. Qualitativamente, podemos imaginar que o plano ocupado pelos elétrons é dividido em "células", cada uma delas atravessada por um número inteiro de quanta de fluxo magnético, $\phi_0 = 2\pi\hbar / e$.

Podemos escrever a resistência Hall como $R_H = \phi_0 / de\pi\ell^2$. A quantidade $\nu = d\pi\ell^2$ é chamada de fator de preenchimento. Ela representa o número de elétrons por célula. Como veremos no próximo Capítulo, a natureza só aceita elétrons na mesma célula se eles estiverem em níveis de energia diferentes. Assim, se imaginarmos que o campo magnético está sendo variado, a cada vez que ν passa por um número inteiro devemos ter uma transição entre níveis de energia. Ou seja, haverá uma quantização do inverso da resistência Hall de acordo com $(R_H)^{-1} = \nu e^2 / \hbar$. A quantidade $\hbar / e^2$ é conhecida como *quantum de resistência*. Ela é encarada como o padrão moderno da resistência elétrica, e vale cerca de 25.812,8 Ω.

O efeito Hall quântico foi observado pela primeira vez em 1980, por Klaus von Klitzing, que ganhou o prêmio Nobel de 1985. A Figura 4.1 mostra um resultado experimental em

que se pode ver claramente a variação descontínua da resistividade Hall com o campo magnético (note como o crescimento inicial, em campo baixo, é linear). Os valores de ν para os quais há um salto correspondem a números inteiros com uma precisão de uma parte em 10^{10}. É importante salientar que estamos vendo um efeito quântico em um sistema que possui um número macroscópico de elétrons! A figura também mostra, na parte de baixo, a derivada da resistividade.

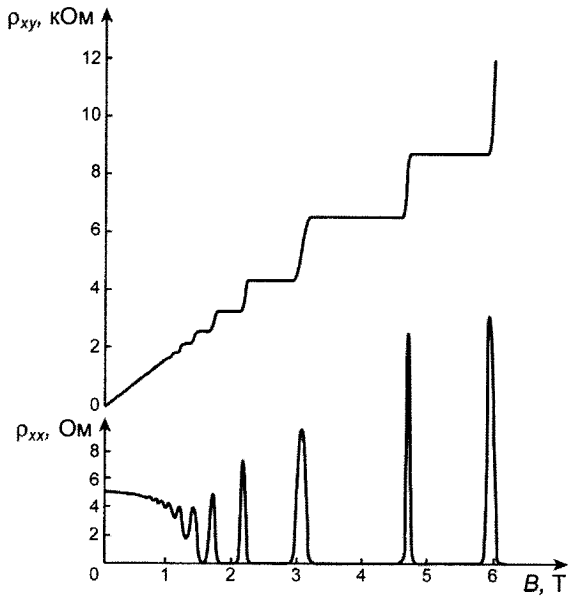


Figura 4.1 – Resistência Hall (em Ohms) em função do campo magnético (em Teslas), exibindo efeitos de quantização para campos intensos. Observe que os efeitos quânticos são mais pronunciados em campos magnéticos altos.

Como leitura adicional, acesse https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_Hall_effect e curta a animação incluida nesse verbete.

4.2 – Elétrons em uma dimensão

É possível adicionar um confinamento lateral ao gás de elétrons bidimensional, de maneira a obrigar os elétrons a viver em um "canal" cuja largura é da ordem de seu

comprimento de onda. Esse regime é normalmente designado de *fio quântico*. Nesse caso, os elétrons podem se mover livremente na direção x, mas na direção y eles devem estar em um estado estacionário semelhante aos do poço infinito. Esses estados estacionários são chamados de *modos transversais*.

Um dos primeiros fios quânticos produzidos consiste de gerar uma constrição no gás de elétrons bidimensional formando o regime de fio quântico que é conhecido como "contato quântico pontual" – *point contact*) A Figura 4.2 mostra o esquema de formação de um canal unidimensional (fio quântico) entre dois reservatórios de elétrons.

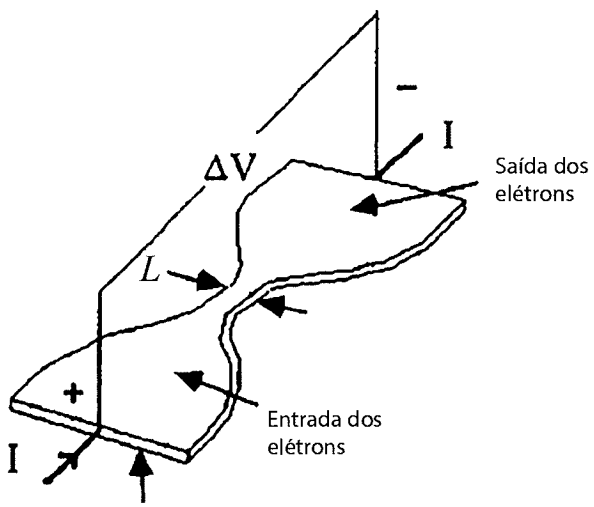


Figura 4.2 – Esquema da constrição de um gás de elétrons bidimensional para produzir um canal unidimensional de largura L ou fio quântico. Elétrons fluem de um terminal a outro devido ao potencial ΔV.

Se a largura do fio é L, sabemos que os níveis de energia têm a forma $n^2\pi^2 / 2mL^2$. Se um dado elétron tem energia total E, ele pode estar em qualquer modo transversal com energia menor que E. Se ele estiver no n-ésimo modo, sua energia se decompõe na forma

$$E = \frac{n^2\pi^2}{2mL^2} + \frac{mv_x^2}{2}, \quad (4.1)$$

ou seja, os elétrons que ocupam modos transversais mais baixos se movem com maior velocidade na direção x, enquanto que elétrons que ocupam modos transversais mais altos têm de se mover mais lentamente.

Se colocamos uma diferença de potencial ΔV entre as pontas do fio, os elétrons vão se mover e haverá uma corrente elétrica. A energia dos elétrons será proporcional à voltagem aplicada. Porém, novamente, só podemos colocar um elétron por modo transversal. Se a energia for muito alta, diferentes elétrons podem se acomodar em diferentes modos, e haverá uma corrente grande. Nesse regime temos a conhecida lei de Ohm: a corrente é proporcional à voltagem.

Por outro lado, para baixas voltagens, somente alguns modos transversais podem ser ocupados. Se a voltagem for muito pequena, só o primeiro modo poderá ser ocupado e apenas um elétron fluirá de cada vez. Se a voltagem foi um pouco maior, poderemos ter dois elétrons ao mesmo tempo, e assim por diante. Ou seja, a corrente será *quantizada*.

A condutância G do sistema é dada por

$$G = \frac{I}{\Delta V} = \left(\frac{2e^2}{h} \right) N \quad (4.2)$$

em que N é o numero de modos que podem ser acomodados no canal. Nesse caso não vale a lei de Ohm, pois a corrente não varia linearmente, é quantizada (em plateaux como no Efeito Hall Quantizado). O leitor interessado pode consultar a Wikipedia para referências em https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_point_contact.

Outros tipos de fios quânticos (confinamento de elétrons em duas dimensões espaciais) costumam ser fabricados usando interfaces entre semicondutores, como mencionado anteriormente, ou usando nanotubos de carbono. Veja https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_wire para detalhes e referências.

Um tratamento tutorial com ênfase nos fenômenos observados em amostras em que portadores de carga estão confinados a duas ou a uma dimensão, ao invés de detalhes teóricos, é dado no artigo de D.F. Holcomb, American Journal of Physics, 67 (4), 278-297, 1999. O artigo também descreve brevemente outros materiais sólidos que exibem fenômenos de intereferência e difração de elétrons.

4.3 – Elétrons em zero dimensão

Finalmente, podemos confinar elétrons em todas as dimensões, de modo que eles não consigam se mover livremente para nenhum lado. Nesse caso, teremos o que se chama um *ponto quântico*. Na prática, temos um gás de elétrons bidimensional e um confinamento extra que restringe os elétrons a uma certa região. Essa região tem dimensões características da ordem do comprimento de onda do elétron.

No início, pontos quânticos foram chamados também de "átomos artificiais", por serem estruturas fabricadas que possuem níveis de energia discretos, mas que são muito mais facilmente controláveis do que átomos. Por exemplo, pode-se construí-los em geometrias variadas: círculos, retângulos, estádios etc. As técnicas para a fabricação dessas estruturas é o crescimento epitaxial, notadamente a epitaxia por feixe molecular (MBE) e a deposição química na fase vapor (CVD) em que monocamadas atômicas adjacentes de diferentes materiais são crescidas a litografia óptica e de elétrons.

Além disso, é possível conectar um ponto quântico a uma fonte e a um sorvedouro de elétrons, e fazer passar corrente por eles. O estudo dessa corrente permite então entender melhor suas propriedades quânticas. Outra ideia interessante é aproximar dois pontos quânticos, situação em que um elétron pode passar de um para o outro por efeito túnel. Também é possível projetar pontos quânticos que emitam radiação em frequências específicas (quando elétrons

confinados mudam de nível de energia, emitem ou absorvem fótons, assim como acontece com átomos).

Os sistemas discutidos são exemplos de como a Mecânica Quântica funciona em estruturas semocondutoras fabricadas artificialmente por modernas técnicas de crescimento epitaxial e que constituem a base da microeletrônica e optoeletrônica. Leo Esaki, Nobel de Física pela construção do Diodo Túnel, assim se expressou no artigo "Do-it yourself Quantum Mechanics in Low-dimensional Structures" (Physica Scripta, Vol. T42, 102-109, 1992):

"A mecânica quântica, na verdade, desempenhou um papel indispensável no mundo da física moderna, incluindo a nossa compreensão das características dos semicondutores. Por volta do final do século XX, ficou claro que a mecânica quântica expandiu o seu papel, ou seja, seus princípios têm sido utilizados na concepção de novas estruturas semicondutoras que exibem propriedades ópticas e de transporte sem precedentes".

O artigo "Optical studies of single quantum dots" de Gammon & Steel (Physics Today 55 (10), 36, 2002) apresenta uma boa introdução sobre o tema.

Capítulo 5

Formalismo

5.1 – Notação de Dirac

Vamos agora introduzir uma notação que é universalmente utilizada quando se discute mecânica quântica, a chamada *notação de Dirac*. O que se faz é escrever, em vez de uma função de onda, um *estado* para o sistema. Esse estado representa toda a informação existente sobre o objeto em questão.

Por exemplo, se sabemos com toda certeza que o objeto está na posição x, então denotamos seu estado por $|x\rangle$ (podemos ler assim: "o estado que tem posição x"). Por outro lado, se sabemos que seu momento é igual a p, então seu estado é denotado por $|p\rangle$ (podemos ler assim: "o estado que tem momento p").

Digamos que a posição de nosso objeto não é perfeitamente conhecida, e que ele tem função de onda $\Psi(x)$. Então, o estado correspondente é $|\Psi\rangle = \int \Psi(x)|x\rangle dx$. Ou seja, é uma combinação linear de todos os estados que têm posição bem definida, cada um com um peso que é dado pela função de onda. Por outro lado, se a função de onda

de momento for $\Phi(p)$, também podemos escrever o estado como uma combinação linear de estados de momento como $|\Psi\rangle = \int \Phi(p)\,|\,p\rangle dp$.

Podemos inverter essas equações e escrever as funções de onda a partir do estado:

$$\Psi(x) = \langle x\,|\,\Psi\rangle \text{ e } \Phi(p) = \langle p\,|\,\Psi\rangle \,. \quad (5.1)$$

Dizemos que as funções de onda de posição e de momento são "representações" diferentes do mesmo estado. O estado é assim algo mais fundamental, inerente ao sistema, enquanto as funções de onda são diferentes maneiras que podemos escolher para escrever esses estados, dependendo se estamos mais interessados na posição ou no momento, conforme for mais conveniente. Falamos em "representação de posição" e em "representação de momento", sendo que as duas são fisicamente equivalentes.

A notação de Dirac tem ainda uma outra qualidade: ela é capaz de descrever estados quânticos aos quais não está associada nenhuma função de onda, como o spin do elétron, que estudaremos adiante.

O conjunto dos estados possíveis de um sistema quântico é sempre um espaço vetorial, ou seja, estados quânticos têm as mesmas propriedades que os vetores comuns: eles podem ser somados e multiplicados por números. Assim, se $|\Psi_1\rangle$ e $|\Psi_2\rangle$ são dois estados que um certo objeto quântico pode assumir, então necessariamente esse objeto também pode assumir o estado $a\,|\Psi_1\rangle + b\,|\Psi_2\rangle$, onde a e b são números complexos quaisquer.

A quantidade

$$\langle \Psi_1\,|\,\Psi_2\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^*(x)\Psi_2(x)dx \quad (5.2)$$

é chamada de *produto interno* entre os dois estados $|\Psi_1\rangle$ e $|\Psi_2\rangle$. Caso essa quantidade seja nula, dizemos que os estados

são *ortogonais*. Os estados estacionários do poço infinito, por exemplo, que vimos em detalhe no Capítulo anterior, são ortogonais entre si, pois

$$\int_0^L \sin(\frac{n\pi x}{L})\sin(\frac{m\pi x}{L})dx = 0 \text{ se } n \neq m \,. \quad (5.3)$$

Ressaltamos que a presente noção de "ortogonalidade" não guarda qualquer relação com a ortogonalidade entre retas, ou com ângulos de noventa graus. É uma ortogonalidade entre funções, definida exclusivamente em termos de uma integral.

5.2 – Observáveis

Quando usamos a notação de Dirac para os estados de um sistema, as quantidades físicas devem ser trocadas por "operadores", que atuam sobre estados produzindo outros estados. Por exemplo, à posição e ao momento correspondem os operadores de posição e de momento, denotados respectivamente por $\hat{X}$ e por $\hat{P}$. Os estados que têm posição e momento bem definidos são seus autoestados, ou seja,

$$\hat{X}\,|\,x\rangle = x\,|\,x\rangle \text{ e } \hat{P}\,|\,p\rangle = p\,|\,p\rangle \,.$$

Esses operadores são representados de formas diferentes nas representações de posição e de momento. Na representação de posição, o operador de posição é representado por uma simples multiplicação. Isso é escrito como

$$\langle x\,|\,\hat{X}\,|\,\Psi\rangle = x\langle x\,|\,\Psi\rangle \,. \quad (5.4)$$

Analogamente, na representação de momento, o operador de momento é representado por uma simples multiplicação na forma

$$\langle p\,|\,\hat{P}\,|\,\Psi\rangle = p\langle p\,|\,\Psi\rangle \,. \quad (5.5)$$

Entretanto, na representação de posição, o operador de momento aparece como a derivada, e vice-versa:

$$\langle x|\hat{P}|\Psi\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\langle x|\Psi\rangle \text{ e } \langle p|\hat{X}|\Psi\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\langle p|\Psi\rangle . \quad (5.6)$$

É importante mencionar que os operadores de posição e momento *não comutam*, ou seja, a ordem em que são utilizados é essencial.

Considerando a ação dos operadores $\hat{X}\hat{P}$ e $\hat{P}\hat{X}$ sobre uma função qualquer $f(x)$, podemos mostrar que esses operadores satisfazem a igualdade $\hat{X}\hat{P} - \hat{P}\hat{X} = i\hbar$.

A diferença $\hat{X}\hat{P} - \hat{P}\hat{X} = [\hat{X}, \hat{P}]$ é chamada de *comutador* de dois operadores. A equação $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$ é chamada de relação de comutação. Ela possui uma interpretação operacional: medir primeiro a posição de um objeto e depois o momento é diferente de medir primeiro o momento e depois a posição. Assim, a medida de um observável pode acabar influenciando o resultado da medida de outro observável. Por outro lado, se dois operadores comutam, digamos $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, então medidas de $\hat{A}$ não influenciam medidas de $\hat{B}$, e vice-versa.

É claro que também podemos definir operadores associados às outras dimensões espaciais, ou seja, os operadores $\hat{Y}$, $\hat{Z}$ e seus momentos associados, $\hat{P}_y$ e $\hat{P}_z$. A posição total do sistema é a soma dos operadores posição de cada dimensão, $\hat{R} = \hat{X} + \hat{Y} + \hat{Z}$. Analogamente, o momento total é dado por $\hat{P} = \hat{P}_x + \hat{P}_y + \hat{P}_z$. Na representação de posição, esse operador é escrito em termos de derivadas parciais: $\hat{P} = -i\hbar(\partial/\partial x + \partial/\partial y + \partial/\partial z)$.

Outro operador importante que deve ser mencionado é o *operador* Hamiltoniano, também chamado mais simplesmente de *Hamiltoniana*. Esse operador corresponde à energia do sistema, podendo ser escrito em termos dos operadores de posição e momento como

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(\hat{R}) \,, \quad (5.7)$$

em que $V(x)$ é a energia potencial. Assim, a equação de Schrödinger passa a ser escrita na forma

$$\hat{H} \,|\, \Psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\, \Psi(t)\rangle \,. \quad (5.8)$$

No Capítulo anterior, vimos essa equação na representação de posição, em uma dimensão:

$$\langle x \,|\, \hat{H} \,|\, \Psi(t)\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) + V(x)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle x \,|\, \Psi(t)\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) \,. \quad (5.9)$$

Nesse ponto, é interessante observar que para Hamiltonianas que não dependem do tempo, a equação de Schrödinger possui solução imediata: $|\, \Psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar} \,|\, \Psi(0)\rangle$ (basta derivar essa igualdade para verificar isso). Entretanto, a simplicidade dessa solução é enganosa, já que ela envolve a exponencial de um operador, e não a exponencial de um número real ou complexo. Trataremos de um exemplo na Seção 7.1.1.

Quando a Hamiltoniana atua sobre um estado estacionário, o resultado é o mesmo estado, multiplicado por sua energia. Ou seja, a equação de Schrödinger independente do tempo, estudada ao longo deste Capítulo, pode ser escrita como

$$\hat{H} \,|\, \psi_n\rangle = E_n \,|\, \psi_n\rangle \,. \quad (5.10)$$

Em álgebra linear, uma equação como essa ("operador atuando sobre um estado resultando em um escalar (número) vezes o mesmo estado") é chamada de *equação de autovalores*. Os números E_n que aparecem do lado direito são chamados de autovalores do operador $\hat{H}$, enquanto que os estados $|\, \psi_n\rangle$ correspondentes são chamados de autoestados ou autovetores.

Posição, momento e Hamiltoniana são operadores especiais, pois correspondem a quantidades físicas reais, que podem realmente ser medidas (existem operadores que não correspondem a nenhuma grandeza física). Operadores desse tipo são chamados de *observáveis*. Os observáveis são especiais porque possuem várias propriedades importantes:

1) seus autovalores são sempre números reais;

2) seus autovetores $|\phi_n\rangle$ são sempre ortogonais,[5] $\langle\phi_m|\phi_n\rangle = 0$;

3) seus autovetores formam uma *base*, ou seja, qualquer estado pode ser escrito como combinação dos autovetores, $|\psi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle$ (mencionamos esse fato no caso particular do poço infinito). Os coeficientes dessa combinação são dados por $c_n = \langle\phi_n|\psi\rangle$.

5.3 – Postulados da Mecânica Quântica

Uma vez a nosso dispor as noções de *estado* e de *observável*, podemos discutir como a Mecânica Quântica pode ser estruturada como teoria física em torno de alguns postulados. Esses postulados são os seguintes:

1) O estado de um objeto quântico é especificado por um vetor normalizado $|\Psi\rangle$.

Isso significa que tudo que podemos saber sobre um dado sistema quântico está contido em seu estado. Sabendo o estado, em princípio conhecemos tudo.

2) O valor médio do observável $\hat{Q}$ no estado $|\Psi\rangle$ é dado por $\langle\Psi|\hat{Q}|\Psi\rangle$, ou seja, é o produto interno entre $|\Psi\rangle$ e o resultado da ação de $\hat{Q}$ sobre $|\Psi\rangle$. Em particular, se $Q(x)$ é a representação de posição do observável $\hat{Q}$, então $\langle\Psi|\hat{Q}|\Psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) Q(x) \Psi(x) dx$.

5 Por simplicidade, vamos ignorar sutilezas ligadas ao fenômeno de degenerescência, ou seja, a existência de diferentes autoestados de um operador com o mesmo autovalor.

Como já discutimos bastante, em geral as grandezas físicas são *incertas* e não podem ser especificadas de antemão para um objeto quântico. Assim, podemos falar apenas em valores médios.

Os dois primeiros postulados não ofendem nossa intuição, agora que estamos acostumados a pensar de forma probabilística. De fato, se retornarmos ao Capítulo I, no qual tratamos da descrição probabilística da física clássica, notaremos que naquele contexto poderíamos ter enunciado os seguintes "postulados": A) Um objeto clássico é especificado por uma densidade de probabilidade normalizada $f(x)$; B) O valor esperado de uma quantidade $Q(x)$ é dado por $\int_{-\infty}^{\infty} Q(x)f(x)dx$. Os dois primeiros postulados que apresentamos para a mecânica quântica são análogos a esses dois.

Os próximos postulados não possuem análogos em física clássica e marcam uma divergência clara entre essas duas teorias. De certa forma, o que eles oferecem é uma *interpretação* para os autovalores e os autovetores dos observáveis. Salientamos que essa interpretação tem um caráter estatístico e que a realização de medições tem um papel crucial.

3) Uma medida do observável $\hat{Q}$ no estado $|\Psi\rangle$ resulta sempre um dos autovalores do operador $\hat{Q}$.

4) A probabilidade de se obter o autovalor λ é dada por $|\langle\phi|\Psi\rangle|^2$, em que $|\phi\rangle$ é o autovetor de $\hat{Q}$ com autovalor λ.

5) Se uma medida de $\hat{Q}$ no estado $|\Psi\rangle$ tem resultado λ, o novo estado do sistema, imediatamente após a medida, passa a ser $|\phi\rangle$.

O fato de que autovalores de observáveis são sempre números reais está em harmonia com o terceiro postulado, pois nenhum experimento físico pode retornar como resultado um número complexo.

Como vimos, todo estado pode ser escrito como combinação linear dos autoestados de um observável, $|\psi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle$,

com coeficientes $c_n = \langle \phi_n | \psi \rangle$. O postulado 4 diz que em um processo de medida daquele observável, a probabilidade é que o resultado seja o autovalor associado a um certo $|\phi_n\rangle$ é o módulo quadrado do coeficiente correspondente, c_n. Ou seja, a probabilidade é proporcional à participação que $|\phi_n\rangle$ tem na combinação que produz $|\psi\rangle$. Já haviamos encontrado essa interpretação dos coeficientes no caso de medidas de energia.

O postulado 5 diz respeito à situação do sistema *depois* que a medida já foi realizada. Se o resultado da medida do observável $\hat{Q}$ foi o autovalor λ, então no instante de tempo imediatamente após a medida a quantidade física $\hat{Q}$ está precisamente determinada. Os estados quânticos que possuem valores precisamente determinados para um observável são seus autoestados, e só existe um autoestado compatível com o valor que foi medido.[6]

O processo em que um sistema inicialmente descrito pelo estado $|\psi\rangle$ passa instantaneamente a ser descrito por outro estado $|\phi\rangle$, como resultado de uma medição, é comumente denominado *colapso da função de onda*. Esse processo tem implicações muito interessantes quando consideramos sistemas que consistem em mais de um objeto quântico, como veremos mais adiante.

Os postulados que acabamos de abordar serão ilustrados no Capítulo 7, no contexto da discussão de sistemas de dois níveis.

5.4 – Exercícios

1. Seja o estado de superposição $|\psi(t)\rangle = \sum c_n e^{-iE_n t/\hbar} |\psi_n\rangle$, em que $|\psi_n\rangle$ é estado estacionário, $H|\psi_n\rangle \stackrel{n}{=} E_n |\psi_n\rangle$, mostre que $|\psi(t)\rangle$ satisfaz a equação de Schrödinger dependente do tempo, mas não é um estado estacionário.

---

6 Mais uma vez, ressaltamos que estamos ignorando degenerescências. Em um sistema concreto, pode haver mais de um autovetor com o mesmo autovalor.

3. Obtenha os operadores diferenciais correspondentes às componentes x e y do momentum angular. Verifique as relações de comutação

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

Capítulo 6

Aproximações

Vimos vários exemplos, no Capítulo anterior, de sistemas que podem ser resolvidos exatamente, ou seja, para os quais existem expressões simples e explícitas para os níveis de energia e para os estados estacionários. Esses sistemas são extremamente particulares e simplificados. Para problemas mais realistas e de maior importância, soluções exatas não estão disponíveis. Nesses casos, precisamos nos contentar com soluções aproximadas.

Neste Capítulo, apresentamos brevemente alguns tipos de soluções aproximadas.

6.1 – Soluções numéricas

6.1.1 – Solução de Equações Transcendentes

Como primeiro exemplo, vamos voltar ao problema já discutido anteriormente de um poço de potencial finito, para o qual a energia potencial é

$$V(x)=\begin{cases}0, \text{ se } |x|<L\\ V, \text{ se } |x|>L\end{cases} \quad (6.1)$$

Considere um estado estacionário de energia $E<V$. A onda plana $e^{ipx/\hbar}=e^{i\sqrt{2m(E-V(x))}x/\hbar}$ será oscilatória dentro do

poço e apresentará um decaimento exponencial nas regiões fora do poço. Seja $\hbar k = \sqrt{2mE}$ e $\hbar q = \sqrt{2m(V-E)}$ Escrevemos então

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{-q(x-L)}, & \text{se } x > L \\ Be^{ikx} + Ce^{-ikx}, & \text{se } |x| < L \\ De^{q(x+L)}, & \text{se } x < -L \end{cases} \quad (6.2)$$

A continuidade da função em $x = -L$ implica que $D = Be^{-ikL} + Ce^{ikL}$, enquanto a continuidade em $x = L$ implica que $A = Be^{ikL} + Ce^{-ikL}$. Por outro lado, a continuidade da derivada da função nesses dois pontos resulta em $Dq = ikBe^{-ikL} - ikCe^{ikL}$ e $Aq = ikCe^{-ikL} - ikBe^{ikL}$. Manipulando essas equações encontramos uma relação que deve ser satisfeita entre k e q:

$$\left(\frac{ik+q}{ik-q}\right)^2 = e^{-4ikL} \quad (6.3)$$

Essa equação não possui solução exata, ou seja, não podemos usá-la para encontrar uma fórmula simples para os valores quantizados da energia E. Em vez disso, o que podemos fazer é usar um computador para encontrar os valores permitidos de E de forma *numérica*, ou seja, fornecendo valores específicos para as grandezas m e V e utilizando algoritmos eficientes para procurar pelos valores possíveis de E.

6.1.2 – Diagonalização de matrizes

Outra situação em que podemos usar o computador para um cálculo numérico é na diagonalização de matrizes, ou seja, no cálculo de autovalores e autovetores. Como ilustração, vamos considerar um elétron em um poço infinito, que é atraído pela origem de acordo com o potencial $U(x) = kx^2$.

Sabemos que os estados estacionários do poço infinito são as funções $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(n\pi x / L)$. Se usarmos esse conjunto de funções como base para nosso espaço de funções de onda, a energia cinética $K = \frac{p^2}{2m}$, associada ao operador $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$, será representada por uma matriz diagonal, com

elementos que nada mais são que os níveis de energia do poço infinito, ou seja, $\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$. Por outro lado, a energia potencial será representada por uma matriz que não é diagonal, e cujos elementos são dados pelas integrais

$$\langle \psi_n | k\hat{X}^2 | \psi_m \rangle = \frac{8kL^2(-1)^{m+n}mn}{\pi^2\left(m^4 - 2m^2n^2 + n^4\right)} . \quad (6.4)$$

Os níveis de energia do sistema são os autovalores da matriz Hamiltoniana $H = K + U$. Vamos escolher, por simplicidade, $k = \hbar^2 q / 2mL^4$, onde q é um parâmetro adimensional, de modo que

$$\langle \psi_n | \hat{H} | \psi_m \rangle = \frac{\hbar^2}{2mL^2}\left(n^2\pi^2 + \frac{8q(-1)^{m+n}mn}{\pi^2\left(m^4 - 2m^2n^2 + n^4\right)} \right) . \quad (6.5)$$

Além disso, em nome da simplicidade, podemos escolher também $L = \hbar / \sqrt{2m}$ para desaparecer com o prefator.

Entretanto, a Hamiltoniana é uma matriz de tamanho infinito, e sua diagonalização levaria muito tempo! Felizmente, podemos obter aproximações para os níveis de energia mais baixos, ou seja, o estado fundamental e os primeiros estados excitados, diagonalizando uma versão truncada da matriz que tenha alguma dimensão finita, $N \times N$. Por exemplo, com N=3 o truncamento fornece

$$\hat{H} \approx \begin{pmatrix} \pi^2 & -\frac{16}{9}\frac{q}{\pi^2} & \frac{3}{8}\frac{q}{\pi^2} \\ \frac{16}{9}\frac{q}{\pi^2} & 4\pi^2 & -\frac{48}{25}\frac{q}{\pi^2} \\ \frac{3}{8}\frac{q}{\pi^2} & -\frac{48}{25}\frac{q}{\pi^2} & 9\pi^2 \end{pmatrix} \quad (6.6)$$

Para que essa aproximação seja boa, a dimensão N não pode ser muito pequena. Na prática, se queremos calcular os primeiros m níveis de energia, devemos ir aumentando o valor de N até que o valor do m-ésimo nível fique praticamente independente de N. A partir desse ponto, temos uma aproximação confiável.

6.2 – Teoria de perturbação

Outra situação importante em que normalmente não podemos resolver um problema exatamente é quando a energia contém a soma de duas contribuições de origens diferentes. Por exemplo, vimos como resolver o problema de um poço de potencial na seção 3.2.2. A energia potencial daquele poço pode ser escrita como

$$V(x)=\begin{cases}0, \text{ se } x\in(0,L)\\ \infty, \text{ se } x\notin(0,L)\end{cases} \quad (6.7)$$

Já vimos que a presença desse potencial pode ser levada em conta apenas impondo condições de cortorno: $\psi(0)=\psi(L)=0$.

Se o objeto que está preso dentro do poço tem carga elétrica e e está submetido a um campo elétrico $\mathcal{E}$, a energia total é $H=V(x)+e\mathcal{E}x$. A equação de Schrödinger independente do tempo será mais complicada neste caso,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+V(x)\psi+e\mathcal{E}x\psi=E\psi. \quad (6.8)$$

Para simplificá-la, vamos supor que x é medido em unidades de L e vamos definir as constantes adimensionais $\alpha=(2me\mathcal{E}/\hbar^2)$ e $\epsilon=2mE/\hbar^2$. Com isso, terminamos com

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2}+\alpha x\psi=\epsilon\psi \quad , \quad \psi(0)=\psi(1)=0 \quad (6.9)$$

Vamos começar impondo apenas que $\psi(0)=0$. A equação então admite como solução a função

$$\psi(x)=\frac{\mathrm{Ai}\left((\alpha x-\epsilon)/(-\alpha)^{2/3}\right)}{\mathrm{Ai}\left(-\epsilon/(-\alpha)^{2/3}\right)}-\frac{\mathrm{Bi}\left((\alpha x-\epsilon)/(-\alpha)^{2/3}\right)}{\mathrm{Bi}\left(-\epsilon/(-\alpha)^{2/3}\right)}, \quad (6.10)$$

em que as funções Ai e Bi são as *funções de* Airy. Mostramos na Figura 6.1 um gráfico de $|\psi(x)|^2$ para $\alpha=50$ e $\epsilon=100$. Note que essa função se anula em x=0 mas não em x=1, pois essa condição não foi imposta.

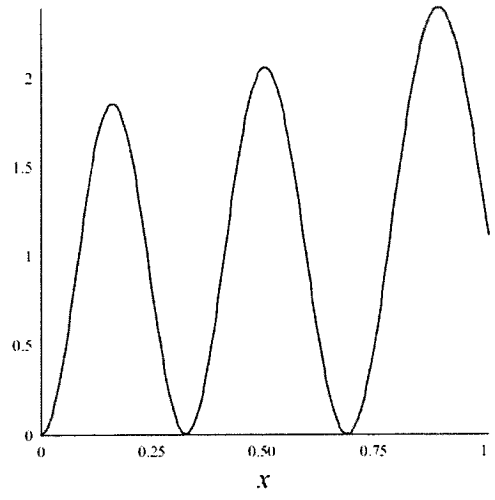


Figura 6.1 – Função de onda da Eq. (6.10) para $a = 50$ e $\epsilon = 100$.

Uma maneira de resolver o problema é utilizar um método numérico, como indicamos na seção anterior, para encontramos valores de E para os quais a função de onda se anula em x=1. Mostramos na Figura 6.2 um gráfico de $|\psi(x)|^2$ para $\alpha = 50$ e $\epsilon = 182$. Note que para esse valor de ϵ as duas condições de contorno são satisfeitas, ou seja, esse é um valor válido para a energia de um estado estacionário.

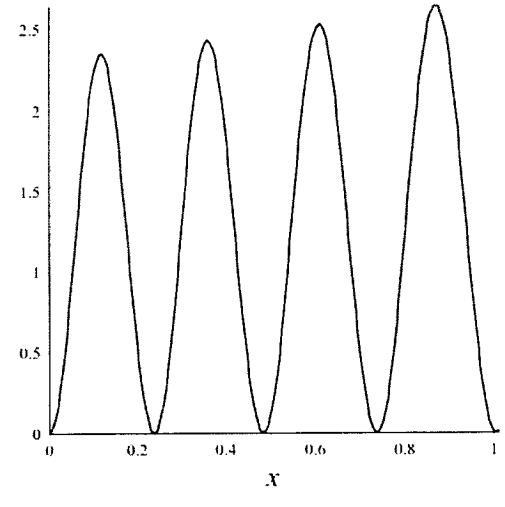


Figura 6.2 – Função de onda da Eq. (6.10) para $\alpha = 50$ e $\epsilon = 182$.

Esse método numérico é bastante eficiente se quisermos encontrar apenas alguns níveis, e ele funciona para qualquer valor do campo elétrico, ou seja, para qualquer valor de α. Outra maneira de abordar o problema é tentar encontrar soluções aproximadas, que sejam válidas em algum regime especial. Por exemplo, se o campo elétrico for muito fraco, ou seja, se α for bem pequeno. Nesse caso, podemos esperar que ele tenha pouca influência sobre o sistema, e que os níveis de energia sejam bem parecidos com os do poço infinito original.

Quando consideramos que uma componente da energia é muito menor do que as outras, estamos fazendo o que se chama de *teoria de perturbação*. Ou seja, estamos partindo de um problema que sabemos como resolver (no caso, o poço infinito) e o estamos perturbando com uma pequena alteração na energia (no caso, o campo elétrico).

A versão mais simples dessa teoria consiste em supor que a perturbação altera somente os níveis de energia e não os estados estacionários. Nesse caso, a correção que resulta para um nível de energia qualquer pode ser obtida simplesmente calculando o valor médio que a perturbação tem nesse nível. Ou seja, se os níveis do sistema original são E_n, com estados estacionários correspondentes $\psi_n(x)$, então os níveis de energia do sistema perturbado serão

$$\tilde{E}_n = E_n + \int |\psi_n(x)|^2 \, H_P(x) dx \ ,$$

onde $H_P(x)$ representa a energia da perturbação.

Para o sistema que estamos estudando, temos

$$\tilde{E}_n = \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2mL^2} + \frac{2}{L}\int_0^L sin^2(n\pi x / L)(e\mathcal{E}x) dx \ .$$

Calculando a integral, temos

$$\tilde{E}_n = \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2mL^2} + \frac{U}{2} \ ,$$

onde $U = e\mathcal{E}L$ é a diferença de potencial entre as duas pontas do poço. Em termos das variáveis adimensionais, temos $\tilde{\epsilon}_n = \epsilon_n + \alpha/2$. Vemos que a presença de um campo elétrico fraco simplesmente aumenta ligeiramente os níveis de energia, uniformemente.

Como teste dessa previsão, podemos aplicá-la ao estado que possui $n = 4$. Sua energia não perturbada é $\epsilon_4 = 16\pi^2$. Para $\alpha = 50$, nossa teoria de perturbação simples prevê o valor $\tilde{\epsilon}_4 = 16\pi^2 + 25 \approx 182{,}91$. Esse valor está muito próximo daquele que encontramos anteriormente (ver Figura 6.2).

A teoria de perturbação, apesar de ter validade limitada, fornece um entendimento do problema que não adviria tão facilmente do cálculo numérico. Discutimos aqui apenas sua versão mais simples. Podemos sofisticar a teoria para torná-la mais precisa. Para isso, é necessário levar em conta que a perturbação em geral altera não só os níveis de energia, mas também os estados estacionários.

Para estudo mais avançado, veja o verbete *Perturbation Theory* da Wikipedia, em particular, a seção em que se discute a teoria geral para a solução perturbativa a uma equação diferencial de primeira ordem. (Disponível em: <https://en.wikipedia.org/wiki/Perturbation_theory#Search_for_better_methods_for_quantum_mechanics>). A maioria dos livros didáticos de Mecânica quântica trata desse assunto.

6.3 – Método variacional

Outro método para encontrar resultados aproximados para problemas em mecânica quântica é o método variacional. A essência desse método reside no fato de que os estados estacionários satisfazem uma propriedade muito particular: eles minimizam a energia em relação a outras funções.

Imagine que $\frac{p^2}{2m}+V(x)$ seja a energia de um sistema e seja $\psi(x)$ um estado estacionário, ou seja, que satisfaz a equação $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n}{dx^2}+V(x)\psi_n=E_n\psi_n$ para algum valor E_n. Se definirmos o funcional

$$F[f]=\int\left[-\frac{\hbar^2}{2m}f^*\frac{d^2f}{dx^2}+V(x)|f|^2\right]dx\ ,$$

então é claro que $F[\psi_n]=E_n$. Acontece que qualquer função que seja parecida com $\psi_n(x)$, mas não exatamente igual, sempre vai dar origem a um valor maior do funcional: $F[f]\geq F[\psi_n]$ se $f(x)\approx\psi_n(x)$.

Baseados nesse fato, podemos estimar $\psi_n(x)$ da seguinte maneira: procurando funções que minimizem nosso funcional.

Vamos explicar usando nosso exemplo preferido, o poço infinito. Nós já sabemos quais são os estados estacionários desse sistema, mas vamos fingir por um momento que não sabemos. Sabemos apenas que eles devem se anular nas pontas e ser normalizados.

Nosso conhecimento inicial de mecânica quântica nos sugere, por exemplo, que o estado fundamental deve ser uma função bastante simples, com um único valor máximo. Uma aproximação razoável para esse tipo de função seria uma parábola. Para seguirmos essa intuição, podemos escrever $f=ax(L-x)$. A condição de normalização $\int_0^L f^2(x)dx=1$ requer que $a=\sqrt{30}/L^{5/2}$. Se calcularmos o valor funcional quando calculado para essa função, obtemos:

$$F[f]=\frac{5\hbar^2}{mL^2}\ .$$

Esse valor é maior do que a energia do verdadeiro estado fundamental, que sabemos ser igual a $\pi^2\hbar^2/2mL^2\approx 4.93\hbar^2/mL^2$, mas não está nada mal como aproximação.

Vamos agora tratar o primeiro estado excitado. Para simplificar as expressões, seja L=1. Sabemos que esse estado

posui um zero no intervalo (0,1). Podemos tentar escrever uma função cúbica do tipo $g = ax(1-x)(b-x)$. A constante a pode ser encontrada impondo novamente a condição de normalização. O resultado é um pouco complicado:

$$a^2 = \frac{210}{7b(b-1)+2}$$

Se calcularmos o funcional dessa função, obtemos uma função de b:

$$F[g] = \frac{\hbar^2 a^2 (5b^2 - 5b + 2)}{30m}$$

Como sabemos que o estado estacionário deve corresponder ao valor mínimo do funcional, podemos agora minimizar essa função em relação a b, impondo que $dF[g]/db = 0$ (sem esquecer que a depende de b). Essa conta dá um pouco de trabalho, mas resulta simplesmente em $b = 1/2$, ou seja, a função deve ter um zero exatamente no centro do intervalo (convidamos o leitor a comparar o gráfico de $g(x)$ com o estado estacionário exato). O valor do funcional nesse caso é $F[g]\big|_{b=1/2} = 21\hbar^2/m$, que está bastante próximo do valor correto, que é $2\pi^2\hbar^2/m \approx 19.74\hbar^2/m$.

A eficiência do método variacional consiste, portanto, em ser capaz de estimar funções que sejam boas aproximações para os estados estacionários. Uma vez feito isso, minimiza-se o funcional apropriado (relacionado à energia) em relação aos parâmetros que especificam as funções.

6.4 – Solução numérica exata da equação de Schrödinger

Com o advento dos modernos computadores, métodos numéricos de equações diferenciais começaram a ser usados intensivamente para a obtenção de resultados das soluções da equação de Schrödinger com a precisão desejada. Atualmente vários algoritmos estão disponíveis na web.

Eles empregam os métodos tradicionais de análise numérica para a solução de equações diferenciais lineares, como, no nosso caso, a de Schrödinger.

Acesse https://en.wikipedia.org/wiki/Numerical_methods_for_ordinary_differential_equations para a abordagem de vários métodos usados em Física.

Um dos métodos mais usados na solução da equação de Schrödinger é o método de Numerov. Uma aplicação pode ser encontrada no artigo "O método numérico de Numerov aplicado à equação de Schrödinger" de Francisco Caruso e Vitor Oguri, em Rev. Bras. Ensino Fís., Jun 2014, vol. 36, n. 2, p. 1-7 (Disponível em: <http://www.scielo.br/scielo.php?pid=S1806-11172014000200010&script=sci_arttext>).

6.5 – Exercícios

1. Considere um elétron em um poço infinito da largura à sua escolha, atraído pela origem de acordo com o potencial $U(x) = kx^2$. Suponha que k é um número pequeno e use teoria de perturbação para corrigir os níveis de energia.
2. Obtenha os primeiros níveis de energia da Hamiltoniana na equação 6.6 para diferentes dimensões de truncamento N, e analise a convergência deles.

Capítulo 7

Sistemas de dois níveis

7.1 – Spin do elétron

Existem características próprias para cada partícula elementar. Por exemplo, o elétron tem carga negativa e massa bem definida. Além disso, elétron, assim como outras partículas elementares, possui uma propriedade intrínseca chamada *spin*. O spin eletrônico pode assumir apenas dois valores diferentes, que tradicionalmente são chamados de *para baixo* e *para cima*. A diferença importante entre carga e spin é que todos os elétrons possuem sempre a mesma carga (negativa), enquanto que o spin de um elétron tanto pode ser observado para cima quanto para baixo. Na notação de Dirac, representamos o spin através dos estados $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$.

A origem das denominações "para baixo" e "para cima" está no experimento de Stern-Gerlach (Otto Stern ganhou o Prêmio Nobel de 1943). Nesse experimento, obriga-se um feixe de elétrons a passar por um campo magnético. A força magnética, $\vec{F} = q\vec{v} \times \vec{B}$, que tenderia a curvar a trajetória, pode ser compensada por um campo elétrico, de modo que classicamente as trajetórias sejam retilíneas. No entanto, nessa situação observa-se que o feixe eletrônico se separa

em duas componentes, uma que é levemente defletida para cima e outra que é levemente defletida para baixo.

Acesse http://en.wikipedia.org/wiki/Stern-Gerlach_experiment para mais detalhes sobre o experimento de Stern-Gerlach e veja, em particular, uma animação com elétrons e com imãs clássicos sobre o tema.

A interpretação desse experimento é a seguinte: os elétrons possuem momento magnético intrínseco, como se fossem pequenos imãs. Esse momento magnético interage com o campo magnético externo, causando a deflexão (lembre-se que polos magnéticos iguais se repelem). Um elétron será defletido para cima ou para baixo dependendo da orientação do seu momento magnético. É importante notar a natureza quântica desse sistema: o momento magnético do elétron sempre faz com que ele seja defletido ou para cima ou para baixo, sem meio termo. A situação seria diferente com imãs clássicos, cujo momento magnético poderia estar na horizontal. Podemos dizer que a componente vertical do momento magnético eletrônico, no experimento de Stern-Gerlach, é *quantizada*.

O momento magnético intrínseco do elétron é dado por $\vec{\mu} = \frac{ge}{2m}\vec{S}$, onde e e m são sua carga e sua massa, respectivamente, g é uma constante chamada fator giromagnético (praticamente igual a 2) e o vetor $\vec{S}$ é o spin, cujas componentes são os operadores $(\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$. O fator giromagnético é uma das quantidades mais precisamente medidas da natureza (precisão de mais de 12 casas depois da vírgula), e seu valor possui uma concordância extraordinária com a previsão teórica da mecânica quântica (concordância em 10 casas depois da vírgula).

O que resulta do experimento de Stern-Gerlach é a medição dos spins dos elétrons presentes em um feixe. Alguns terão spin para cima e outros terão spin para baixo.

Mas o que acontece se medirmos o spin de um único elétron? Se soubermos que o spin de um dado elétron está para cima, então podemos prever o resultado do experimento: ele será defletido para cima. Entretanto, assim como a posição de um elétron não é algo que pode ser estabelecido com certeza antes de uma medida, também não podemos saber seu spin antes de uma medida. Ou seja, é preciso descrever o spin de maneira probabilística e usar os postulados da mecânica quântica, que acabamos de apresentar.

Essa descrição é na realidade bem mais simples do que no caso da posição, já que só existem duas possibilidades. Qualquer que seja o "estado de spin" de um elétron, uma medida da componente vertical só pode resultar em um dentre dois resultados. Numericamente, esses resultados são $+\hbar/2$ e $-\hbar/2$. Qual desses possíveis valores será observado? Em geral, não é possível saber. Se o estado de spin for $a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle$, então uma medida de spin tem probabilidade $|a|^2$ de resultar em $+\hbar/2$ (spin pra cima) e probabilidade $|b|^2$ de resultar em $-\hbar/2$ (spin para baixo). As constantes a e b podem ser números complexos, enquanto que seus módulos quadrados são probabilidades. Caso a medida dê $+\hbar/2$, o estado de spin do elétron passa automaticamente a ser $|\uparrow\rangle$; analogamente, se a medida der $-\hbar/2$, o estado passa a ser $|\downarrow\rangle$.

Faça uma simulação do experimento de Stern-Gerlach em https://phet.colorado.edu/sims/stern-gerlach/stern-gerlach_pt_BR.html. A seguir acesse o laboratório virtual "Spin Labs" (www.physics.oregostate.edu/qmactivities) e realize as experiências propostas.

É possível criar um estado de spin do tipo $a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle$? Sim, basta usar dois experimentos de Stern-Gerlach em sequência. Imagine que realizamos um experimento de Stern-Gerlach, separando um feixe de elétrons em duas

componentes. Depois do experimento, sabemos com certeza qual o spin da componente que foi defletida para cima. Agora, dirigimos essa componente do feixe para um segundo aparato de Stern-Gerlach. Se o segundo aparato estiver alinhado com o primeiro, o resultado já é sabido de antemão (será defletido para cima novamente). Entretanto, se os dois aparatos estiverem desalinhados, a situação fica bem mais interessante.

Imaginemos dois Stern-Gerlach ortogonais, ou seja, um experimento projetado para medir o observável "componente vertical do spin", digamos $\hat{S}_z$, e outro projetado para medir o observável "componente horizontal do spin", digamos $\hat{S}_x$. Suponhamos que a primeira medida revela que o spin está para cima. Portanto, o estado passa a ser $|\uparrow\rangle$. Em seguida, vamos medir $\hat{S}_x$. Classicamente, esperaríamos que o resultado fosse zero: um vetor que aponta para cima não tem componente horizontal. Entretanto, no mundo quântico não é assim.

Nesse caso, precisamos escrever o estado anterior à medição como combinação linear dos autoestados do observável a ser medido. Acontece que o spin para cima é uma soma de spins para a esquerda e para a direita, $|\uparrow\rangle = (|\leftarrow\rangle + |\rightarrow\rangle)/\sqrt{2}$. Assim, a segunda medida tem igual probabilidade de indicar spin para a esquerda ou para a direita. Ao fazermos um grande número de medidas de $\hat{S}_x$ sobre o estado $|\uparrow\rangle$, teremos praticamente o mesmo número de ocorrências para cada resultado possível e o resultado médio será zero.

Para complicar ainda mais, vamos agora supor um terceiro processo de medida, realizado novamente na vertical. Se o segundo processo resultou em spin para a direita, sabemos que o estado passou a ser $|\rightarrow\rangle$. Ao chegar no terceiro aparato, esse estado precisa ser escrito como combinação dos estados "para cima" e "para baixo". Nesse caso, temos $|\rightarrow\rangle = (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)/\sqrt{2}$. Concluímos que a terceira medida tem iguais probabilidades de indicar $|\uparrow\rangle$ ou $|\downarrow\rangle$. Isso talvez

pareça contraintuitivo: sabíamos que o estado inicial era $|\uparrow\rangle$, e depois de algumas medidas ele pode acabar sendo $|\downarrow\rangle$? De fato, se medíssemos sempre na vertical, isso nunca aconteceria. É a medida intermediária, realizada em uma direção ortogonal, que produz esse efeito surpreendente.

Vamos supor a base dada pelos estados $\{|\uparrow\rangle,|\downarrow\rangle\}$. Nessa base, podemos escrever os estados como vetores, ou seja, podemos denotar os estados "para cima" e "para baixo" assim:

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \; |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (7.1)$$

e os estados "para direita" e "para esquerda" assim:

$$|\rightarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \; |\leftarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (7.2)$$

Os outros símbolos da notação de Dirac correspondem a vetores-linha:

$$\langle\uparrow| = (1 \quad 0), \; \langle\downarrow| = (0 \quad 1), \; \langle\rightarrow| = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 \quad 1), \; \langle\leftarrow| = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 \quad -1). \quad (7.3)$$

Sabemos que os valores $+\hbar/2$ e $-\hbar/2$ são autovalores da componente vertical do spin:

$$\hat{S}_z|\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle \;, \; \hat{S}_z|\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle \;. \quad (7.4)$$

Portanto, na base dos estados $\{|\uparrow\rangle,|\downarrow\rangle\}$, o observável $\hat{S}_z$ é representado pela matriz

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (7.5)$$

Por outro lado, as outras componentes do spin são representadas por

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ e } \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.6)$$

Quem são os autovalores e os autovetores de $\hat{S}_x$ e de $\hat{S}_y$? A equação de autovalores de $\hat{S}_x$ é $\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$.

Essa equação vetorial é equivalente às equações $\hbar a/2 = \lambda b$ e $\hbar b/2 = \lambda a$. Essas equações só possuem solução se $\lambda^2 = (\hbar/2)^2$, de modo que os autovalores são $+\hbar/2$ e $-\hbar/2$.

Esse resultado não deve nos surpreender. Como não existe nenhuma diferença fundamental entre a direção z e a direção x, é claro que os operadores de spin nessas direções deveriam possuir os mesmos autovalores. Ao autovalor $+\hbar/2$ corresponde o

autovetor normalizado $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$. Analogamente, ao autovalor $-\hbar/2$ corresponde o autovetor normalizado $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$.

Do mesmo modo que os operadores de posição e momento, essas matrizes não comutam. Suas relações de comutação são:

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z \ , \ [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x \ , \ [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y \ . \quad (7.7)$$

Por não comutarem, esses observáveis não podem ser determinados simultaneamente, ou seja, existe aqui também um *princípio da incerteza*. O estado $|\uparrow\rangle$, por exemplo, possui um valor de $\hat{S}_z$ bem definido, mas não possui um valor de $\hat{S}_x$ bem definido. Aliás, temos o valor médio

$$\langle\uparrow|\hat{S}_x|\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}(1 \quad 0)\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = 0 \ . \quad (7.8)$$

Além disso, quando medimos duas dessas grandezas, a ordem em que as medidas são feitas é importante; medidas realizadas em ordens diferentes podem levar a resultados diferentes, ainda que o estado inicial seja o mesmo.

7.1.1 – Spin em um campo magnético

Se o elétron estiver parado, ele não sentirá nenhuma força magnética do tipo $\vec{v}\times\vec{B}$, mas mesmo assim ele irá interagir com um campo magnético. Como vimos, o spin do elétron dá a ele um momento magnético, ou seja, o elétron é um pequeno imã. Imãs tendem a se orientar com um campo magnético externo. A Hamiltoniana que descreve essa tendência

de alinhamento é $H = -\vec{\mu}.\vec{B}$. Note que ela tem valor máximo quando o momento está antiparalelo ao campo, e valor mínimo quando o momento está paralelo ao campo.

Se o campo está na direção z, $\vec{B} = B\hat{k}$, temos $H = -\frac{ge}{2m}B\hat{S}_z$, ou seja, a Hamiltoniana é proporcional ao operador $\hat{S}_z$. Assim, os estados "para cima" e "para baixo" são autoestados. Um estado mais geral do tipo $a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle$ sofrerá uma evolução temporal do tipo

$$ae^{iE_+t/\hbar}|\uparrow\rangle + be^{iE_-t/\hbar}|\downarrow\rangle = e^{-igeBt/4m}\left(a|\uparrow\rangle + be^{-igeBt/2m}|\downarrow\rangle\right) \quad (7.9)$$

O estado evolui de forma periódica, com período $T = geB/2m$ que independe do estado inicial.

Essa evolução nada mais é que a versão quântica da chamada *precessão de Larmor*, um fenômeno bem conhecido em que um imã gira em torno de seu centro de massa de tal maneira que seu momento magnético precessiona em torno do campo magnético externo.

Verifique que se o estado inicial for "para a direita", $|\rightarrow\rangle$, teremos uma evolução que é simplesmente $\cos(\alpha t)|\rightarrow\rangle + \sin(\alpha t)|\leftarrow\rangle$, onde $\alpha = geB/4m$.

Vamos reobter esse resultado usando o formalismo da exponencial de matrizes. Como vimos na seção 6.2, a solução da equação de Schrödinger quando a Hamiltoniana não depende do tempo pode ser escrita simplesmente como $|\Psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\Psi(0)\rangle$. Se estivermos utilizando a base que consiste dos estados $\{|\rightarrow\rangle, |\leftarrow\rangle\}$, o operador $\hat{H}$ será a matriz

$$-i\hat{H}t/\hbar \rightarrow i\alpha t\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.10)$$

Para calcular a exponencial desse termo, vamos lembrar a série de Taylor da exponencial:

$$e^A = 1 + A + \frac{A^2}{2!} + \frac{A^3}{3!} + \cdots \quad (7.11)$$

Notando que

$$A = i\alpha t\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\ A^2 = (i\alpha t)^2\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},\ A^3 = (i\alpha t)^3\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\ \ldots \quad (7.12)$$

vemos que

$$e^A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + (i\alpha t)\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \frac{(i\alpha t)^2}{2!}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{(i\alpha t)^3}{3!}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \cdots \quad (7.13)$$

Colocando as matrizes em evidência, temos:

$$e^A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\left(1 + \frac{(i\alpha t)^2}{2!} + \frac{(i\alpha t)^4}{4!}\cdots\right) + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\left(1 + \frac{(i\alpha t)^3}{3!} + \frac{(i\alpha t)^5}{5!}\cdots\right) \quad (7.14)$$

Nesta equação, reconhecemos as séries das funções seno e cosseno, de modo que

$$e^{-i\hat{H}t/\hbar} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\cos(\alpha t) + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\sin(\alpha t) \quad (7.15)$$

Finalmente, concluímos que, de fato, $e^{-i\hat{H}t/\hbar}\,|{\rightarrow}\rangle = \cos(\alpha t)\,|{\rightarrow}\rangle + \sin(\alpha t)\,|{\leftarrow}\rangle$.

7.2 – Polarização do fóton

Elétrons são objetos quânticos elementares, que possuem massa. Estão entre os objetos quânticos mais fáceis de serem observados, pois possuem carga e se movem sob ação de campos elétricos, produzindo correntes. Existe uma outra classe de objetos quânticos elementares, associados à radiação eletromagnética, que são os *fótons*. Em contraste com os elétrons, os fótons não possuem nem carga e nem massa. Mas eles possuem uma propriedade análoga ao spin do elétron, que é a sua *polarização*.

No contexto do tratamento clássico da radiação eletromagnética, sabemos que uma onda pode ter polarização *linear*, como a luz que é refletida por uma superfície não metálica. A polarização linear da luz pode ser detectada facilmente por meio de um polarizador, como alguns filtros de câmeras fotográficas e alguns óculos escuros.

Se temos uma fonte de luz não polarizada e olhamos através de um polarizador, veremos apenas parte da luz, ficando a outra parte retida. Esse experimento é análogo ao experimento de Stern-Gerlach com um feixe de elétrons, em que parte do feixe desvia para cima, parte para baixo. Da mesma maneira, podemos incidir um único fóton sobre um polarizador e perguntar: será que ele vai passar ou vai ficar retido?

Esse problema deve ser formulado usando os postulados da mecânica quântica, como fizemos na seção anterior, mas com algumas diferenças de significado. O "estado de polarização" mais geral de um fóton pode ser escrito como $a|\updownarrow\rangle + b|\leftrightarrow\rangle$, ou seja, uma combinação linear de polarização "vertical" e "horizontal". Note que não faz sentido tentar discernir entre polarização "para cima" ou "para baixo"; não é o *sentido* da polarização que conta, mas a sua *direção* (lembre-se de que na radiação eletromagnética o campo elétrico oscila periodicamente, alternando seu sentido).

Se um fóton cujo estado de polarização é $a|\updownarrow\rangle + b|\leftrightarrow\rangle$ incide sobre um polarizador vertical, ele possui probabilidade $|a|^2$ de passar e $|b|^2 = 1 - |a|^2$ de ficar retido. Caso ele passe, seu estado de polarização passa a ser $|\updownarrow\rangle$. Analogamente, se ele incidir sobre um polarizador horizontal, terá probabilidade $|b|^2$ de passar e $|a|^2$ de ficar retido. Caso ele passe, seu estado de polarização passa a ser $|\leftrightarrow\rangle$.

Sabemos que existe também luz *circularmente* polarizada. Em uma onda plana circularmente polarizada, o campo elétrico gira em torno da direção de propagação. O sentido desse giro pode ser horário ou anti-horário. Um fóton circularmente polarizado tem, portanto, dois estados disponíveis, digamos $|\otimes\rangle$ e $|\odot\rangle$, além de suas possíveis combinações do tipo $a|\otimes\rangle + b|\odot\rangle$. Os estados da base circularmente polarizada são combinações lineares dos estados da base anterior, $|\otimes\rangle = (|\updownarrow\rangle + i|\leftrightarrow\rangle)/\sqrt{2}$ e $|\odot\rangle = (|\updownarrow\rangle - i|\leftrightarrow\rangle)/\sqrt{2}$. Assim, se um

fóton circularmente polarizado incide sobre um polarizador linear, ele tem sempre 50% de chance de passar.

7.3 – Interferômetro de Mach-Zehnder

Existe outra maneira bastante prática de criar estados de superposição quântica a partir de fótons. É a utilização de um semiespelho, um vidrinho que deixa passar metade da luz que incide sobre ele e reflete a outra metade. Quando um fóton chega ao semiespelho, ele pode ser transmitido ou refletido com 50% de probabilidade, independentemente de sua polarização.

Antes de continuar a leitura, se familiarize com o interferômetro de Mach-Zender se divertindo com a simulação em http://www.st-andrews.ac.uk/physics/quvis/index.html, ou uma mais simples voltada a estudantes de Ensino Médio desenvolvida por Rafael Pontes (UFRJ) em http://www.if.ufrj.br/~carlos/trablicen/raphael/imz/

Podemos definir $|0\rangle$ como sendo o estado quântico em que não há fóton depois do semiespelho, e $|1\rangle$ o estado quântico em que há exatamente um fóton depois do semiespelho. O estado mais geral desse sistema será então um estado de superposição do tipo $a|1\rangle + b|0\rangle$, com $|a|^2 + |b|^2 = 1$. A situação mencionada anteriormente, em que as probabilidade de transmissão e reflexão são as mesmas, corresponde a $a = b = 1/\sqrt{2}$.

Usando um semiespelho, podemos construir um aparato como o da figura. Temos uma fonte luminosa que produz um raio de luz (por exemplo, um apontador laser). Esse raio passa por um semiespelho e é dividido em dois. Esses dois raios são posteriormente medidos pelos detectores D_1 e D_2. Quando a fonte de luz é muito fraca, apenas um fóton de cada vez atravessa o aparato. Depois do semiespelho, seu estado

é $(|1\rangle+|0\rangle)/\sqrt{2}$. Os detectores provocam o colapso desse estado. Para um dado fóton, D_1 e D_2 têm ambos 50% de chance de clicar. Se enviarmos um número grande de fótons, então aproximadamente metade das vezes teremos um clique em D_1 e metade das vezes teremos um clique em D_2.

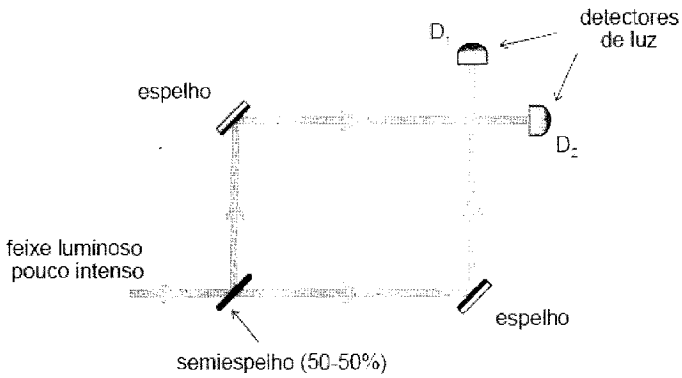


Figura 7.1 – Quando o feixe é dividido pelo semiespelho, os dois detectores podem clicar, de forma aleatória.

Para tornar a situação mais interessante, é possível utilizar um segundo semiespelho e misturar os dois feixes, como na outra figura. Esse aparato, conhecido como interferômetro de Mach-Zehnder, é uma técnica óptica muito popular devido à sua simplicidade, sendo utilizado nas mais variadas aplicações.

A pergunta agora é: qual será o resultado desse experimento? Se enviarmos um número grande de fótons, como estarão distribuídos os cliques entre D_1 e D_2?

A resposta a essa pergunta está no próprio nome do aparato, *interferômetro*. O que acontece é que temos aqui um fenômeno de interferência, análogo ao experimento de dupla fenda com elétrons que discutimos no Capítulo 2. A diferença é que os elétrons podiam ser detectados em qualquer ponto de um filme, ou seja, havia um contínuo de posições em que eles poderiam aparecer. Na situação discutida aqui, há

apenas duas posições possíveis para detecção de cada fóton, que são os detectores D_1 e D_2.

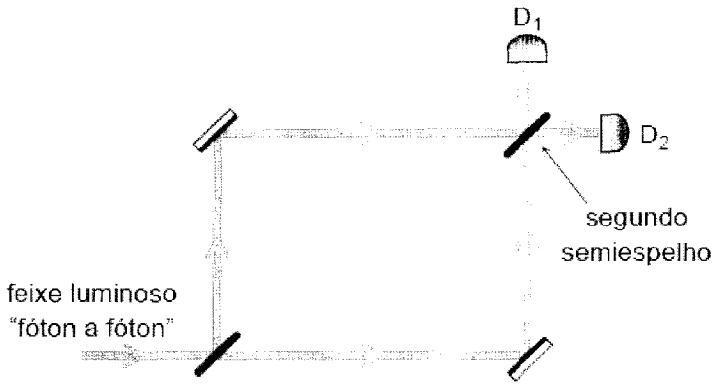


Figura 7.2 – Quando os feixes parciais são recombinados, existe interferência e apenas um dos detectores irá clicar.

Antes de respondermos à pergunta, é preciso notar um detalhe a respeito de espelhos. Um espelho é um pedaço de vidro com um dos lados coberto por uma superfície dielétrica. Pode-se incidir luz sobre ele de ambos os lados, ou seja, diretamente sobre o dielétrico ou passando primeiro por dentro do vidro. Se for um semiespelho, então metade da luz será refletida e metade transmitida nas duas situações. Entretando, há uma diferença importante: a luz que incide diretamente sobre o dielétrico sofre uma inversão de fase quando refletida.

Em termos de um fóton singular, a inversão de fase mencionada anteriormente significa o seguinte: quando o fóton incide sobre o semiespelho passando primeiro pelo vidro, o estado criado é de fato dado por $(|1\rangle+|0\rangle)/\sqrt{2}$. Entretanto, se o fóton incidir pelo outro lado, ou seja, diretamente sobre a cobertura dielétrica, então o estado criado será $(|1\rangle-|0\rangle)/\sqrt{2}$.

Estamos denotando por $|1\rangle$ o estado em que o fóton é transmitido pelo primeiro semiespelho e viaja por baixo. Digamos que o segundo semiespelho esteja posicionado de

modo que esse estado incide sobre ele passando pelo vidro. Nesse caso, será criado o estado $(|\uparrow\rangle+|\rightarrow\rangle)/\sqrt{2}$, em que $|\uparrow\rangle$ é o estado de um fóton viajando para cima e $|\rightarrow\rangle$ é o estado de um fóton viajando para a direita. Enquanto isso, o estado $|0\rangle$, em que o fóton é refletido pelo primeiro semiespelho e viaja por cima, incidirá no segundo semiespelho diretamente sobre a cobertura dielétrica e dará origem ao estado $(|\uparrow\rangle-|\rightarrow\rangle)/\sqrt{2}$.

Finalmente, podemos responder à nossa pergunta: o resultado do experimento no interferômetro de Mach-Zehnder é que nenhum fóton chegará em D_2. Ou seja, mesmo que enviemos um número grande de fótons, apenas D_1 irá clicar. Ou talvez o contrário. Depende da colocação do primeiro semiespelho.

Se o raio inicial incide no primeiro semiespelho passando pelo vidro, então é criado o estado $(|1\rangle+|0\rangle)/\sqrt{2}$. No segundo semiespelho, o estado $|1\rangle$ leva à criação do estado $(|\uparrow\rangle+|\rightarrow\rangle)/\sqrt{2}$, enquanto o estado $|0\rangle$ leva à criação do estado $(|\uparrow\rangle-|\rightarrow\rangle)/\sqrt{2}$, de modo que o estado final é

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{|\uparrow\rangle+|\rightarrow\rangle}{\sqrt{2}}\right)+\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{|\uparrow\rangle-|\rightarrow\rangle}{\sqrt{2}}\right)=|\uparrow\rangle$$

Nesse caso apenas D_1 irá clicar. Por outro lado, se o raio inicial incide no primeiro semiespelho diretamente sobre a cobertura dielétrica, então é criado o estado $(|1\rangle-|0\rangle)/\sqrt{2}$. Nesse caso, depois do segundo semiespelho, o estado final é

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{|\uparrow\rangle+|\rightarrow\rangle}{\sqrt{2}}\right)-\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{|\uparrow\rangle-|\rightarrow\rangle}{\sqrt{2}}\right)=|\rightarrow\rangle$$

Nesse caso apenas D_2 irá clicar.

A essência física do interferômetro de Mach-Zehnder está no fato de que pode existir interferência *construtiva* ou *destrutiva* entre os feixes recombinados. Na primeira possibilidade discutida anteriormente, a interferência é construtiva

na direção do detector D_1 e destrutiva na direção do detector D_2. Na segunda possibilidade, é o contrário.

É importante notar que o efeito fundamental está relacionado à fase da onda. Ou seja, o primeiro semiespelho sempre deixa passar metade da luz e reflete a outra metade. Mas dependendo de sua orientação (se a luz incide sobre ele passando pelo vidro ou não) há uma diferença de fase entre os feixes transmitido ou refletido. Essa diferença de fase está contida no sinal relativo entre os estados quânticos: $(|1\rangle+|0\rangle)/\sqrt{2}$ num caso e $(|1\rangle-|0\rangle)/\sqrt{2}$ no outro.

Talvez valha a pena enfatizar mais uma vez a estranheza do resultado. Na ausência do segundo semiespelho, os detectores D_1 e D_2 clicam em média o mesmo número de vezes na presença de um feixe de luz. Quando colocamos o segundo semiespelho, poderíamos esperar que os dois detectores continuassem clicando o mesmo número médio de vezes, afinal um semiespelho divide a intensidade da luz igualmente nas duas direções. Entretanto, isso não é verdade: a incidência sobre um dos detectores é suprimida pelo efeito de interferência destrutiva. Em vez de somarmos diretamente probabilidades, como fazemos classicamente, devemos somar primeiro as funções de onda e só depois tomar o módulo quadrado para encontrar as probabilidades.

7.4 – Férmions e bósons

Considere os estados $|\otimes\rangle$ e $|\odot\rangle$, que descrevem as possíveis polarizações circulares de um fóton. Nesses estados, o campo elétrico está girando, e a esse giro corresponde um momento angular. A rotação pode ser no sentido horário ou anti-horário, e o momento angular associado, de acordo com a tradicional regra da mão direita, pode apontar ou no sentido da propagação ou no sentido contrário. Assim, o momento angular do fóton, também chamado de spin do fóton, é quantizado e pode assumir apenas dois valores.

Entretanto, o spin do fóton não tem o mesmo valor do spin do elétron. O elétron tem spin $\pm\hbar/2$, enquanto que o fóton tem spin $\pm\hbar$. Dizemos que o elétron é um objeto de "spin meio", enquanto que o fóton é um objeto de "spin um" (em unidades de $\hbar$). Objetos quânticos cujo spin é um número semi-inteiro são chamados de *férmions* (em homenagem a Enrico Fermi), enquanto que objetos quânticos cujo spin é um número inteiro são chamados de *bósons* (em homenagem a Satyendra Bose).

Objetos quânticos associados à matéria, como elétrons, prótons, nêutrons, quarks etc. são sempre férmions. Todos os atualmente conhecidos têm spin meio, mas em princípio é possível que existam objetos com spin "três-meios", "cinco-meios" etc. Por outro lado, os bósons estão associados à radiação e à mediação de interações. O bóson mais comum é o fóton, mas existem também os glúons (responsáveis pela força forte) e dois outros chamados W e Z (responsáveis pela força fraca). Todos esses têm spin um. Em 2013, foi descoberto o chamado *bóson de Higgs*, que tem spin zero. Um objeto chamado *gráviton* foi previsto teoricamente e deve possuir spin dois, mas nunca foi observado.

O spin de um objeto quântico tem uma consequência muito importante para sua função de onda. Um conjunto de férmions idênticos deve sempre possuir uma função de onda total que seja *antissimétrica* em relação à permutação de duas variáveis, ou seja, se $|\psi(x_1,x_2)|^2$ é a densidade de probabilidade de que dois elétrons estejam simultaneamente nas posições x_1 e x_2, então necessariamente $\psi(x_1,x_2)=-\psi(x_2,x_1)$. Em particular, isso implica que $\psi(x,x)=0$ e, portanto, que dois elétrons, por exemplo, não podem nunca estar no mesmo estado quântico. Isso é conhecido como *princípio da exclusão de Pauli*.

O princípio da exclusão é fundamental para o entendimento da estrutura atômica, por exemplo. Para que um átomo com N prótons em seu núcleo seja eletricamente neutro, ele

deve possuir N elétrons. Mas esses N elétrons não podem estar todos no estado fundamental; eles devem necessariamente se distribuir pelos níveis de energia do átomo, dando origem assim às diferentes camadas eletrônicas.

Em contraste, um conjunto de bósons deve sempre possuir uma função de onda *simétrica*, ou seja, se $|\psi(x_1,x_2)|^2$ é a densidade de probabilidade de que dois bósons idênticos estejam simultaneamente nas posições x_1 e x_2, então necessariamente $\psi(x_1,x_2)=\psi(x_2,x_1)$. Assim, é possível que dois ou mais bósons ocupem o mesmo estado quântico. Na verdade, eles até favorecem esse comportamento. Se abaixarmos muito a temperatura de um sistema de bósons, todas eles vão ocupar o estado fundamental, ou seja, terão a mesma função de onda, e terminaremos com um sistema macroscópico que se comporta de maneira quântica. Esse novo estado da matéria é conhecido como *condensado de Bose-Einstein*.

Condensados de Bose-Einstein já foram obtidos experimentalmente usando átomos de spin inteiro como rubídio-87 ou sódio-23, resfriados a temperaturas da ordem de nanoKelvins. No artigo "Observation of interference between two Bose condensates", publicado em 1997 na revista *Science*, os autores discutem os resultados de um estudo com dois condensados de Bose-Einstein, cada um tendo cerca de 50mm de tamanho e contendo milhões de átomos de sódio. Podemos ver na figura a existência de efeitos de interferência quântica entre eles. O Prêmio Nobel de 2001 foi dado a Cornell, Wieman e Ketterle pela produção de condensados de Bose-Einstein.

7.5 – Exercícios

1. Obtenha a representação matricial dos operadores $\hat{S}_x$ e $\hat{S}_y$ na base dos autoestados do operador $\hat{S}_z$ (equação 7.6).

2. Calcule as relações de comutação dessas matrizes e verifique a equação 7.7
3. Mostre que o operador $\hat{S}^2 = \hat{S}_x^{\,2} + \hat{S}_y^{\,2} + \hat{S}_z^{\,2}$ é proporcional à identidade.

Capítulo 8

Informação Quântica

8.1 – Introdução

A partir das últimas décadas do século XX, os aspectos mais intrigantes da mecânica quântica começaram a ser explorados experimentalmente de forma mais direta. Ao mesmo tempo, a visão que a comunidade dos cientistas tinha desses aspectos também foi mudando.

O emaranhamento quântico, por exemplo, que parecia completamente absurdo para Einstein, passou a ser visto não só como um enigma a ser decifrado, mas também como uma *ferramenta* a ser utilizada, ou um *recurso* a ser explorado para o desenvolvimento de novas tecnologias em processos de computação e criptografia, por exemplo.

Também a questão da transição do mundo quântico para o mundo clássico, que foi ilustrada de forma dramática pelo próprio Schrödinger, tem sido gradualmente elucidada, principalmente depois do desenvolvimento da teoria da decoerência.

Neste último Capítulo, apresentamos, de forma bastante breve e introdutória, uma introdução desses temas

mais contemporâneos. Ao final, discutimos também algumas das diferentes interpretações da mecânica quântica que foram desenvolvidas ao longo do tempo.

8.2 – Matriz Densidade

Até agora fizemos a suposição implícita de que sempre sabemos qual é o estado quântico do sistema que temos em mãos. Ou seja, ainda que não soubéssemos qual seria o resultado de uma medida física qualquer, sabíamos pelo menos prever com precisão as probabilidades dos possíveis resultados, com base no nosso conhecimento de $|\Psi\rangle$.

Será possível elaborar a teoria de modo a acomodar uma possível ignorância a respeito do próprio $|\Psi\rangle$? Se eu não tiver certeza se o estado do meu objeto quântico é $|\Psi_1\rangle$ ou $|\Psi_2\rangle$, o que devo fazer?

Alguém poderia sugerir o seguinte: "se você acha que há 20% de chance de o estado ser $|\Psi_1\rangle$ e 80% de chance de ele ser $|\Psi_2\rangle$, então use o estado $\sqrt{0.2}\,|\Psi_1\rangle+\sqrt{0.8}\,|\Psi_2\rangle$." Essa opção não é satisfatória, pois ao fazer isso estaríamos associando ao sistema um estado quântico bem definido, que não é nem $|\Psi_1\rangle$ e nem $|\Psi_2\rangle$. O que queremos é uma descrição em que o estado tem 20% de chance de ser exatamente $|\Psi_1\rangle$ e 80% de chance de ser exatamente $|\Psi_2\rangle$.

Para responder a essa pergunta, vamos introduzir o conceito de *matriz densidade*: dado um estado $|\Psi\rangle$, a matriz densidade associada a ele é $\rho=|\Psi\rangle\langle\Psi|$. A matriz densidade é um operador, que atua sobre estados produzindo novos estados. A ação de ρ sobre um estado qualquer $|\Phi\rangle$ é da forma

$$\rho\,|\Phi\rangle=|\Psi\rangle\langle\Psi|\Phi\rangle=\langle\Psi|\Phi\rangle\,|\Psi\rangle\,. \quad (8.1)$$

Em termos dessa matriz, podemos escrever o módulo do produto escalar entre dois vetores como sendo

$$|\langle\Psi|\Phi\rangle|^2=\langle\Phi|\,\rho\,|\Phi\rangle\,. \quad (8.2)$$

Digamos que temos uma base para o espaço de estados do sistema que é o conjunto dos estados $|\phi_n\rangle$ com $n=1,2,...$ Se esse conjunto de estados forma uma base ortonormal, então deve satisfazer as condições de ortonormalidade, $\langle\phi_m|\phi_n\rangle=\delta_{nm}$, e de completeza, $\sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = 1$. Nessa base, o traço de um operador A é, por definição, a soma dos valores médios, ou seja,

$$\mathrm{Tr}A = \sum_n \langle\phi_n|A|\phi_n\rangle \quad (8.3)$$

O valor esperado de um observável está associado a um determinado traço, por meio da relação $\langle\Psi|A|\Psi\rangle = \mathrm{Tr}\left[|\Psi\rangle\langle\Psi|A\right]$. Esse resultado pode ser facilmente demonstrado, uma vez que

$$\mathrm{Tr}\left[|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|A\right] = \sum_m \langle\Psi_m|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|A|\Psi_m\rangle = \sum_m \langle\Psi_n|A|\Psi_m\rangle\langle\Psi_m|\Psi_n\rangle = \langle\Psi_n|A|\Psi_n\rangle$$

De forma geral, temos a igualdade $\langle\Psi|A|\Psi\rangle = \mathrm{Tr}[\rho A]$, onde ρ é a matriz densidade do estado $|\Psi\rangle$. Assim, o valor médio de um observável em um estado pode ser obtido calculando um traço que envolve a matriz densidade do estado. Dessa forma, é possível escrever toda a mecânica quântica em termos de matrizes densidade em vez de utilizar estados. À primeira vista, não ganhamos nada em trocar uma coisa pela outra. Na verdade, ganhamos muito, pois agora podemos tratar situações em que não sabemos com certeza qual é o estado.

Quando nosso sistema tem 20% de chance de estar no estado $|\Psi_1\rangle$ e 80% de chance de estar no estado $|\Psi_2\rangle$, não podemos atribuir a ele nenhum estado definido. Em vez disso, o que fazemos é dizer que ele é descrito pela matriz densidade $\rho = 0.2|\Psi_1\rangle\langle\Psi_1| + 0.8|\Psi_2\rangle\langle\Psi_2|$. Assim, o valor médio de um observável A será dado por $\mathrm{Tr}[\rho A] = 0.2\langle\Psi_1|A|\Psi_1\rangle + 0.8\langle\Psi_2|A|\Psi_2\rangle$.

É fácil obter a matriz densidade associada ao estado $\sqrt{0.2}|\Psi_1\rangle + \sqrt{0.8}|\Psi_2\rangle$. Cheque o resultado: $0.2|\Psi_1\rangle\langle\Psi_1| + 0.8|\Psi_2\rangle\langle\Psi_2| + \sqrt{0.16}|\Psi_1\rangle\langle\Psi_2| + \sqrt{0.16}|\Psi_2\rangle\langle\Psi_1|$. Observe que ela é diferente da matriz escrita no parágrafo anterior

e que possui termos cruzados, resultantes de interferência entre $|\Psi_1\rangle$ e $|\Psi_2\rangle$.

8.3 – Emaranhamento Quântico

Quando um sistema possui mais de um objeto quântico, é preciso especificar o estado de todos eles. Vamos considerar, por simplicidade, o caso de dois objetos, digamos dois elétrons. Simplificando ao máximo, vamos levar em conta apenas os spins. Nessa situação, é fácil ver que há quatro estados essencialmente diferentes: $|\uparrow\uparrow\rangle$, $|\uparrow\downarrow\rangle$, $|\downarrow\uparrow\rangle$, $|\downarrow\downarrow\rangle$. Cada flecha especifica o estado do spin de um dos objetos. Esses estados satisfazem as equações de autovalor

$$S_z^1|\uparrow\updownarrow\rangle = \frac{\hbar}{2}|\uparrow\updownarrow\rangle\ ,\ S_z^2|\updownarrow\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}|\updownarrow\uparrow\rangle\ ,\ S_z^1|\downarrow\updownarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\downarrow\updownarrow\rangle\ ,\ S_z^2|\updownarrow\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\updownarrow\downarrow\rangle\ , \quad (8.4)$$

onde S_z^1 e S_z^2 denotam os operadores de spin na direção z para o primeiro e o segundo spin, respectivamente. O símbolo $\updownarrow$ pode ser substituído tanto por $\uparrow$ quanto por $\downarrow$. Vemos que cada operador age sobre o seu spin, independentemente do valor do outro spin.

O estado mais geral desse sistema será uma combinação qualquer dos estados básicos,

$$|\Psi\rangle = a|\uparrow\uparrow\rangle + b|\uparrow\downarrow\rangle + c|\downarrow\uparrow\rangle + d|\downarrow\downarrow\rangle\ . \quad (8.5)$$

É interessante notar que um estado da forma $|\Psi\rangle = a|\uparrow\uparrow\rangle + b|\uparrow\downarrow\rangle$ pode ser fatorado, ou seja, podemos escrevê-lo como $|\Psi\rangle = |\uparrow\rangle(a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle)$. Assim, o primeiro elétron está com o spin para cima, enquanto o segundo está em um estado de superposição de spin para cima com spin para baixo.

Por outro lado, um estado como $|\Psi\rangle = a|\uparrow\downarrow\rangle + b|\downarrow\uparrow\rangle$ não pode ser fatorado. Ou seja, nesse caso nenhum dos dois elétrons tem estado de spin bem definido. O sistema está em uma configuração na qual existe uma probabilidade $|a|^2$

de que o primeiro elétron tenha spin para cima e o segundo tenha spin para baixo, e uma probabilidade $|b|^2$ de que o primeiro elétron tenha spin para baixo enquanto o segundo tenha spin para cima.

Os dois elétrons do exemplo estão *correlacionados*. O estado de um deles depende do estado do outro. Isso é chamado de *emaranhamento quântico*. É interessante observar que o sistema como um todo possui um estado bem definido, mas os spins individuais não possuem. Nesse contexto introduzimos as matrizes densidade reduzidas. A matriz densidade reduzida ρ_1 é obtida da matriz densidade total somando os valores médios sobre todos os estados do segundo spin, e vice-versa. Matematicamente, escrevemos

$$\rho_1 = \mathrm{Tr}_2 \rho_T \text{ e } \rho_2 = \mathrm{Tr}_1 \rho_T . \quad (8.6)$$

Por exemplo, no caso do estado $|\Psi\rangle = a|\uparrow\uparrow\rangle + b|\uparrow\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle_1 (a|\uparrow\rangle_2 + b|\downarrow\rangle_2)$, a matriz densidade total é dada por $\rho = |\uparrow\rangle_1\langle\uparrow|_1 (a|\uparrow\rangle_2 + b|\downarrow\rangle_2)(a\langle\uparrow|_2 + b\langle\downarrow|_2)$. O traço parcial sobre o spin 2 fornece a matriz densidade reduzida do spin 1:

Verifique que o traço parcial sobre o spin 1 fornece a seguinte matriz densidade reduzida do spin 2: $\rho_2 = \langle\uparrow|_1 \rho |\uparrow\rangle_1 + \langle\downarrow|_1 \rho |\downarrow\rangle_1 = (a|\uparrow\rangle_2 + b|\downarrow\rangle_2)(a\langle\uparrow|_2 + b\langle\downarrow|_2)$.

$$\rho_1 = \langle\uparrow|_2 \rho |\uparrow\rangle_2 + \langle\downarrow|_2 \rho |\downarrow\rangle_2 = |\uparrow\rangle_1\langle\uparrow|_1 \quad (8.7)$$

Essas matrizes reduzidas estão apenas nos dizendo aquilo que já sabíamos: o estado do primeiro spin é para cima, enquanto o segundo está em um estado de superposição de spin para cima com spin para baixo.

Suponha o estado $|\Psi\rangle = a|\uparrow\downarrow\rangle + b|\downarrow\uparrow\rangle$. As matrizes densidade reduzidas podem ser escritas como $\rho_1 = |a|^2|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |b|^2|\downarrow\rangle\langle\downarrow|$ e $\rho_2 = |a|^2|\downarrow\rangle\langle\downarrow| + |b|^2|\uparrow\rangle\langle\uparrow|$. Nesse exemplo os elétrons estão na situação discutida na seção

anterior, ou seja, não possuem estado quântico bem definido. Precisamos descrevê-los de forma estatística, dizendo que têm certas probabilidades de estarem nesse ou naquele estado. Isso vale para todos os chamados estados de Bell (em homenagem a John Bell, pioneiro no estudo das verificações experimentais das propriedades estranhas da mecânica quântica). São eles:

$$|\phi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle), \quad |\phi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle), \quad (8.8)$$

$$|\psi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), \quad |\psi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (8.9)$$

É interessante considerar o efeito que uma medição do spin de um dos elétrons tem sobre esse sistema. Vamos supor novamente que o estado total seja $|\Psi\rangle = a|\uparrow\downarrow\rangle + b|\downarrow\uparrow\rangle$ e vamos tornar a situação mais curiosa supondo que os elétrons estão separados por uma grande distância: o elétron 1 está no laboratório L1 e o elétron 2 está no laboratório L2. A princípio, uma medida do spin do elétron 2, realizada em L2, tem probabilidade $|a|^2$ de obter o resultado "para baixo" e $|b|^2$ de obter o resultado "para cima". Entretanto, suponha que decidimos medir primeiro o spin do elétron 1. Se essa medida, realizada em L1, resultar "para cima", então o spin do elétron 2, que está lá longe em L2, passa automaticamente a ser "para baixo". A experiência de medida do spin do elétron 2, que era um processo aleatório em L2, passa a ser um processo determinístico.

A conclusão do parágrafo anterior merece um parágrafo novo: medidas sobre o elétron 1, realizadas em L1, influenciam decisivamente e instantaneamente os possíveis resultados de medidas sobre o elétron 2, realizadas em L2. Essa característica extremamente peculiar da mecânica quântica tem intrigado cientistas por décadas. Einstein achava que devia haver algo errado com a mecânica quântica, já que essa previsão lhe parecia absurda. Devido a um artigo que ele

escreveu junto com Podolsky e Rosen, esse fenômeno também é conhecido como *paradoxo* EPR.

8.4 – Decoerência

Depois da discussão anterior, talvez fiquem as perguntas: por que é tão difícil preparar estados quânticos que sejam uma superposição? Por que não vemos efeitos de interferência cotidianamente? Não estamos rodeados de objetos quânticos o tempo todo? Afinal, por que não vemos as coisas ao nosso redor em dois lugares ao mesmo tempo?

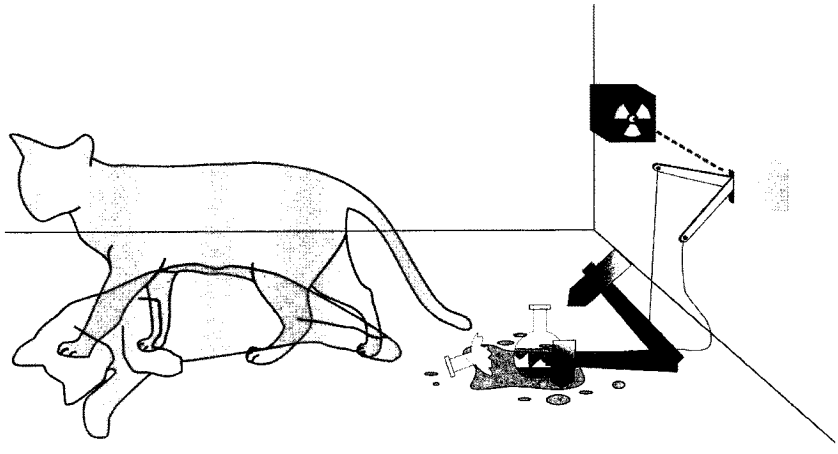


Figura 8-1 – Ilustração da experiência de pensamento de Schrödinger. Fonte: Wikipedia.

O próprio Schrödinger formulou essa questão de modo dramático. Suponha que um gato está trancado dentro de uma caixa. Dentro da caixa está também um frasco de veneno ligado a um átomo radioativo. Ao longo de uma hora, o átomo pode decair e liberar o veneno, matando o gato, mas também pode ser que isso não aconteça. Se as duas possibilidades tiverem igual probabilidade de ocorrência, a função de onda final do sistema "gato+átomo" será descrita pela combinação linear

$$(|\text{vivo, não decaiu}\rangle + |\text{morto, decaiu}\rangle)/\sqrt{2} \ . \quad (8.10)$$

Teríamos então um gato que estaria em um estado de superposição: morto e vivo ao mesmo tempo. Schrödinger argumenta que tal previsão é ridícula. Estados de superposição nunca são observados no mundo macroscópico.

A explicação mais aceita para essa diferença entre sistemas quânticos e clássicos enfatiza a questão do *isolamento*. Um sistema quântico simples, de um único átomo ou um único fóton, pode em algumas situações ser considerado perfeitamente isolado, isto é, isento de interações com outros objetos. Já um sistema clássico *nunca* está perfeitamente isolado. Sempre haverá contato com o ambiente, como a atmosfera, ou luz incidindo sobre ele, ou ondas de rádio, entre outros inúmeros efeitos. A interação permanente com o ambiente induz o que se chama *decoerência* no sistema quântico.

Vejamos de forma simples como isso funciona. Digamos que temos um sistema quântico cujos estados são $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$. Esse sistema pode ser, por exemplo, o átomo radioativo do experimento mental de Schrödinger, com $|\uparrow\rangle$ representando a situação em que o átomo não decaiu e $|\downarrow\rangle$ representando a situação em que o átomo decaiu. Esse sistema também pode ser um spin eletrônico que está passando por um experimento de Stern-Gerlach.

Nosso sistema de dois níveis interage com um objeto macroscópico, um aparelho de medida que vai nos dizer em que estado ele está. Esse medidor pode ser, por exemplo, um gato. O gato vai nos dizer o estado do átomo radioativo permanecendo vivo em um caso e morrendo no outro caso. Esse objeto macroscópico também pode ser um anteparo luminescente, que vai apresentar um brilho mais acima se o elétron tinha spin para cima ou um brilho mais abaixo se o elétron tinha spin para baixo. Assim, depois de o sistema quântico interagir por algum tempo, bastante curto, com o medidor, o sistema composto pelos dois será descrito pelo estado quântico $|\uparrow, A\rangle + |\downarrow, B\rangle$. Aqui, o valor "A" representa "gato

vivo" ou "brilho acima", enquanto que o valor "B" representa "gato morto" ou "brilho abaixo".

Até aqui, não podemos dizer que um experimento de medida tenha sido realizado. Ainda não sabemos se o estado do sistema quântico é $|\uparrow\rangle$ ou $|\downarrow\rangle$. Agora, vamos supor que o medidor está em contato com o ambiente. Digamos que inicialmente o ambiente está no estado $|\phi_0\rangle$, de modo que o estado total é $(|\uparrow,A\rangle+|\downarrow,B\rangle)|\phi_0\rangle$. Digamos também que a evolução conjunta é tal que depois de decorrido algum tempo o estado total será $|\uparrow,A\rangle|\phi_A\rangle+|\downarrow,B\rangle|\phi_B\rangle$. Ou seja, a situação do medidor influencia de alguma maneira o ambiente. Por exemplo, um gato vivo é mais quente que um gato morto.

Vemos que o emaranhamento quântico inicialmente presente no sistema quântico foi transferido a um objeto macroscópico e daí ao ambiente. É razoável supor que o ambiente possui muitos graus de liberdade, muitos átomos, muitos fótons etc. Como consequência, qualquer mudança sofrida pelo ambiente produz estados ortogonais, $\langle\phi_A|\phi_B\rangle=0$. Sabendo disso, podemos calcular a matriz densidade reduzida de "sistema quântico + medidor", ou seja, "átomo + gato". Essa matriz reduzida é obtida fazendo um traço sobre os estados do ambiente. O resultado é

$$|\uparrow,A\rangle\langle\uparrow,A|+|\downarrow,B\rangle\langle\downarrow,B|. \quad (8.11)$$

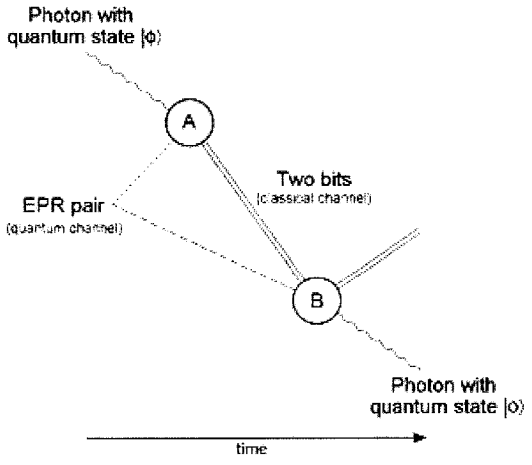
O resultado indica que "sistema quântico + medidor" não possui um estado quântico único. Em vez disso, tem iguais probabilidades de estar nas situações $|\uparrow,A\rangle$ ou $|\downarrow,B\rangle$. Em outras palavras, o medidor não está em uma superposição quântica. Em vez disso, o encontraremos em uma de duas possibilidades, que correspondem justamente à medição que ele realizou sobre o sistema quântico. Assim, temos 50% de chance de que o resultado da medida seja $|\uparrow\rangle$, resultado esse indicado pelo fato de que o medidor está em $|A\rangle$, e 50% de chance de que o resultado da medida seja $|\downarrow\rangle$,

resultado esse indicado pelo fato de que o medidor está em $|B\rangle$.

Resumindo, a possibilidade de superposições do medidor envolvendo $|A\rangle$ e $|B\rangle$ foi suprimida pela presença do ambiente. Objetos quânticos só podem ser preparados em estados de superposição quando estão relativamente bem isolados do ambiente. Como esse isolamento nunca é perfeito, sempre existe esse efeito de decoerência para destruir estados de superposição. A decoerência é um dos principais inimigos que devem ser enfrentados para que se possa produzir e utilizar estados quânticos emaranhados na prática.

Existem vários vídeos sobre a experiência de pensamento do Gato de Schrödinger no YouTube. Assista a "O gato de Schrödinger: Uma experiência imaginária de mecânica quântica", por Chad Orzel (https://www.youtube.com/watch?v=UjaAxUO6-Uw). Os apreciadores do Minecraft gostarão de ver uma experiência caseira com câmara de ionização em *Real Life Quantum Physics and Minecraft – Testing Schrödinger's Cat* (https://www.youtube.com/watch?v=FPKdJpSIUnk).

8.5 – Teleporte quântico



O emaranhamento é atualmente visto como um recurso a ser explorado. Esse fenômeno quântico é a base dos recentes esforços para o desenvolvimento da *computação quântica*. Falaremos mais sobre isso a seguir. Uma primeira aplicação do emaranhamento é na criação de protocolos de teleporte quântico, ou seja, procedimentos para transferir informação de um ponto a outro instantaneamente.

A ideia é a seguinte: suponhamos um sujeito, André, que possui um objeto quântico em um certo estado. Digamos que ele tem um sistema de dois níveis, por exemplo $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$, e que seu estado é dado por $a|\uparrow\rangle+b|\downarrow\rangle$. O próprio André não tem como saber qual é o estado que possui, pois não pode fazer qualquer medida sobre seu sistema. Ele só tem um exemplar, e a realização de uma medida necessariamente destruiria o estado, como sabemos.

Assim, André deseja enviar o estado $|\Psi\rangle$, desconhecido, para um outro objeto quântico, que está com sua colega, Bianca. Para poderem realizar esse teleporte, André e Bianca precisam primeiro gerar um par emaranhado que seja compartilhado. Assim, eles produzem o estado de dois spins $|\uparrow\rangle_A|\downarrow\rangle_B+|\downarrow\rangle_A|\uparrow\rangle_B$, e arranjam para que o spin A fique com André enquanto que o spin B fique com Bianca.

O estado total do sistema de André é $|\Psi\rangle=(|\uparrow\rangle_A|\downarrow\rangle_B+|\downarrow\rangle_A|\uparrow\rangle_B)(a|\uparrow\rangle_C+b|\downarrow\rangle_C)$, onde usamos a letra C para distinguir o estado original daquele que foi preparado e compartilhado. Acontece que esse estado também pode ser escrito usando os estados de Bell referentes ao par de spins AC.

Mostre, por manipulação direta, que o estado $|\Psi\rangle$ anterior também pode ser escrito como

$$\frac{1}{2}(|\phi_+\rangle_{AC}(a|\uparrow\rangle_B+b|\downarrow\rangle_B)+|\phi_-\rangle_{AC}(a|\uparrow\rangle_B-b|\downarrow\rangle_B)+|\psi_+\rangle_{AC}(b|\uparrow\rangle_B+a|\downarrow\rangle_B)+|\psi_-\rangle_{AC}(b|\uparrow\rangle_B-a|\downarrow\rangle_B)$$

(8.12)

Se André fizer um experimento de medida sobre os spins AC, que discrimina os estados de Bell, obterá uma dentre quatro possibilidades, que são $|\phi_+\rangle$, $|\phi_-\rangle$, $|\psi_+\rangle$ e $|\psi_-\rangle$. O importante é que depois dessa medida sua amiga Bianca terá em mãos um dentre quatro estados, dependendo do resultado obtido por André. Os estados que podem resultar para o sistema de Bianca são, respectivamente,

$$a|\uparrow\rangle_B + b|\downarrow\rangle_B,\ a|\uparrow\rangle_B - b|\downarrow\rangle_B,\ b|\uparrow\rangle_B + a|\downarrow\rangle_B,\ b|\uparrow\rangle_B - a|\downarrow\rangle_B. \quad (8.13)$$

Observe que agora Bianca tem em mãos um estado quântico especificado pelos mesmos parâmetros que especificavam o estado original de André. Assim, a informação contida no estado quântico foi transferida de um ponto a outro, instantaneamente, por meio de uma medida efetuada sobre um sistema quântico emaranhado.

Depois que André fizer sua medida, ele pega o telefone e informa Bianca qual foi o resultado, ou seja, se ele obteve $|\phi_+\rangle$, $|\phi_-\rangle$, $|\psi_+\rangle$ ou $|\psi_-\rangle$. No primeiro caso, ela sabe que seu estado é justamente o estado que gostaria. Nos outros casos, ela precisa apenas realizar alguma manipulação simples para que o estado fique como deveria ser. Repare que o processo de teleporte só termina depois do telefonema, ou seja, o processo completo não é mais rápido que uma comunicação clássica.

8.6 – Computação Quântica

Nos últimos anos tem se falado muito em *informação quântica*. A diferença entre esse tipo de informação e a informação clássica, tradicional, é que os *bits* da informação clássica assumem apenas dois valores. Antigamente, programavam-se computadores usando cartões nos quais os bits de informação eram representados por presença/ausência de furos. Computadores mais modernos utilizam presença/

ausência de voltagem ou corrente elétrica. Enfim, um bit de informação clássica é uma variável que pode ser 0 ou 1.

Em contraste, um sistema quântico de dois níveis pode ser colocado em qualquer superposição do tipo $a|0\rangle + b|1\rangle$, o que é normalmente chamado de *quantum bit* ou *qubit*. Um qubit contém, portanto, muito mais informação do que um bit, já que é parametrizado por um contínuo de números complexos. Entretanto, é importante ressalvar que se for realizada uma medida sobre o qubit, seu estado sofre colapso e a informação sobre os parâmetros a e b é perdida. Essa é uma diferença importante entre qubits e bits: medidas diretas realizadas sobre qubits destroem a informação.

Existem diversas realizações físicas possíveis para qubits. Pode-se usar o spin do elétron, a polarização do fóton, o número de fótons em uma cavidade, o número de elétrons, spin de um núcleo atômico, os estados excitado e fundamental de um átomo, o sentido da corrente em um supercondutor etc. Todas as diferentes realizações físicas têm suas vantagens e desvantagens. Algumas permitem maior resistência à decoerência, outras permitem transmissão mais rápida de informação, outras ainda permitem controle mais delicado dos estados. Todas estão sendo exploradas.

Acredita-se que o uso de qubits em lugar de bits permitirá a construção de *computadores quânticos*, que funcionariam muito mais rápido do que computadores clássicos, ao menos para algumas funções específicas. Como mencionado, diversas realizações físicas têm sido experimentadas para esses computadores. Além disso, existem propostas diferentes para o funcionamento deles, como computação por medidas, computação adiabática, computação topológica etc.

Um caso muito estudado é o de fatoração de números inteiros. Todo número inteiro pode ser escrito de maneira única como um produto de números primos. Entretanto, achar os fatores primos de um número grande não é uma tarefa simples. De fato, a dificuldade do processo de fatoração está

na base do protocolo RSA de criptografia, usado em transmissões seguras de dados. Existe um algoritmo baseado no uso de qubits, chamado algoritmo de Shor, que é capaz de fatorar números muito mais rapidamente que qualquer computador clássico. A implementação experimental dessas ideias ainda está começando. Em 2012, um sistema de fótons foi usado para rodar o algoritmo de Shor e fatorar o número 21=3x7. O resultado foi descrito no artigo "Experimental realization of Shor's quantum factoring algorithm using qubit recycling", publicado em Nature Photonics 6, 773–776 (2012).

Um dos principais problemas na criação de um computador quântico é a questão da escalabilidade. Uma coisa é manipular algumas dezenas de qubits, outra coisa é implementar um processador com milhões deles. Sistemas grandes se tornam mais suscetíveis a sofrerem efeitos de decoerência. Atualmente, esses efeitos são minimizados realizando os experimentos a temperaturas extremamente baixas, mas isso não é prático. Um outro problema é a fidelidade na manipulação de estados quânticos. Para colocar um sistema em um estado quântico determinado é preciso interagir com ele de acordo com uma Hamiltoniana específica, durante um tempo específico.

Leia o artigo de Luis Davidovich, "Informação Quântica: do teletransporte ao computador quântico", Ciência Hoje, vol. 35, n. 206, p. 28. Disponível em: <http://www.if.ufrj.br/~ldavid/arquivos/fronteir.pdf>. Outros artigos sobre temas relacionados podem ser encontrados em sua página pessoal

Uma abordagem mais completa dos conceitos aqui tratados pode ser encontrada no artigo "Teoria quântica da informação: impossibilidade de cópia, entrelaçamento e teletransporte" de José Roberto Castilho Piqueira, em Rev. Bras. Ensino Fís., dez. 2011, vol. 33, n. 4, p.4303. Disponível em: <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1806-11172011000400003>.

8.7 – Interpretações da Mecânica Quântica

A mecânica quântica contém um conjunto de regras que nos dizem como devemos calcular as probabilidades de ocorrência de determinados eventos em determinadas situações. Essas regras têm sido confirmadas por inúmeros experimentos. Essa teoria também oferece previsões para os valores de certas grandezas físicas (fator giromagnético do elétron, linhas espectrais do hidrogênio, quantização da resistência Hall etc.) que exibem impressionante concordância com as medidas experimentais. Em suma, do ponto de vista dos *resultados*, não resta nenhuma dúvida de que se trata de uma teoria muito *eficiente*.

Por outro lado, também são inegáveis as dificuldades *conceituais* inerentes a ela. Essas dificuldades costumam ser sentidas de forma aguda pelos estudantes que tomam contato com o assunto pela primeira vez, mas não estão restritas a eles. Richard Feynman, ganhador do Prêmio Nobel de 1965 por suas contribuições ao desenvolvimento da eletrodinâmica quântica, entre outras, considerado um dos maiores físicos do século XX, disse certa vez: "Posso dizer com segurança que ninguém entende a mecânica quântica". De fato, existem muitas frases de físicos famosos expressando suas dificuldades com a mecânica quântica.

Afinal, qual o problema com a mecânica quântica? Para algumas pessoas, não há problema algum. Segundo elas, a teoria não passa de um conjunto de regras a serem aplicadas, e tudo o que importa é que as previsões feitas estejam de acordo com a experiência. Qualquer outra preocupação seria esforço inútil. Essa perspectiva costuma ser sintetizada na expressão "Cale-se e calcule!".[7] Em seu dia a dia, a maioria dos físicos acaba adotando essa visão, mais por inércia do que por resultado de alguma reflexão.

7 Essa orientação tem sido atribuída a Feynman, mas David Mermin não acredita que ele a tenha dado e reinvidica sua autoria (ver Phys. Today, 57(5), p. 10, 2014).

A insatisfação com a mecânica quântica costuma vir do fato de que não é simples discernir qual é a visão que ela oferece sobre o mundo *como ele realmente é*. Para falarmos de algo concreto, imaginemos um elétron que é descrito por uma função de onda $\Psi(x,t)$. Se quisermos medir a posição desse elétron, a teoria prevê que a densidade de probabilidade de o resultado ser x no instante t é $|\Psi(x,t)|^2$. Essa previsão é confirmada experimentalmente quando fazemos um conjunto grande de medidas. Mas o que ela significa quando medimos um único elétron?

Onde estava o elétron antes de ele ter sua posição medida? Será que a função de onda descreve apenas o nosso conhecimento acerca do elétron, ou será que ela possui uma realidade objetiva? O que acontece quando um elétron passa por uma fenda dupla? O que acontece quando ele é detectado? O que é o colapso da função de onda? Afinal, o que é um elétron? Por incrível que possa parecer, questões como essas incomodaram os criadores da mecânica quântica e continuam incomodando os físicos que se dedicam a elas, 100 anos depois.

Apresentamos aqui um apanhado breve de algumas das principais interpretações que foram oferecidas para a mecânica quântica ao longo dos anos. Não é nossa intenção (e nem estaria ao nosso alcance) entrar em todos os detalhes dessas interpretações, nem discutir todas elas. Pretendemos apenas oferecer uma amostra da variedade de abordagens que estão disponíveis a quem se interessar a estudar o assunto de forma mais aprofundada.

A estrutura interpretativa mais tradicional para a mecânica quântica é a chamada *interpretação de Copenhagem*, ligada principalmente ao nome de Niels Bohr. De acordo com essa interpretação, os objetos quânticos possuem uma natureza *dual*, exibindo, em algumas circunstâncias, comportamentos corpusculares (notadamente em processos de medição da posição) e, em outras, comportamento ondulatório

(notadamente em sua propagação livre de interações). Assim, "onda" e "partícula" seriam propriedades *complementares*.

O processo de medida tem papel fundamental nessa interpretação, pois é ele que causa o colapso da função de onda. Esse processo de medida requer a intervenção de um aparelho de medida, que por definição é um objeto clássico. Essa visão possui um defeito óbvio: a fronteira entre os mundos "quântico" e "clássico" não pode ser perfeitamente delimitada, já que qualquer aparelho de medida é composto de átomos e deve, em princípio, estar também sujeito às leis da mecânica quântica.

O próprio Schrödinger tornou essa objeção universalmente conhecida, na forma de seu famoso experimento mental com um gato. Se usarmos um gato para "medir" o decaimento de átomo radioativo, o próprio gato será levado a um estado de superposição quântico. Então alguém precisará medir o estado do gato, mas então esse alguém também será levado a um estado de superposição etc.

Outro ponto central da interpretação de Copenhagem é que aparelhos de medida não revelam propriedades preexistentes dos sistemas sendo medidos. Em vez disso, as propriedades medidas são de certa forma *produzidas* no próprio ato da medição. Esse é o colapso da função de onda, um processo intrinsecamente aleatório. É sabido que essa natureza *não realista* da visão de Copenhagem incomodava profundamente Einstein (é nesse contexto que ele disse não acreditar que Deus jogasse dados).

Einstein de fato acreditava que a mecânica quântica que conhecemos não é uma teoria completa. Ele achava que deveria ser possível encontrar uma teoria que descrevesse as propriedades *reais* dos sistemas, e que para isso seria necessário introduzir mais variáveis do que apenas a função de onda. Se alguém conhecesse essas variáveis, poderia prever com certeza o resultado de uma medida da posição de um elétron, por exemplo, porque essa posição teria uma existência

prévia bem definida. Tais variáveis ficaram conhecidas, historicamente, como *variáveis ocultas*.

Um grande avanço no entendimento conceitual da mecânica quântica veio com os trabalhos de John Bell, na década de 1960.

Para se aprofundar no assunto, veja o verbete online sobre o Terema de Bell, em https://en.wikipedia.org/wiki/Bell%27s_theorem.

Ele conseguiu mostrar que qualquer teoria de variáveis ocultas que seja *realista* e *local* deverá necessariamente fazer previsões que são diferentes das feitas pela mecânica quântica. Esse fato é comumente chamado, hoje em dia, de *teorema de Bell*. Como as previsões da mecânica quântica são corroboradas pelos experimentos, podemos concluir que tais teorias não existem.

Uma revisão de provas do Teorema de Bell é apresentada em *Demonstrações do Teorema de Bell* (Disponível em: <http://www.if.ufrj.br/~carlos/trablicen/rodrigo/monografiaRodrigoFinal.pdf>).

Em outras palavras, não há como escapar de ao menos uma das seguintes conclusões: ou a natureza é de fato não realista, ou seja, objetos quânticos não possuem posição (ou momento etc.) antes de serem medidos, ou a natureza é de fato não local, ou seja, existem influências que atuam instantaneamente. Os modernos experimentos nos quais o *emaranhamento quântico* é evidenciado sugerem que a não localidade seja de fato uma propriedade da natureza.

Por outro lado, é possível encontrar teorias de variáveis ocultas que preservam o realismo, ou seja, teorias nas quais o elétron é uma partícula que possui uma posição bem definida em todos os instantes de tempo. Ou seja, é possível

falar da trajetória de um elétron mesmo quando ele não está sendo observado ou medido. A *teoria da onda-piloto*, também chamada de *mecânica Bohmiana* em homenagem da David Bohm, é a mais famosa dessas teorias.

Nessa teoria, o movimento de um elétron é determinado por leis de movimento, diferentes das leis de Newton, que dependem da função de onda. Ou seja, a função de onda é algo que "guia" o movimento do elétron. Como a função de onda continua satisfazendo a equação de Schrödinger, essa teoria leva às mesmas previsões da mecânica quântica tradicional, sem a necessidade de introduzir a dualidade onda-partícula e nem um papel importante ao processo de medida.

No contexto da mecânica Bohmiana, o experimento da dupla fenda é explicado da seguinte maneira: os elétrons são enviados em direção ao aparato, entretanto, a preparação desses elétrons possui alguma imprecisão, de modo que eles possuem trajetórias ligeiramente diferentes, correspondendo a uma certa função de onda inicial. Cada elétron passa por apenas uma das duas fendas, mas a onda-piloto passa pelas duas. Do outro lado, a onda piloto desenvolve efeitos de interferência e guia o elétron de modo que ele atinja um de seus máximos. O próximo elétron também passa por apenas uma das fendas, mas sua trajetória é diferente da do primeiro, e ele pode atingir outro máximo. Assim, o padrão de interferência acaba sendo produzido, por partículas que são guiadas por ondas.

Outra interpretação que goza de popularidade é a chamada teoria de *muitos mundos*, que costuma estar associada ao nome de Hugh Everett III. De acordo com essa teoria, a equação de Schrödinger é sempre válida e não existe colapso da função de onda. O que acontece é que existem muitos universos existindo em paralelo, e cada resultado possível de uma medida quântica acontece em um deles. Ou seja, quando medimos o spin de um elétron e obtemos o resultado

"para cima", existe um outro universo em que o mesmo experimento foi realizado ao mesmo tempo e onde o resultado "para baixo" foi obtido.

Algumas versões da teoria de muitos mundos postulam que a cada medida quântica realizada novos universos são criados. Essa ideia pode parecer extravagante, mas não pode ser desprovada, uma vez que a teoria não prevê qualquer tipo de "interação" entre os muitos universos que possa levar um deles a detectar a presença de outro.

Como já dissemos, não existe consenso entre os físicos sobre qual a melhor interpretação para o formalismo matemático da mecânica quântica. A maioria deles não se preocupa com o problema, contentando-se em usar as regras para calcular resultados, fazer previsões e desenvolver aplicações. Dentre aqueles que se dedicam ativamente aos chamados *fundamentos* da teoria, praticamente todas as interpretações encontram acolhida.

Essa variedade de possibilidades se deve justamente ao fato de que se trata apenas de *interpretação*, ou seja, todas elas fazem as mesmas previsões para os dados experimentais, de modo que cada um fica livre para escolher a sua com base em critérios subjetivos. Entretanto, os experimentos têm se aperfeiçoado a cada dia. Hoje já é possível manipular átomos e fótons individualmente, o que não era o caso na época em que a teoria foi criada. Talvez a contínua sofisticação das técnicas experimentais acabe levando a uma situação em que se possa discriminar as diferentes possibilidades com base em testes objetivos. Para isso, também é necessário que as teorias sejam levadas às últimas consequências, a fim de que eventualmente acabem chegando a incompatibilidades estre si que possam ser resolvidas. Esse é um processo que ainda está em curso.

Para uma discussão elementar das várias interpretações da Mecânica Quântica, leia o artigo do filósofo Osvaldo Frota Pessoa Jr. em Ciência Hoje, vol. 42, n. 250 p. 32, 2008. (Disponível em: <http://www.ffich.usp.br/df/opessoa/CH250-artigo-interpretacoes-da-MQ-final-completo-pdf.pdf>)

8.8 - Exercícios

1. Seja o estado emaranhado $|\Psi\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle$. Esse estado está normalizado? Mostre que ele não é autoestado do operador $\hat{S}_z$ de uma das partículas.
2. Mostre que o estado do problema anterior é equivalente ao estado emaranhado na direção x, $|\Phi\rangle = |\rightarrow\rightarrow\rangle + |\leftarrow\leftarrow\rangle$. Ou seja, observadores medindo cada um dos spins observarão sempre correlação perfeita em seus resultados se os detetores estiverem alinhados.

Referências

Referências bibliográficas e multimídia

Apresentamos uma lista não exaustiva de material instrucional (sem análise de mérito) que pode contribuir para a melhoria do conhecimento individual do professor e do ensino da Mecânica Quântica, com possibildades de inserção em sala de aula.

Bibliografia básica para a elaboração do livro

Cohen-Tannoudji, C., Diu, B., & Laloë, F. (1977). Quantum mechanics, vol. 1. Wiley

Dirac, P. A. M. (1930). The Principles of Quantum Mechanics. London: Oxford U. Press.

Gottfried, K. (2003). Quantum Mechanics

McIntyre, David H. Quantum Mechanics: A paradigms approach, Boston: Pearson (2012).

Messiah, A. (1961). Quantum Mechanics. Amsterdam: North-Holland

Rosenblum, Bruce; Kuttner, Fred. Quantum Enigma: Physics Encounters Consciousness. Oxford U.P., New York, 2006.

Susskind, Leonard, Friedman, Art. Quantum Mechanics: The Theoretical Minimum

Objetos Educacionais Digitais (OED)

1. Repositórios:

A Biblioteca Digital ComPadre (http://www.compadre.org) é uma rede que disponibiliza gratuitamente material para o ensino de Física, incluindo Mecânica Quântica. É mantido pela Sociendade Americana de Professores de Física (AAPT).

2. Atividades para a aprendizagem de Mecânica Quântica de Grupos e Instituições

2.1 Grupo Paradigms in Physics da Universidade Estadual do Oregon

http://www.physics.oregonstate.edu/qmactivities que acompanham o livro de McIntyre (2012).

2.2 Kansas Visual Quantum Mechanics

http://phys.educ.ksu.edu/vqm/

2.3 Wolfram demonstration Project (CD pode ser baixado grátis)

http://www.demonstrations.wolfram.com/topic.html?topic=Quantum+Mechanics&limit=20

2.4 Kings College

http://www.kcvs.ca/site/projects/physics.html (Particle in a 1-Dimensional Box)

2.5 Quantum visualization – Saint-Andrews

https://www.st-andrews.ac.uk/physics/quvis/

IMZ: http://www.st-andrews.ac.uk/physics/quvis/index.html

3. Laboratórios virtuais e remotos

Uma extensa lista de endereços de laboratórios pode ser encontrada no site da Universidade de Munique (http://www.

en.didaktik.physik.uni-muenchen.de/rcls/index.html). Entre eles:

3.1 Virtual Labs, http://www.vlab.co.in/index.php. Missão nacional de Educação da Índia.

3.2 Virtual Physics Laboratory, Universisade de Taiwan (http://www.phy.ntnu.edu.tw/ntnujava/)

3.3 QuantumLab, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg

(http://www.didaktik.physik.uni-erlangen.de/quantumlab/)

4. Applets e Simulações

4.1 PhET

https://phet.colorado.edu/pt_BR/simulations/category/physics/quantum-phenomena

4.2 Physilets:

http://www.compadre.org/PQP/preface/

4.3 Java-Programs on Physics by Walter Fendt, Paul-Klee-Gymnasium Gersthofen (http://www.walter-fendt.de/ph6en/)

4.4 General Physics Java Applets by B. Surendranath Reddy, India (x http://surendranath.tripod.com/Applets.html)

4.5 Paul Falstad homepage

Solver (atualizado 2014)

http://www.falstad.com/qm1d/

5. Vídeos

Uma busca no YouTube possibilita acesso a muitos vídeos sobre Mecânica Quântica. Exemplo: TED-ED (http://ed.ted.com/search?utf8=✓&qs=quantum+mechanics)

6. Propostas de games

Goff, A. (2006). Quantum tic-tac-toe: a teaching metaphor for superposition in quantum mechanics. American Journal of Physics, 74(11), 962-973.

Gordon, M.; Gordon, G. (2010). Quantum computer games: quantum minesweeper. Physics Education, 45(4): 372-377.

Gordon, M.; Gordon, G. (2012). Quantum computer games: Schrödinger cat and hounds. Physics Education, 47(3): 346-354.

Livros (em língua portuguesa)

Caruso, F.; Oguro, V. Física Moderna, Rio de Janeiro, Campus/ Elsevier ,2006.

Feynman, R.P.; Leighton, R.B.; Sands, M. Vol. III. Lições de Física De Feynman, Bookman, 2008.

Greca, Ileana Maria; Herscovitz, Victoria Elnecave, Introdução à Mecânica Quântica, Textos de Apoio ao Professor de Física, n.13 (2002). Disponível em http://Www.If.Ufrgs.Br/Public/Tapf/N13_2002_Greca_Herscovitz.Pdf. (?)

Griffiths, David J. Mecânica Quântica, Tradução Lara Freitas, 2ª. Ed. Pearson/ Prentice Hall, 2011.

Nussenzveig, H.M. Curso De Física Básica: Ótica, Relatividade, Física Quântica, Blucher, 2002.

Pessoa Jr., O., Conceitos de Física Quântica, 2 Vols., Livraria Da Física, 2003.

Piza, A.F.R. De Toledo, Mecânica Quântica, Edusp, 2a. Ed., 2009.

Sakurai, J.J.; Napolitano, Jim. Mecânica Quântica Moderna, Tradução Silvio R. Dahmen, Bookman, 2ª. Ed., 2013.

Artigos em Periódicos Nacionais

Revista Brasileira de Ensino de Física (http://www.sbfisica.org.br/rbef/)

Abrego, José Ramon Beltran et al. Montagem de um conjunto experimental destinado à verificação do princípio da incerteza de Heisenberg. Rev. Bras. Ensino Fís., Set 2013, vol.35, no.3, p.1-5

Amorim, R.G.G. et al. Função de Wigner-80 anos e as origens da geometria não-comutativa. Rev. Bras. Ensino Fís., Set 2013, vol.35, no.3, p.1-14.

Araujo, João Cesar Boreggio de, Borges, Gláucia R.P. and Drigo Filho, Elso Supersimetria, método variacional e potencial de Lennard-Jones (12,6). Rev. Bras. Ensino Fís., 2006, vol.28, no.1, p.41-44.

Bastos Filho, Jenner Barretto. Os problemas epistemológicos da realidade, da compreensibilidade e da causalidade na teoria quântica. Rev. Bras. Ensino Fís., Jun 2003, vol.25, no.2, p.125-147

Bernardini, Alex Eduardo de and De Leo, Stefano Oscilação quântica de sabores com pacotes de ondas. Rev. Bras. Ensino Fís., Dez 2004, vol.26, no.4, p.335-350.

Betz, Michel E.M. Elementos de mecânica quântica da partícula na interpretação da onda piloto. Rev. Bras. Ensino Fís., Dez 2014, vol.36, no.4, p.01-14.

Betz, Michel, Lima, Ismael de and Mussatto, Gabriel Dualidade onda-partícula: um objeto de aprendizagem baseado no interferômetro de Mach-Zehnder. Rev. Bras. Ensino Fís., Set 2009, vol.31, no.3, p.3501.1-3501.8.

Bispo, Wilson Fábio de Oliveira, David, Denis Francis Gilbert and Freire Jr., Olival. As contribuições de John Clauser para o primeiro teste experimental do teorema de Bell: uma análise das técnicas e da cultura material. Rev. Bras. Ensino Fís., Set 2013, vol.35, no.3, p.1-7.

Bolivar, A. O. Limite clássico da mecânica quântica. Rev. Bras. Ensino Fís., Jun 2003, vol.25, no.2, p.169-175.

Bolivar, A. O. Teorema de Ehrenfest e o limite clássico da mecânica quântica. Rev. Bras. Ensino Fís., Jun 2001, vol.23, no.2, p.190-195

Cabral, Gustavo Eulalio M., Lima, Aércio Ferreira de and Lula Jr., Bernardo Interpretando o algoritmo de Deutsch no interferômetro de Mach-Zehnder. Rev. Bras. Ensino Fís., 2004, vol.26, no.2, p.109-116.

Cardoso, Tatiana R. and Castro, Antonio S. de Estados estacionários de partículas sem spin em potenciais quadrados. Rev. Bras. Ensino Fís., 2008, vol.30, no.2, p.2306.1-2306.10

Caruso, Francisco and Oguri, Vitor O método numérico de Numerov aplicado à equação de Schrödinger. Rev. Bras. Ensino Fís., Jun 2014, vol.36, no.2, p.1-7.

Castrillón, Jhonny, Freire Jr., Olival and Rodríguez, Boris Mecánica cuántica fundamental, una propuesta didáctica. Rev. Bras. Ensino Fís., Mar 2014, vol.36, no.1, p.1-12.

Chibeni, Silvio Seno. Certezas e incertezas sobre as relações de Heisenberg. Rev. Bras. Ensino Fís., Jun 2005, vol.27, no.2, p.181-192.

Chiquito, Adenilson J. and Lanciotti Jr., Francesco Super-redes semicondutoras: um laboratório de Mecânica Quântica. Rev. Bras. Ensino Fís., Dez 2004, vol.26, no.4, p.315-322.

Dartora, C.A. et al. Aspectos gerais da teoria da difração sob o ponto de vista de um princípio de incerteza. Rev. Bras. Ensino Fís., Jun 2009, vol.31, no.2, p.2303.1-2303.6

De Vincenzo, Salvatore. Classical-quantum versus exact quantum results for a particle in a box. Rev. Bras. Ensino Fís., June 2012, vol.34, no.2, p.1-5

De Vincenzo, Salvatore. On time derivatives for $\langle X^2 \rangle$ and $\langle p^2 \rangle$: formal 1D calculations. Rev. Bras. Ensino Fís., June 2013, vol.35, no.2, p.1-9.

Duarte, Celso de Araujo. Sobre a possibilidade da quantização dos fluxos de campo na radiação eletromagnética. Rev. Bras. Ensino Fís., Set 2013, vol.35, no.3, p.1-4.

Fanaro, María de los Ángeles, Arlego, Marcelo and Otero, María Rita The double slit experience with light from the point of view of Feynman's sum of multiple paths. Rev. Bras. Ensino Fís., June 2014, vol.36, no.2, p.1-7.

Ferreira, G.F. Leal and Costa, Rogerio C.T. da Perturbação paramétrica em mecânica quântica. Rev. Bras. Ensino Fís., 2006, vol.28, no.4, p.417-420

Filgueiras, C. and Moraes, Fernando Extensões auto-adjuntas de operadores em mecânica quântica. Rev. Bras. Ensino Fís., 2007, vol.29, no.1, p.11-13

Freitas, Fábio and Freire Jr., Olival A formulação dos 'estados relativos' da teoria quântica. Rev. Bras. Ensino Fís., 2008, vol.30, no.2, p.2307.1-2307.15.

Freitas, G.B., Veigas, R.G., Drigo Filho, E. Poço quadrado quântico finito e método de fatorização. Rev. Bras. Ensino Fís., Mar 2010, vol.32, no.1, p.1502-1504.

Giardino, Sergio. Angular invariant quantum mechanics in arbitrary dimension. Rev. Bras. Ensino Fís., Sept 2013, vol.35, no.3, p.1-7.

Girardelli, David, Zavanin, Eduardo M. and Guzzo, Marcelo M. Equivalência entre a mecânica quântica e a mecânica quântica PT simétrica. Rev. Bras. Ens. Fis., Mar 2015, vol.37, no.1, p.1304.

Gomes, Gerson G., Pietrocola, Maurício O experimento de Stern-Gerlach e o spin do elétron: um exemplo de quasi-história. Rev. Bras. Ensino Fís., Jun 2011, vol.33, no.2, p.1-11.

Greca, Ileana Maria, Moreira, Marco Antonio, Herscovitz, Victoria E. Uma proposta para o ensino de mecânica quântica. Rev. Bras. Ensino Fís., Dez 2001, vol.23, no.4, p.444-457.

José, Marcelo Archanjo, Piqueira, José Roberto Castilho, Lopes, Roseli de Deus Introdução à programação quântica. Rev. Bras. Ensino Fís., Mar 2013, vol.35, no.1, p.1-9

Leite, Ilaiáli Souza et al. Uso do método cooperativo de aprendizagem Jigsaw adaptado ao ensino de nanociência e nanotecnologia. Rev. Bras. Ensino Fís., Dez 2013, vol.35, no.4, p.1-7.

Lima, Maria Consuelo A., Almeida, Maria José P.M. de. Articulação de textos sobre nanociência e nanotecnologia para a formação inicial de professores de física. Rev. Bras. Ensino Fís., Dez 2012, vol.34, no.4, p.1-9.

Marchiolli, Marcelo A. Mecânica Quântica no Espaço de Fase: I. Formulação de Weyl-Wigner. Rev. Bras. Ensino Fís., 2002, vol.24, no.4, p.421-436.

Melo, C.A.M. de, Pimentel, B.M., Ramirez, J.A. Princípio de ação quântica de Schwinger. Rev. Bras. Ensino Fís., Dez 2013, vol.35, no.4, p.1-16.

Melo, C.A.M. de, Pimentel, B.M., Ramirez, J.A. Teoria algébrica de processos da medida em sistemas quânticos. Rev. Bras. Ensino Fís., Set 2011, vol.33, no.3, p.1-13.

Morelhão, Sérgio L. and Perrotta, André V. General recursive solution for one-dimensional quantum potentials: a simple tool for applied physics. Rev. Bras. Ensino Fís., 2007, vol.29, no.3, p.331-339.

Novaes, Marcel. Mecânica Quântica no Espaço de Fase: II. Estados Coerentes. Rev. Bras. Ensino Fís., 2002, vol.24, no.4, p.437-447.

Oliveira, Denny Mauricio de. Uma proposta para o ensino de teoria quântica de campos na graduação: a eletrodinâmica de Maxwell-Chern-Simons como motivação. Rev. Bras. Ensino Fís., Set 2011, vol.33, no.3, p.1-9.

Ostermann, Fernanda and Prado, Sandra Denise Interpretações da mecânica quântica em um interferômetro virtual de Mach-Zehnder. Rev. Bras. Ensino Fís., Jun 2005, vol.27, no.2, p.193-203.

Paulino, K.H. et al. Solução quântica para o poço duplo quadrado unidimensional assimétrico. Rev. Bras. Ensino Fís., Dez 2010, vol.32, no.4, p.4306-1-4306-8.

Pereira, Rodrigo Gonçalves, Miranda, Eduardo. Introdução à Teoria Quântica de Campos: do Oscilador Harmônico ao Campo Escalar Livre. Rev. Bras. Ensino Fís., Jun 2002, vol.24, no.2, p.237-246.

Piqueira, José Roberto Castilho. Teoria quântica da informação: impossibilidade de cópia, entrelaçamento e teletransporte. Rev. Bras. Ensino Fís., Dez 2011, vol.33, no.4, p.4303-4303.

Reis, Marcelo A. dos and Vitiello, S.A. Método Variacional com Monte Carlo aplicado ao oscilador harmônico quântico. Rev. Bras. Ensino Fís., 2006, vol.28, no.1, p.45-50.

Ribeiro Filho, Aurino. Realismo e Localidade em Mecânica Quântica. Rev. Bras. Ensino Fís., Set 2015, vol.37, no.3, p.3801-1-3801-2.

Ribeiro, M.A. Cândido et al. Os problemas de espalhamento quântico em potenciais elementares. Rev. Bras. Ensino Fís., 2004, vol.26, no.1, p.1-10.

Ricci, Trieste Freire, Ostermann, Fernanda and Prado, Sandra Denise. O tratamento clássico do interferômetro de Mach-Zehnder: uma releitura mais moderna do experimento da fenda dupla na introdução da física quântica. Rev. Bras. Ensino Fís., 2007, vol.29, no.1, p.79-88.

Rigolin, Gustavo and Rieznik, Andrés Anibal Introdução à criptografia quântica. Rev. Bras. Ensino Fís., Dez 2005, vol.27, no.4, p.517-526.

Sales, Gilvandenys Leite et al. Atividades de modelagem exploratória aplicada ao ensino de física moderna com a utilização do objeto de aprendizagem pato quântico. Rev. Bras. Ensino Fís., Set 2008, vol.30, no.3, p.3501.1-3501.13.

Sales, Gilvandenys Leite et al. Atividades de modelagem exploratória aplicada ao ensino de física moderna com a utilização do objeto de aprendizagem pato quântico. Rev. Bras. Ensino Fís., Set 2008, vol.30, no.3, p.3501.1-3501.13.

Savall Alemany, Francisco, Domènech Blanco, Josep Lluís and Martínez Torregrosa, Joaquín La introducción del concepto de fotón en bachillerato. Rev. Bras. Ensino Fís., Jun 2013, vol.35, no.2, p.1-14.

Silva Júnior, N.L.; Andrade-Neto, A.V. Expressões analíticas para a probabilidade de tunelamento em fenômeno de emissão por campo. Rev. Bras. Ensino Fís., Set 2013, vol.35, no.3, p.1-6.

Silva Neto, Jader da, Ostermann, Fernanda; Prado, Sandra Denise O tema da dualidade onda-partícula na educação profissional em radiologia médica a partir da simulação do interferômetro

de Mach-Zehnder. Rev. Bras. Ensino Fís., Mar 2011, vol.33, no.1, p.01-10.

Sismanoglu, Bogos Nubar, do Nascimento, Janaina Correa; de Barros Aragão, Eduardo Cezar Barbosa Visualizando tunelamento quântico através da geração de microplasmas. Rev. Bras. Ens. Fis., Mar 2015, vol.37, no.1, p.1312.

Sousa, J. Ricardo de; Coimbra, Débora Análise da convergência na Teoria da Perturbação Estacionária. Rev. Bras. Ensino Fís., 2004, vol.26, no.2, p.129-137.

Souza, Moisés Fernandes de et al. Um breve tratado sobre a aproximação paraxial. Rev. Bras. Ensino Fís., Set 2014, vol.36, no.3, p.1-13.

Trindade, Jorge, Fiolhais, Carlos; Gil, Victor Atomic orbitals and their representation: can 3-D computer graphics help conceptual understanding?. Rev. Bras. Ensino Fís., Sept 2005, vol.27, no.3, p.319-325.

Valverde, C. et al. Alguns aspectos da óptica quântica usando campos luminosos em modos viajantes. Rev. Bras. Ensino Fís., Jun 2015, vol.37, no.2, p.2311-1-2311-10.

Viterbo, Vitor D., Lemes, Nelson H.T., Braga, João P. Variable phase equation in quantum scattering. Rev. Bras. Ensino Fís., Mar 2014, vol.36, no.1, p.1-5. ISSN 1806-1117

Yamashita, M.T. Um método numérico para a solução de problemas em física quântica de poucos corpos. Rev. Bras. Ensino Fís., Set 2008, vol.30, no.3, p.3312.1-3312.4

Química Nova (http://quimicanova.sbq.org.br)

Arroio, Agnaldo et al. O ensino de química quântica e o computador na perspectiva de projetos. Quím. Nova, Mar 2005, vol.28, no.2, p.360-363.

Custodio, Rogério et al. Quatro alternativas para resolver a equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio. Quím. Nova, Fev 2002, vol.25, no.1, p.159-170.

Hermoso, Willian and Ornellas, Fernando R. Modelos da Química Quântica no espaço de momento: diferentes representações

de um mesmo sistema. Quím. Nova, 2009, vol.32, no.9, p.2487-2491.

Monte, Silmar A. do, Ventura, Elizete A importância do método de Hartree no ensino de química quântica. Quím. Nova, 2011, vol.34, no.3, p.527-534

Scientiae Studia (http://www.scientiaestudia.org.br/revista/)

Costa, Newton Carneiro Affonso da et al. Sobre uma fundamentação não reflexiva da mecânica quântica. Sci. stud., 2012, vol.10, no.1, p.71-104.

Freire Junior, Olival and Greca, Ileana Maria Informação e teoria quântica. Sci. stud., Mar 2013, vol.11, no.1, p.11-33.

Freire Júnior, Olival. Filosofia da ciência e controvérsia científica: um leque de concepções físicas e interpretações filosóficas da física quântica. Sci. stud., Dez 2013, vol.11, no.4, p.937-962.

Leite, Anderson and Simon, Samuel Werner Heisenberg e a Interpretação de Copenhague: a filosofia platônica e a consolidação da teoria quântica. Sci. stud., Jun 2010, vol.8, no.2, p.213-241.

Leite, Patrícia Kauark. Causalidade e teoria quântica. Sci. stud., 2012, vol.10, no.1, p.165-177.

Paty, Michel. A noção de determinismo na física e seus limites. Sci. stud., Dez 2004, vol.2, no.4, p.465-492.

Pessoa Júnior, Osvaldo. Refinamentos da interpretação da complementaridade a partir do experimento de Afshar. Sci. stud., Mar 2013, vol.11, no.1, p.119-139.

Videira, Antonio Augusto Passos. Nem heterodoxa nem ortodoxa: a mecânica quântica na segunda metade do século xx. Sci. stud., Mar 2015, vol.13, no.1, p.233-237.

Caderno Brasileiro de Ensino de Física (https://periodicos.ufsc.br/index.php/fisica)

Pereira, A. P.; Pessoa Jr., O.; Cavalcanti, C. J. H.; Ostermann, F. (2012). Uma abordagem conceitual e fenomenológica dos

postulados da física quântica. Caderno Brasileiro de Ensino de Física, 29(2): 831-863.

Silva, A. C.; Almeida, M. J. P. M. (2011). Física quântica no ensino médio: o que dizem as pesquisas. Caderno Brasileiro de Ensino de Física, 26(3): 624-652.

Investigações em Ensino de Ciências (http://www.if.ufrgs.br/ienci/)

Greca, I. M.; Moreira, M. A. (2001). Uma revisão da literatura sobre estudos relativos ao ensino da mecânica quântica introdutória. Investigações em Ensino de Ciências, 6(1): 29-56.

Montenegro, R. L.; Pessoa Jr.; O. (2002). Interpretações da teoria quântica e as concepções dos alunos do curso de física. Investigações em Ensino de Ciências, 7(2): 107-126.

PEREIRA, Alexsandro: OSTERMANN, Fernanda. Sobre o Ensino de Física Moderna e Contemporânea: Uma Revisão da Produção Acadêmica Recente. Investigações em Ensino de Ciências, vol. 14, no. 3, 393-420, 2009.

Carvalho Neto, R. A.; Freire Jr., O.; Silva, J. L. P. B. (2009). Improving students' meaningful learning on the predictive nature of quantum mechanics. Investigações em Ensino de Ciências, 14(1): 65-81

Teses/Dissertações

Rocha, Carlos Raphael (2015). Inserindo conceitos e princípios de mecânica quântica no ensino médio: estados quânticos e superposição linear de estados. Tese de doutorado, Novembro, 2015.

Contém recente revisão bibliográfica sobre temas de Mecânica quântica, principalmente de artigos nacionais.

Soares, S. S. (2010). Um curso de mecânica quântica para professores de física do ensino médio (Dissertação de Mestrado, Programa de Pós-graduação em Ensino de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul).

Ciência Hoje (http://cienciahoje.uol.com.br)

Claro, F. O efeito Hall quântico, Ciência Hoje, 6 (ed. 31) p. 36.

Davidovich, L. (2004) Informação Quântica: do teletransporte ao computador quântico, Ciência Hoje, vol.35, no. 206, p. 28.

Oliveira, I. S.; Vieira, C. L. (2009). A Revolução dos Q-bits. Rio de Janeiro: Jorge Zahar Editor.

Pessoa Jr., O. Frota (2008). As Interpretações da Mecânica Quântica. Ciência Hoje, vol.42, no. 250 p. 32.

Valadares, E.C., Moreira, M.V.B., Bezerra-Filho, J.C., Dias, I.F.L. Super-redes: a harmonia das bandas cristalinas, Ciência Hoje, 6 (ed. 35) p. 44.

Artigos em periódicos internacionais

A. Ensino de Mecânica Quântica

Adegoke, B. A. (2012). Impact of interactive engagement on reducing the gender gap in quantum physics learning outcomes among senior secondary school students. Physics Education, 47(4): 462 - 470.

Akarsu, B. (2010). Einstein's redundant triumph "quantum physics": an extensive study of teaching/learning quantum mechanics in college. Latin American Journal of Physics Education, 4(2): 273-285.

Akarsu, Bayram. An extensive Study of Teaching / Learning Quantum Mechanics in College. Disponível em http://arxiv.org/pdf/1002.4975.pdf

Akarsu, Bayram. Instructional Designs in Quantum Physics: A Critical Review of Research. Asian Journal of Applied Sciences, vol. 4, no. 2, 112-118, 2011.

Ayene, M.; Kriek, J.; Damtie, B. (2011). Wave-particle duality and uncertainty principle: phenomenographic categories of description of tertiary physics students' depictions. Physical Review Special Topics – Physics Education Research, 7(2): 020113.

Baily, C.; Finkelstein, N. D. (2010). Teaching and understanding of quantum interpretations in modern physics courses. Physical Review Special Topics – Physics Education Research, 6(1): 010101.

Bao, Lei; Redish, Edward F.. Understanding probabilistic interpretations of physical systems: A prerequisite to learning quantum physics. American Journal of Physics, vol. 70, no. 3, 210-217, 2002.

Belloni, Mario, Wolfgang, Christian. Using Physlets to Teach Quantum Mechanics, preprint. Available: http://physik.uibk.ac.at/linz/2/articles/QuantumMechanics.pdf

Bilal, Esra, Erol, Mustafa. Student Understanding of Some Quantum Physical Concepts: Wave Function, Schrödinger's Wave function and wave-particle duality. AIP Conf. Proc. 899, 479, 2007

Cataloglu, E.; Robinett, R.W.. Testing the development of student conceptual and visualization understanding in quantum mechanics through the undergraduate career. American Journal of Physics, vol. 70, no. 3, 239-251, 2002.

Deslauriers, L.; Wieman, C. (2011). Learning and retention of quantum concepts with different teaching methods. Physical Review Special Topics – Physics Education Research, 10(1): 020127.

Didi, N.; Eryılmaz, A.; Erkoç, . (2014). Investigating students' mental models about the quantization of light, energy, and angular momentum. Physical Review Special Topics – Physics Education Research, 7(2): 020128.

DüR, Wolfgang; Heusler, Stefan. What we can learn about quantum physics from a single qubit. ArXiv: 13121463v1, 2013.

Fischler, Helmut; Lichtfeldt, Michael. Modern Physics and student' conception. International Journal of Science Education, vol. 14, no. 2, 181-190, 1992.

Frederick, C. (1978). A mechanical model for teaching quantum mechanics. American Journal of Physics, 46(3): 242-243.

Gagnon, M. (2011). A bubble chamber simulator: a new tool for the physics classroom. Physics Education, 46(4): 443-450.

García-Castañeda, M. (1985). An abuse with the wave properties of matter. American Journal of Physics, 53(4): 373-374.

Goff, A. (2006). Quantum tic-tac-toe: a teaching metaphor for superposition in quantum mechanics. American Journal of Physics, 74(11), 962-973.

Gordon, M.; Gordon, G. (2010). Quantum computer games: quantum minesweeper. Physics Education, 45(4): 372-377.

Gordon, M.; Gordon, G. (2012). Quantum computer games: Schrödinger cat and hounds. Physics Education, 47(3): 346-354.

Greca, I. M.; Freire Jr., O. (2003). Does an emphasis on the concept of quantum states enhance student's understanding of Quantum Mechanics concepts. Science Education, 87, 257 (2002).

Greca, Ileana M.; Herscovitz, Victoria E. Construyendo Significados En Mecánica Cuántica: Fundamentación y resultados de una propuesta innovadora para su introducción en el nivel universitario. Enseñanza de las Ciencias, 20(2): 327-338.

Hobson, A. (2007). Teaching quantum physics without paradoxes. The Physics Teacher, 45(2): 96 - 99.

Hobson, A. (2011). Teaching quantum uncertainty. The Physics Teacher, 49(7): 434-437.

Hobson, A. (2012). Teaching quantum nonlocality. The Physics Teacher, 50(5): 270-273.

Ireson, G. A multivariate analysis of undergraduate physics students' conceptions of quantum phenomena. European Journal of Physics, 20, 193 (1999).

Ireson, The quantum understanding of pre-university physics students. Physics Education, 35, no. 1, 15-21, 2000.

Johansson, K. E.; Milstead, D. (2008). Uncertainty in the classroom – teaching quantum physics. Physics Education, 43(2): 173-179.

Johnston, I. D.; Crawford K.; Fletcher, P. R. Student difficulties in learning quantum mechanics. International Journal of Science Education, vol. 20, no. 4, 427-446, 1998.

Kalkanis, G.; Hadzidaki, P.; Stavrou, D. (2003). An instructional model for a radical conceptual change towards quantum mechanics concept. Science Education, (87) 2: 257-279.

Kapon, S.; Ganiel, U.; Eylon, B. S. (2011). Utilizing public scientific web lectures to teach contemporary physics at the high school level: A case study of learning. Physical Review Special Topics – Physics Education Research, 7(2): 020108.

Kohnle Antje, Cassettari Donatella; Edwards Tom J.; Ferguson, Callum, Alastair; Gillies D.; Hooley, Christopher A.; Korolkova, Natalia; Llama, Joseph; Sinclair, Bruce D. A new multimedia resource for teaching quantum mechanics concepts. American Journal of Physics, vol. 80, no. 2, 148-153, 2012.

Kohnle Antje; Baily, Charles; Campbell, Anna; Korolkova, Natalia; Paetkau, Mark J. Enhancing student learning of two-level quantum systems with interactive simulations. American Journal of Physics, vol. 83, no. 6, 560-566, 2015.

Kohnle Antje; Bozhinova Inna; Browne, Dan; Everitt, Mark; Fomins, Aleksejs; Kok, Pieter; Kulaitis, Gytis; Prokopas, Martynas; Raine Derek; Swinbank, Elizabeth. A new introductory quantum mechanics curriculum. European Journal of Physics, vol. 35, no. artigo 015001, (9pp), 2014.

Kohnle Antje. Multimedia resources for the teaching and learning of quantum mechanics concepts. 2011 Available: http://www.physics.le.ac.uk/physicsconcepts/resources/qm-multimedia-guide.pdf

Mashhadi, A., Woolnough, B. Insights into students' understanding of quantum physics: visualizing quantum entities European Journal of Physics, 20, 511, 1999.

Mckagan, S. B.; Perkins K. K; Wieman, C. E. Design and validation of the Quantum Mechanics Conceptual Survey. Physical Review Special Topics - Physics Education Research, vol. 6, no. artigo 020121, 2010.

Michelini, M.; Ragazzon, R.; Santi, L.; Stefanel, A. (2000). Proposal for quantum physics in secondary school. Physics Education, 35(6): 406-410.

Müller, Rainer; Wiesner, Hartmut. Teaching quantum mechanics on an introductory level. American Journal of Physics, vol. 70, no. 3, 200-209, 2002.

Niaz, M.; Fernández, R. (2008). Understanding quantum numbers in general chemistry textbooks. International Journal of Science Education, 30(7): 869-901.

Niedderer Hans, Bethge, Thomas, Cassens, Hanna, Petri, Jürgen. Teaching quantum atomic physics in college and research results about a learning pathway. AIP Conf. Proc. 399, 659, 1997. (*)

Niedderer, H., Deylitz, S. (1999). Evaluation of a new approach in quantum atomic physics in high school. Paper presented at the Annual Meeting National Association For Research In Science Teaching, Boston, MA.

Olsen, R. Introducing quantum mechanics in the upper secondary school: A study in Norway. International Journal of Science Education, vol. 24, no. 6, 565-574, 2002.

Pantoja, G. F.; Moreira, M. A.; Herscovitz, V. E. (2012). Implementation of a didactic proposal on fundamental concepts of quantum mechanics with students of a professional master's degree in physics teaching. Latin American Journal of Physics Education, 6(4): 519-529.

Passon, O. How to teach quantum mechanics, European Journal of Physics 25, 765 (2004).

Pereira A., Ostermann, F., Cavalcanti, C. On the use of a virtual Mach–Zehnder interferometer in the teaching of quantum mechanics, Physics Education 44, 281 (2009)

Petri J., Niederer, H. A learning pathway in high-school level quantum atomic physics. International Journal of Science Education, vol. 20, no. 9, 1075-1088, 1998.

Pospiech, G. (1999). Teaching the EPR paradox at high school? Physics Education, 34(5): 311- 316.

Rüdinger, E. (1976). On the teaching of introductory quantum mechanics. American Journal of Physics, 44(2): 144-148.

Sadaghiani, Homeyra; Bao, Lei. Student Difficulties in Understanding Probability in Quantum Mechanics. In: 2005 Physics Education Research Conference. Heron, P; McCullough, L.; Mark, J. AIP Conference Proceedings, 61-64, 2006.

Sadaghiani, Homeyra; Pollock, Steven J. Quantum mechanics concept assessment: Development and validation study. Physical Review Special Topics Physics Education Research, vol. 11, no. artigo 010110, 2015.

Schreiber, Z. (1994). The Nine Lives of Schrödinger's Cat: On the interpretation of nonrelativistic quantum mechanics. Master Thesis. Imperial College of Science –University of London.

Schroeder, D.V. Moore, T.A. A computer-simulated Stern–Gerlach laboratory, American Journal of Physics 61, 798 (1993).

Sinarcas, V.; Solbes, S. (2013). Dificultades en el aprendizaje y la enseñanza de la física cuántica en el bachillerato. Enseñanza de las Ciencias, 31(3): 9-25.

Singh, C. (2008a). Interactive learning on quantum mechanics. American Journal of Physics, 75(4-5): 400-405.

Singh, C. (2008b). Student understanding of quantum mechanics at the beginning of graduate instruction. American Journal of Physics, 76(3): 277-287.

Singh, Chandralekha; Marshman, Emily. A Review of Student Difficulties in Upper-Level Quantum Mechanics. ArXiv: 1504.02056v1, 2015.

Singh, Chandralekha. Student understanding of quantum mechanics. American Journal of Physics, vol. 69, no. 8, 885-895, 2001.

Velentzas, A.; Halkia, K.; Skordoulis, C. (2007). Thought experiments in the theory of relativity and quantum mechanics: their

presence in textbooks and in popular Science books. Science and Education, 16(3-5): 353-370

Waltham C., Teaching neutrino oscillations, American Journal of Physics 72, 742 (2004).

Wittmann, Michael C.; Steinberg , Richard N., Redish , Edward F. Investigating student understanding of quantum physics: Spontaneous models of conductivity. American Journal of Physics, vol. 70, no. 3, 218-226, 2002.

Zhu, G.; Singh, C. (2012). Surveying students' understanding of quantum mechanics in one spatial dimension. American Journal of Physics, 80(3): 252-259.

Zhu, G.; Singh, C. (2011). Improving students' understanding of quantum mechanics via the Stern–Gerlach experiment. American Journal of Physics, 79(5): 499-507.

Zollman, Dean A.; Rebello, N. Sanjay; HOGG, Kirsten. Quantum mechanics for everyone: Hands-on activities integrated with technology. American Journal of Physics, vol. 70, no. 3, 252-259, 2002.

B. Temas de Mecânica Quântica

Axon, T.J. Introducing Schrödinger's cat in the laboratory. American Journal of Physics 57, 317 (1989).

Bell, J.S. "Bertlmann's socks and the nature of reality." J. Phys. Collo. 42, C22 C2.41-C2,62 (1981). Disponível em https://cds.cern.ch/record/142461/.

Chemla, D.S., Quantum Wells for Photonics, Physics Today 38(5), 56 (1985).

DeWitt, B. S., Quantum mechanics and reality. Physics Today 23(9), 30 (1970).

D'Espagnat, B. The Quantum Theory and Reality, Scientific American, p. 158, Nov. 1979.

Ekert A., Hayden, P., Inamori, H., Basic Concepts in Quantum Computation, arXiv:quant ph/0011013 (2000).

Ferrari, C., Braunecker, B. Entanglement, which-way experiments, and a quantum erasure, American Journal of Physics 78, 792 (2010).

Galvez, E. J. (2010). Qubit quantum mechanics with correlated-photon experiments. American Journal of Physics, 78(5): 510-519.

Gammon, D; Steel, D.G. Optical studies of single quantum dots. Physics Today 55(10), 36 (2002).

Gouch, W. A quaternion expression for the quantum mechanical probability and current densities. European Journal of Physics, 10, 188 (1989).

Haroche, S. (1998). Entanglement, decoherence and the quantum/classical boundary. Physics Today, 51(7): 36-42.

Herbert, N. Cryptographic approach to hidden variables, American Journal of Physics 43, 315 (1975)

Hobson, Art. There are no particles, there are only fields. American Journal of Physics, vol. 81, no. 3, 211-223, 2013.

Holcomb, D.F. Quantum ellectrical transport in samples of limited dimensionas. American Journal of Physics, 67 (4), 278-297, 1999.

Itano, W. M.; Bergquist, J. C.; Bollinger, J. J.; Wineland, D. J. (1994). Quantum mechanics with one, two, and many atoms. Proc. of the 20th Inter. Colloquium on Group Theorethical Methods in Physics. Toyonala, Japan. (*)

Kuttner, F.; Rosenblum, B. (2010). Bell's theorem and Einstein's 'spooky actions' from a simple thought experiment. The Physics Teacher, 48(2): 124-130.

Kwiat, P., Weinfurter, H., Zeilinger, A. Quantum Seeing in the Dark, Scientific American, p. 72, Nov. 1996.

Laloë, F. (2001). Do we really understand quantum mechanics? Strange correlations, paradoxes, and theorems. American Journal of Physics, 69(6): 655-701.

Loeser, J.G. Three perspectives on Schrödinger's cat. American Journal of Physics 52, 1089 (1984),

Mermin, N. D. Bringing home the atomic world: Quantum mysteries for anybody. American Journal of Physics 49, 940 (1981).

Mermin, N.D. Quantum mysteries revisited. American Journal of Physics 58, 731 (1990).

Mermin, N.D. Quantum mysteries refined. American Journal of Physics 62, 880 (1994).

Mermin, D. N., Is the Moon There When Nobody Looks? Reality and the Quantum Theory. Physics Today 38(4), 38 (1985).

Mermin, N. D. What is quantum mechanics trying to tell us? American Journal of Physics 66, 753 (1998).

Mermin, N.D. Nonlocal character of quantum theory?. American Journal of Physics 66, 920 (1998).

Mermin, N.D. What's Wrong with this Pillow?. Physics Today 42 (4), 9 (1989).

Mermin, N.D. Could Feynman have said this?. Physics Today 57 (5), 10 (2004).

Mita, Katsunori. Fluid-like properties of the probability densities in quantum mechanics. American Journal of Physics, vol. 69, no. 4, 470-475, 2001.

Ogborn, J., E. F. Taylor, Quantum physics explains Newton's laws of motion, Physics Education 40, 26 (2005).

Peres, A. Unperformed experiments have no results, American Journal of Physics 46, 745 (1978)

Pinch, T. The hidden-variables controversy in quantum physics, Physics Education 14, 48 (1979).

Plenio, M. B.; Vedral, V. (1998). entanglement and thermodynamics in the quantum world. Contemporary Physics, 39(6): 431-446. (*)

Raimond, J. M.; Brune, M.; Haroche, S. (2001). Colloquium: manipulating quantum entanglement with atoms and photons in a cavity. Reviews of Modern Physics, 73(3): 565-582.

Rau, A. R. P. (2012). Topics in quantum physics with origins in astronomy: Two examples. American Journal of Physics, 80(5): 406-416.

Rice, D. A geometric approach to nonlocality in the Bohm model of quantum mechanics, American Journal of Physics 65, 144 (1997).

Schlosshauer, M. Decoherence, the measurement problem, and interpretations of quantum mechanics. Rev. Mod. Phys. 76(4), 1267–1305 (2004).

Styer, Daniel F.; Balkin, Miranda S.; Becker, Kathryn M.; Burns, Matthew R.; Dudley, Christopher E.; Forth, Scott T.; Gaumer, Jeremy S.; Kramer, Mark A.; Oertel, David C.; Park, Leonard H.; Rinkoski, Marie T.; Smith, Clait T.; Wotherspoon, Timothy D. Nine formulations of quantum mechanics. American Journal of Physics, vol. 70, no. 3, 288-297, 2002.

Tegmark, M. J. A. Many lives in many worlds, Nature preprint. arXiv:quant-ph/010107

Tegmark, M. The Interpretation of Quantum Mechanics: Many Worlds or Many Words?, arXiv:quant-ph/970903.

Tegmark, M., Wheeler, A. 100 Years of the Quantum, Scientific American, p. 68-75, January. 2001

Vaidman, L., On schizophrenic experiences of the neutron or why we should believe in the many-worlds interpretation of quantum theory, arXiv:quant-ph/9609006

Velleman, Daniel J., Probability and quantum mechanics. American Journal of Physics, vol. 66, no. 11, 967-969, 1998.

Wigner, E.P. The Problem of Measurement. American Journal of Physics 31, 6 (1963).

Yoder, G. Using classical probability functions to illuminate the relation between classical and quantum physics. American Journal of Physics, vol. 74, no. 5, 404-411, 2006.

Zeilinger, A. (1998). Quantum Entanglement: A Fundamental Concept Finding its Applications. Physica Scripta, T76(29): 203-209.

Zeilinger, A. (1999). A foundational principle for quantum mechanics. Foundations of Physics, 29(4): 631-643.

Zurek, Wojciech H. Decoherence and the Transition from Quantum to Classical, Physics Today 44(10), 36 (1991).

Zurek, Wojciech H. Decoherence and the Transition from Quantum to Classical—Revisited. Los Alamos Science, 27, 2. (2002).

Zurek, Wojciech H. Quantum Darwinism, classical reality, and the randomness of quantum jumps. Physics Today 67(10), 44 (2014).

A Biblioteca Digital hospedada na Universidade de Cornell (https://arxiv.org) é um repositório importante de artigos pré-publicados em todas as áreas de Física. Caso não tenha acesso à publicação original de referência, faça uma busca por título/autores nesse repositório.

Exemplo: O ultimo artigo de Zurek (Phys. Today) da relação anterior pode ser acessado e baixado em http://arxiv.org/abs/1412.5206.

Livros da Série MNPEF

SIMULAÇÃO E MODELAGEM COMPUTACIONAL COM O SOFTWARE MODELLUS: Aplicações práticas para o ensino de física
Marcelo Esteves de Andrade

A CONSTRUÇÃO DA ESTRUTURA CONCEITUAL DA FÍSICA CLÁSSICA
Antony M. M. Polito

MECÂNICA QUÂNTICA: Um curso para professores da Educação Básica
Silvana Perez

FÍSICA E MÚSICA
Maria Lúcia Grillo
Luiz Roberto Perez
(Organizadores)

MECÂNICA QUÂNTICA BÁSICA
Marcel Novaes
Nelson Studart

Nesta obra, a mecânica quântica é apresentada de forma introdutória, concisa e, de forma pioneira, sem recorrer a concepções da Física Clássica na apresentação de seus conceitos. Tópicos constantes de livros didáticos tradicionais, como a estrutura formal da teoria e suas aplicações são abordados, mas também considerável ênfase é dada a recentes avanços da Física como fenômenos eletrônicos em dimensões reduzidas, teleporte e computação quânticos, entre outros, assim como algumas das possíveis interpretações alternativas da teoria. Do ponto de vista metodológico, a obra propõe o uso intensivo de objetos educacionais, como vídeos, animações e simulações e traz uma lista de referências bibliográficas e midiáticas. Trata-se de um livro inovador, que poderá ser usado com proveito em cursos de licenciatura, bacharelado e mestrado profissional da área de Ciências Exatas.

CAPES
SBF SOCIEDADE BRASILEIRA DE FÍSICA
MNPEF Mestrado Nacional Profissional em Ensino de Física
LF EDITORIAL

ISBN 978-85-7861-426-3