

Introdução à Mecânica Quântica

Oscar J. P. Éboli

**Instituto de Física
Universidade de São Paulo
Caixa Postal 66.318
05315-970 São Paulo, SP**

Fevereiro de 2004

Capítulo 1

Introdução

1.1 Mecânica Clássica

A evolução temporal de corpos macroscópicos é muito bem descrita pela Mecânica Clássica. Segundo esta, o estado de uma partícula é especificado através da sua posição (\mathbf{x}) e da sua velocidade ($\dot{\mathbf{x}}$) em relação a um dado referencial inercial. É importante notar que no contexto da Mecânica Clássica estas duas quantidades ($\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}$) podem ser medidas *simultaneamente* com precisão arbitrária.

Observáveis, *i.e.* quantidades mensuráveis tais como momento linear, momento angular e energia, são funções de ponto $\mathcal{O}(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}})$. Portanto, conhecido o estado ($\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}$) do sistema num dado instante, o valor dos observáveis encontra-se univocamente determinado.

Dada uma condição inicial do sistema ($\mathbf{x}(t_0)$ e $\dot{\mathbf{x}}(t_0)$) sua evolução temporal é regida pela segunda lei de Newton

$$m\ddot{\mathbf{x}} = \mathbf{F}(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}; t) , \quad (1.1)$$

onde m é a massa da partícula e \mathbf{F} é a força total agindo sobre esta. Outra característica importante da Mecânica Clássica é que ela é determinística, isto é, dada a condição inicial e as forças que agem sobre o sistema, o resultado de qualquer medida feita sobre o sistema pode ser calculado utilizando-se a Eq. (1.1).

Uma maneira elegante de apresentar o formalismo da Mecânica Clássica é através da formulação Lagrangiana, a qual está baseada no

princípio da mínima ação. Este nada mais é do que requerer que a ação

$$S = \int_{t_i}^{t_f} dt \mathcal{L}(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) \quad (1.2)$$

seja estacionária com respeito a variações de $\mathbf{x}(t)$, onde \mathcal{L} é a Lagrangiana do sistema. Para sistemas simples, temos que $\mathcal{L} = \frac{m}{2} \dot{\mathbf{x}}^2 - V(\mathbf{x})$, onde V é o potencial associado às forças (conservativas) que agem sobre o sistema. Impondo-se que S seja estacionária, obtemos as equações de Euler-Lagrange para o movimento

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_i} = 0 . \quad (1.3)$$

Muitas vezes é conveniente utilizar a formulação Hamiltoniana da Mecânica Clássica, a qual é obtida através de uma transformação de Legendre de \mathcal{L} em relação à variável $\dot{\mathbf{x}}$. Definimos o momento canonicamente conjugado à variável \mathbf{x}_i por

$$\mathbf{p}_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{x}}_i} , \quad (1.4)$$

e a Hamiltoniana \mathcal{H} através de

$$\mathcal{H}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{x}} - \mathcal{L} . \quad (1.5)$$

Nesta formulação o estado do sistema é especificado através de \mathbf{x} e \mathbf{p} sendo que estas duas quantidades também podem ser medidas *simultaneamente* com precisão arbitrária. A evolução temporal das variáveis canonicamente conjugadas \mathbf{x} e \mathbf{p} é governada por

$$\frac{d\mathbf{x}_i}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}_i} , \quad (1.6)$$

e

$$\frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{x}_i} . \quad (1.7)$$

Estas equações podem ser reescritas usando-se os *colchetes de Poisson*:

$$\frac{d\mathbf{x}_i}{dt} = \{\mathcal{H}, \mathbf{x}_i\} , \quad (1.8)$$

$$\frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = \{\mathcal{H}, \mathbf{p}_i\} , \quad (1.9)$$

onde temos que

$$\{A, B\} \equiv \sum_i \left[\frac{\partial A}{\partial \mathbf{p}_i} \frac{\partial B}{\partial \mathbf{x}_i} - \frac{\partial A}{\partial \mathbf{x}_i} \frac{\partial B}{\partial \mathbf{p}_i} \right]. \quad (1.10)$$

1.2 Problemas da Física Clássica

Apesar de todo o seu sucesso no tratamento de fenômenos macroscópicos a Física Clássica não oferece uma boa descrição dos fenômenos microscópicos. Classicamente existem dois conceitos distintos, a saber, ondas e partículas. Em escalas macroscópicas de distâncias, os fenômenos são corretamente descritos apenas por um destes conceitos. Todavia, durante o final do século XIX e o início do século XX, foram coletadas muitas informações experimentais que conduziram ao abandono da Física Clássica, principalmente no que tange as características ondulatórias e corpusculares dos fenômenos. Dentre os experimentos históricos gostaríamos de destacar

- *Radiação de corpo negro*: Para explicar a radiação eletromagnética emitida por um corpo em equilíbrio térmico, Planck postulou que a energia eletromagnética não varia continuamente, mas sim é um múltiplo de um pacote mínimo de energia.

- *Efeito fotoelétrico*: Este foi descoberto por Hertz em 1897 e explicado por Einstein através da hipótese de que a luz é constituída de uma coleção de partículas (*quanta*), as quais possuem uma energia $h\nu$, onde ν é a frequência da luz e h é a constante de Planck; $h = 6,626 \times 10^{-27}$ erg · s.

- *Efeito Compton*: Em 1924 Compton descobriu que a radiação eletromagnética na região de raios X não era espalhada de modo consistente com a sua natureza ondulatória dado que em colisões a radiação comporta-se como um feixe de partículas as quais possuem energia $h\nu$ e momento $h\nu/c$, onde c é a velocidade da luz.

Estes três fatos sugerem fortemente que a radiação eletromagnética comporta-se como uma partícula quando interage com outros sistemas, assim exibindo uma dualidade: um comportamento corpuscular nas

suas interações, enquanto que na propagação o comportamento é ondulatório já que exibe interferência e difração.

Esta não é a única situação em que temos uma dualidade, dado que em 1927 Davisson e Germer observaram pela primeira vez a difração de elétrons, mostrando assim que matéria e radiação possuem as “mesmas características”, a saber, a propagação é ondulatória, enquanto que em colisões (interações) temos o aparecimento de um comportamento corpuscular.

É “natural” associar-se a partículas livres uma onda plana da forma

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x} - Et)/\hbar} , \quad (1.11)$$

o que equivale a dizer que o comprimento de onda associado a essa partícula é dado por $\lambda = h/p$ e que sua frequência obedece a $\omega = E/\hbar$, onde $\hbar = h/2\pi = 1,054 \times 10^{-27}$ erg · s.

É importante não esquecer que há mais de um século acumulamos informações sobre o comportamento da matéria e radiação a pequenas distâncias, e que até hoje não existe evidência que contrarie as previsões da Mecânica Quântica. Mais ainda, muito de nossa tecnologia atual está baseada em propriedades da Mecânica Quântica. Por exemplo, toda a eletrônica que utilizamos de maneira essencial no nosso dia a dia é governada pela Mecânica Quântica.

1.3 Relações de incerteza

Como veremos a seguir, a propagação ondulatória das partículas juntamente com a relação de de Broglie $p = \hbar k$ conduzem à relação de incerteza

$$\hbar \Delta k \Delta x = \Delta p \Delta x \geq \hbar , \quad (1.12)$$

a qual significa que não podemos medir **simultaneamente** a posição e o momento de uma partícula com precisões arbitrárias. Isto não impede de podermos medir, por exemplo, x com uma precisão arbitrária desde que não nos preocupemos em medir p . Isto é uma grande mudança em relação à Mecânica Newtoniana, pois esta assume que podemos medir simultaneamente estas quantidades com uma precisão absoluta.

É importante frisar que estes erros Δx e Δp são intrínsecos da natureza ondulatória da matéria e não estão correlacionados com os erros experimentais tradicionais dos processos de medida.

Analisemos algumas situações físicas muito simples, as quais permitem que compreendamos que as relações de incerteza têm origem na natureza ondulatória da matéria, bem como algumas de suas conseqüências. A prova formal destas relações será feita mais adiante em outro capítulo.

1.3.1 Exemplo: medidas de posição

Suponhamos que as medidas de posição são feitas utilizando-se o dispositivo que se encontra na figura 1.1.

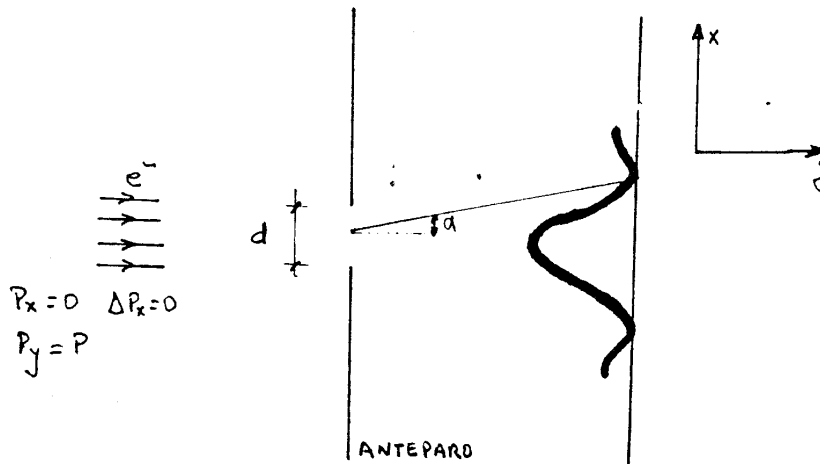


Figura 1.1: Difração através de uma fenda.

A posição da partícula ao longo do eixo x é determinada pelo centro do anteparo e a precisão desta medida é dada pelo largura do orifício, $\Delta x \simeq d$. Para simplificar suporemos que inicialmente a partícula possuía $p_x = 0$, $\Delta p_x = 0$ e $p_y = p$. Após atravessar o anteparo, temos a formação de uma figura de difração, por causa do caráter ondulatório da matéria, a qual significa que temos uma incerteza no momento da

partícula $\Delta p_x \simeq p \sin \alpha$, onde α é o ângulo correspondente à posição do primeiro mínimo de difração; vide a figura 1.1. Todavia, sabemos desde a pré-escola que $\sin \alpha = \lambda/d = h/p\Delta x$. Portanto, temos que

$$\Delta p_x \Delta x \simeq \frac{h}{\lambda} \frac{\lambda}{\Delta x} \Delta x = h. \quad (1.13)$$

Logo, a natureza ondulatória da matéria (no caso difração) implica que medidas de posição de uma partícula introduzem incertezas no seu momento. Mais ainda, este experimento fictício permite-nos observar que as medidas destroem informações que foram obtidas em experimentos anteriores, já que neste caso o valor de Δp_x foi modificado. Isto ocorre porque ao medirmos uma determinada grandeza devemos interagir com o sistema perdendo assim informação sobre outras grandezas, já que as interações não podem ser desprezadas na física microscópica.

Poderíamos também imaginar que seria possível medir o momento do anteparo na direção x e com isso determinar p_x da partícula com precisão arbitrária, usando a conservação do momento. Analisemos duas situações, a saber, na primeira o anteparo é clássico enquanto na outra ele é quântico. No primeiro caso, mediríamos com precisão absoluta o momento \mathbf{p}_x do anteparo, o que nos permitiria obter o momento do elétron com qualquer precisão. Todavia, isto é incompatível com a existência da difração! Logo, esta hipótese deve ser abandonada. No caso do anteparo também exibir um comportamento ondulatório não conseguiremos medir com precisão absoluta o seu momento na direção x . Para o anteparo ser um bom instrumento de medida de posição, devemos ter $\Delta x|_{\text{part}} \gg \Delta x|_{\text{ante}}$, o que implica que $\Delta p_x|_{\text{ante}} \simeq h/\Delta x|_{\text{ante}} \gg h/\Delta x|_{\text{part}}$. Logo medir o momento do anteparo não nos ajuda a evadir as limitações impostas pela relação de incerteza (1.12).

Este último raciocínio também nos conduz ao seguinte fato: **Se alguma partícula obedece às relações de incerteza (dualidade onda-partícula), então todas as que interagem com ela devem satisfazer estas relações (dualidade)**. Isto é necessário para garantir a estrutura lógica da teoria, senão poderíamos realizar as medidas sobre as partículas que não obedecem as relações de incerteza e obter, através das leis de conservação, medidas simultâneas arbitrariamente

precisas para sistemas que obedecem às relações de incerteza. Logo, a dualidade onda-partícula têm um **caráter universal**.

Como um primeiro exemplo, consideremos um sistema com prótons, nêutrons e elétrons interagindo entre si.¹ Uma vez que os elétrons exibem uma dualidade onda-partícula, os prótons e nêutrons também devem possuir esta propriedade. De fato existem experimentos que demonstram a existência da difração para estas partículas. Como segundo exemplo desta universalidade consideremos o campo eletromagnético. Uma vez que este interage com elétrons, que satisfazem relações de incerteza, a radiação eletromagnética deve possuir a dualidade onda-partícula, e conseqüentemente devem existir relações de incerteza envolvendo as componentes dos campos elétrico e magnético. De fato, é possível mostrar que existem relações do tipo

$$\Delta E_x \Delta H_z \geq \frac{hc}{(\delta l)^4}, \quad (1.14)$$

onde δl é uma distância característica do arranjo experimental utilizado para estas medidas simultâneas.

Analise agora um exemplo que mostra que as relações de incerteza são as guardiãs da estrutura lógica da Mecânica Ondulatória, *i.e.* as relações de incerteza impedem que os caracteres corpuscular e ondulatório da matéria (radiação) apareçam *simultaneamente* no mesmo experimento.

1.3.2 Exemplo: Interferência de duas fendas

Classicamente a trajetória de uma partícula pode ser conhecida precisamente, sendo natural saber-se por qual fenda uma partícula transpõe um obstáculo com duas aberturas. Logo, a nossa intuição clássica leva-nos a desejar identificar por qual orifício um elétron passa num obstáculo com duas fendas, quando estudamos a figura de interferência após a passagem por este aparato. Mostraremos que não é possível revelar *simultaneamente* a natureza corpuscular e ondulatória do elétron neste tipo de experimento, uma vez que a observação da fenda pela qual

¹Lembre-se que toda a matéria é composta por estas partículas.

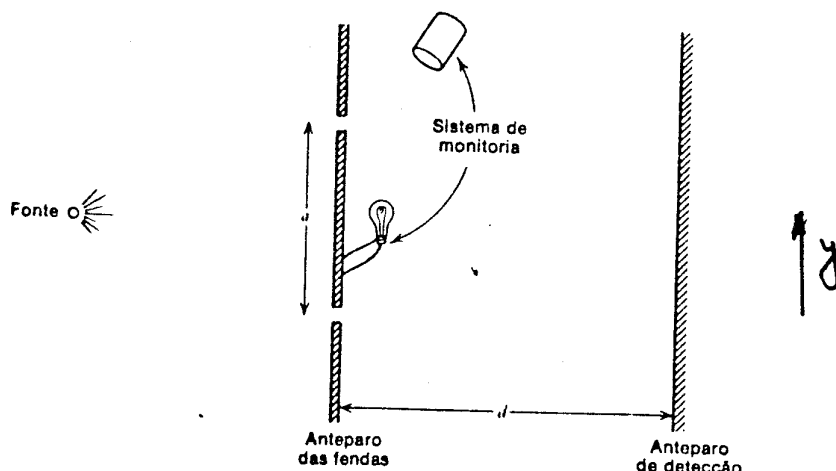


Figura 1.2: Difração através de uma fenda.

ele passou destruirá a figura de interferência. Para tanto, consideremos o aparato descrito na figura 1.2

A localização dos máximos (interferência construtiva) neste sistema satisfazem a $\sin \theta = n\lambda/a$, onde n é um inteiro e λ é o comprimento de onda das partículas incidentes. Logo, a distância entre máximos adjacentes é dada por $d \sin \theta_{n+1} - d \sin \theta_n = d\lambda/a$.

Para monitorarmos por qual fenda o elétron passou devemos determinar sua posição na região do anteparo com uma precisão $\Delta y < a/2$. Isto implica numa incerteza $\Delta p_y \geq 2h/a$ em seu momento p_y . Esta incerteza faz com que a posição aonde o elétron é observado no anteparo tenha uma incerteza $2\lambda d/a$, devido ao fato de medirmos por qual fenda ele passou. Mas isto destrói a figura de interferência já que esta incerteza adicional é maior que a distância entre dois máximos adjacentes figura 1.2!

Este exemplo ilustra claramente que a existência de relações de incerteza garante a coerência lógica da dualidade onda-partícula, já que

elas não possibilitam a observação dos dois tipos de comportamento simultaneamente. Mais ainda, é importante notar a partir dos exemplos acima que ao efetuarmos medidas em um sistema nós o perturbamos de maneira incontrollável, conduzindo-o para um novo estado e com a consequentemente perda de informação.

1.4 Estimativas de ordem de magnitude

No dia a dia, podemos usar as relações de incerteza para estimar a ordem de grandeza de algumas quantidades. Para tanto é comum assumir que algumas variáveis tenham um erro da mesma ordem de magnitude do seu valor. No fundo mesmo, estas estimativas são exercícios de análise dimensional mais sofisticados. Ilustremos estes procedimentos com dois exemplos.

1.4.1 Exemplo: Átomo de hidrogênio

Estimemos a energia (E_0) do estado fundamental de um átomo de hidrogênio. A expressão para a energia de um elétron no campo elétrico de um próton é dada por

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} . \quad (1.15)$$

Agora assumimos que $\Delta x \sim r$ e que $\Delta p \sim p$. Logo, temos que E pode ser expressa apenas em termos de r , uma vez que a partir da nossa hipótese segue que $rp \sim \hbar$.

$$E = \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r} . \quad (1.16)$$

Minimizando-se E com respeito a r obtemos que

$$\frac{\partial E}{\partial r} = -\frac{\hbar^2}{mr^3} + \frac{e^2}{r^2} = 0 . \quad (1.17)$$

Portanto, o valor r_0 que minimiza E é dado por

$$r_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = \frac{\hbar}{mca} , \quad (1.18)$$

onde $\alpha = e^2/\hbar c \simeq 1/137$ é a constante de estrutura fina. Substituindo-se r_0 na Eq. (1.16), obtemos que

$$E_0 = -\frac{1}{2}mc^2\alpha^2, \quad (1.19)$$

o qual é o valor correto da energia do estado fundamental do átomo de hidrogênio. Neste ponto você deve estar se sentindo ludibriado, e com toda a razão! O procedimento acima é apenas uma maneira para obter uma estimativa da ordem de grandeza da energia e para tanto fizemos muitas hipóteses sobre r e p , as quais poderiam ser diferentes, resultando num outro valor para E_0 , o qual ainda seria uma *estimativa* razoável da ordem de magnitude desta energia.

Não obstante sua simplicidade, este exemplo possibilita-nos entender o porquê dos átomos serem estáveis: apesar de E decrescer para $r \rightarrow 0$, devemos para tanto localizar muito bem o elétron, surgindo assim uma grande incerteza no momento, que estabiliza o sistema.

1.4.2 Exemplo: Grandezas nucleares

Podemos estimar a ordem de magnitude de grandezas nucleares usando as relações de incerteza. Para tanto, mais uma vez assumimos que $\Delta x = r$ e que $\Delta p = p$. Neste caso a energia cinética de um nucleon é dada por

$$E_{\text{nucl}} \simeq \frac{p^2}{2M_{\text{nucl}}} \simeq \frac{\hbar^2}{2M_{\text{nucl}}(\Delta x)^2}. \quad (1.20)$$

Uma vez que $\Delta x \simeq 10^{-13}$ cm, temos que $E_{\text{nucl}} \simeq 20$ MeV, que é a escala correta de fenômenos nucleares.

1.4.3 Relação de incerteza $\Delta E \Delta t$

Além das relações de incerteza envolvendo momento e posição também existe uma relação entre tempo e energia. Usemos um argumento heurístico para obtê-la. Consideremos por simplicidade uma partícula livre unidimensional cuja energia é dada por $p^2/2m$. A existência de

uma incerteza em p induz uma incerteza na sua energia dada por

$$\Delta E = \frac{\partial E}{\partial p} \Delta p = \frac{p}{m} \Delta p = v \Delta p, \quad (1.21)$$

onde v é a velocidade da partícula (onda). Consideremos um observador fixo que vê a passagem da onda associada a esta partícula. Segundo este observador o tempo que a partícula demora para passar por sua posição é dado por

$$\Delta t = \frac{\Delta x}{v} \simeq \frac{\hbar}{v \Delta p} = \frac{\hbar}{\Delta E}. \quad (1.22)$$

Conseqüentemente, temos que

$$\Delta E \Delta t \simeq \hbar. \quad (1.23)$$

A interpretação deste resultado é que a precisão ΔE com que conseguimos medir a energia de uma partícula está limitada por $\Delta E \geq \hbar/\Delta t$, onde Δt é o tempo utilizado para efetuar-se a medida. Intuitivamente isto ocorre pois medidas de energia envolvem a análise da evolução temporal do sistema, e esta análise é mais precisa quando observamos o sistema por um período longo de tempo.

A existência das diversas relações de incerteza está ligada ao carácter ondulatório da matéria. Para entendermos isto, vejamos de outra maneira o aparecimento da relação de incerteza energia-tempo. Dada uma onda $\Psi(\mathbf{x}, t)$ podemos expressá-la em termos da sua transformada de Fourier em relação a \mathbf{x} e t

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \int d\omega \int d\mathbf{k} g(\omega, \mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t)}. \quad (1.24)$$

Se desejarmos analisar apenas a parte temporal, podemos integrar em \mathbf{k} , obtendo que

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \int d\omega f(\omega, \mathbf{x}) e^{-i\omega t}. \quad (1.25)$$

Logo, utilizando as propriedades da transformada da Fourier segue que

$$\Delta\omega \Delta t \geq \mathcal{O}(1), \quad (1.26)$$

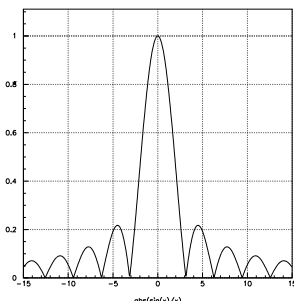


Figura 1.3: Gráfico de $|\frac{\sin(x)}{x}|$.

onde $\Delta\omega$ (Δt) é a região onde Ψ (f) é diferente de zero. Uma vez que $E = \hbar\omega$ temos que

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar . \quad (1.27)$$

Para melhor compreendermos a propriedade (1.26) consideremos o seguinte exemplo. Para um dado ponto fixo do espaço, assumimos que a função f seja não nula apenas para

$$f(\omega) = A \text{ se } 0 \leq \omega \leq \Delta\omega , \quad (1.28)$$

onde A é uma constante. Utilizando (1.26) temos que

$$\Psi(t) = \frac{2A}{t} \sin\left(\frac{t\Delta\omega}{2}\right) e^{-i\frac{t\Delta\omega}{2}} . \quad (1.29)$$

Esta função é fortemente picada em $t = 0$ como podemos ver a partir da figura 1.3. Considerando que a incerteza no tempo da passagem da onda seja da ordem da distância entre o seu maior zero negativo ($-2\pi/\Delta\omega$) e seu menor zero positivo ($2\pi/\Delta\omega$), temos que

$$\Delta t \Delta\omega \simeq 4\pi .$$

Cumprе salientar que essa propriedade é geral, não se restringindo a forma específica que escolhemos para a função f . Desafio: demonstre este fato.