Mecânica Quântica

Exercício 1.

Revisamos brevemente os conceitos mais fundamentais de álgebra linear ao longo das últimas semanas. Os conceitos de escalares, vetores e operadores foram abordados. Também vimos que somos capazes de definir projeções entre vetores e, portanto, ângulos entre os mesmos. No que segue, considere o vetor

$$|\psi\rangle = c_1|1\rangle + c_2|2\rangle, \tag{1}$$

onde $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$.

i. Se os vetores $|1\rangle$ e $|2\rangle$ são linearmente dependentes, quanto vale $|\psi\rangle$? Ainda segundo esta hipótese, qual é a norma de $|\psi\rangle$? Represente graficamente ou utilizando representação matricial (colunas), como achar conveniente.

ii. Vamos assumir que $|1\rangle$ e $|2\rangle$ são linearmente independentes daqui em diante. Qual a condição que devem satisfazer? Verifique tal condição utilizando a representação matricial (vetores linhas e colunas). Qual a norma de $|\psi\rangle$ neste caso? Compare com o resultado anterior.

iii. Escreva um vetor normalizado $|\psi'\rangle$ a partir de $|\psi\rangle$. Um vetor normalizado possui norma unitária, $\langle\psi'|\psi'\rangle = 1$.

iv. Considere um segundo vetor $|\varphi'\rangle = (|1\rangle + |2\rangle)/\sqrt{2}$. Encontre valores para c_1 e c_2 tal que $|\psi'\rangle$ seja ortogonal a $|\varphi'\rangle$.

v. Utilizando os valores de c_1 e c_2 do item anterior, os novos vetores $|\psi'\rangle$ e $|\varphi'\rangle$ podem ser utilizados como base? É possível escrever os vetores $|1\rangle$ e $|2\rangle$ em termos dessa nova base? Justifique e interprete seus resultados.

Exercício 2.

Considere o conjunto de pontos da Figura 1. Os pontos encontram-se a uma distância a dos seus vizinhos a esquerda/direita e acima/abaixo de maneira regular, formando uma rede com 3×3 (9 pontos). Existem diversas maneira de representar qualquer um dos pontos em relação aos demais. Três representações são de grande interesse físico: vetores cartesianos, vetores posição e vetores enumerados.

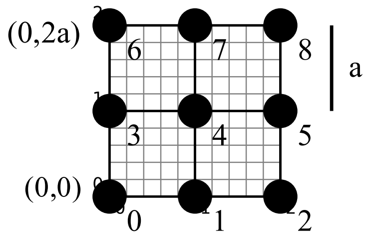

Figura 1.

Vetor cartesiano $|v_c\rangle$ é aquele que provavelmente você está habituado: dado um ponto de origem, define-se uma base de dimensão 2 (já que o exemplo é bidimensional), normalmente $|x\rangle$ e $|y\rangle$, tal que $|v\rangle \equiv x|x\rangle + y|y\rangle$.

Vetores posição $|\vec{r}\,\rangle \equiv |(x, y)\rangle$ são muito mais usados em Mecânica Quântica. Dado uma origem, um vetor posição $|\vec{r}\,\rangle$ é identificado também por dois números (x, y). Diferentemente do caso cartesiano, se dois pontos são *distintos* seu produto escalar é nulo.

Vetor enumerado $|k\rangle \equiv |x + y \times L_x\rangle$ (L_x é o número de pontos na direção $\vec{x}$) são equivalentes aos vetores posição $|\vec{r}\,\rangle$ mas escritos numa forma mais conveniente para redes com certa regularidade e para descrição em termos de matrizes. Associa-se a cada ponto um índice k, com a origem em um dos vértices. Por exemplo, o ponto $(0,0)$ é representado pelo vetor enumerado $|0\rangle$, enquanto o ponto $(2a,0)$ é representado pelo vetor $|2\rangle$ e o ponto $(0,a)$ pelo vetor $|3\rangle$ para $L_x = 3$.

i. A dimensão do espaço vetorial é dada pelo número de elementos que constituem a base. Qual a dimensão do espaço vetorial das representações expostas no enunciado? E se o conjunto de pontos fosse infinito (diferentemente do caso ilustrado na figura), o que mudaria?

ii. Descreva o ponto com coordenadas $(2a,\, 1a)$ nas três representações. Calcule a norma em cada caso.

iii. Operadores: Rotação. Uma rotação é uma transformação geométrica que leva um vetor de uma configuração (ponto) a outra (outro ponto) sem alterar seu módulo. Por exemplo, $R_z(\pi/2)\colon (1a,0) \to (0,1a)$. Mostre graficamente que essa operação é a *mesma*, indendentemente da representação vetorial escolhida. Feito isto, represente a rotação de $\pi/2$ ao redor do eixo z, na origem, nas representações cartesianas e enumeradas.

iv. Este item não é um exercício mas mera reflexão. Um função $\psi(x,\, y)$ assume valores numéricos para cada ponto $(x,\, y)$. $|\psi\rangle$ então pode ser interpretado como um configuração de *todos* os pontos, isto é, uma combinação linear: $|\psi\rangle = \psi(0,0)|(0,0)\rangle + \psi(1a,\, 0)|(1a,\, 0)\rangle + \ldots$, de modo que $\psi(x,\, y) = \langle \vec{r}\,|\psi\rangle$. Esta é a função de onda que será amplamente estudada ao longo do curso.

Exercício 3.

Estamos muito acostumados a representar posições de objetos através de vetores em sistemas de coordenadas cartesianas. Queremos aqui aprofundar o conceito de vetor e conectá-los com quantidades e grandezas físicas tipicamente utilizadas no laboratório. Em particular, vamos abordar o conceito de independência linear. Este assume uma interpretação física muito diferente para quem inicia na área e, por isso, merece atenção especial.

Tomemos como exemplo o spin[1] s_z do elétron, que pode assumir os valores $s_z = \pm\hbar/2$ aos quais associamos os seguintes vetores: $|\uparrow\rangle$ com $s_z = \hbar/2$ e $|\downarrow\rangle$ com $s_z = -\hbar/2$. Dois elétrons, ambos com spins $s_z = \hbar/2$, podem ser descritos pelo vetor $|\uparrow\uparrow\rangle$.

A partir do parágrafo acima responda:

i. Qual o spin total S_z do vetor $|\uparrow\uparrow\rangle$? Como chegou a essa conclusão?

ii. Quais os possíveis valores que S_z pode assumir?

iii. Para $S_z = -\hbar$, encontre o vetor que o descreve corretamente. Qual a dependência linear com o vetor $|\uparrow\uparrow\rangle$?

iv. Faça o mesmo para todos os outros valores. Qual a dificuldade encontrada?

v. Utilizando o conceito de independência linear, construa dois vetores únicos que caracterizem os estados restantes.

vi. Repita (se achar necessário) o mesmo procedimento agora para três elétrons.

Exercício 4. Desafio

O princípio de exclusão de Pauli é muito conhecido por suas profundas implicações em diversas áreas do conhecimento. Sua descrição também é bastante simples: duas partículas com spin semi-inteiro não podem compartilhar *todos* os mesmos números quânticos. Para nós, isto significa que dois férmions distintos não podem compartilhar o mesmo estado quântico, ou vetor. Não queremos aqui explicar o teorema spin-estatística de Pauli mas sim nos familiarizar com a descrição de estados quânticos com objetos e fenômenos mais naturais.

1. Por hora, apenas assuma que o spin é uma propriedade intrínseca do elétron. Ao longo do curso veremos como estes estão associados às transformações de rotação e suas diversas propriedades.

Para as questões a seguir, considere um átomo hidrogenóide, isto é, elétrons estão sujeitos a forças centrais (Coulomb) e praticamente não interagem entre si.

i. O número quântico principal $n = 1, 2, \ldots$ é aquele associado com a distância do elétron ao núcleo atômico ($E_n \approx -13.6\text{eV}/n^2$). O elétron também possui spin s_z. Construa todos os possíveis vetores para $n = 1, 2$ e spin $s_z = -\hbar/2, +\hbar/2$. Quando o produto escalar entre estes vetores é não nulo? Por quê?

ii. Considere agora dois átomos de H *espacialmente* afastados. Quantos números quânticos são necessários para descrever o sistema? Faz sentido aplicar o princípio de Pauli para este caso? Construa alguns vetores como exemplo e justifique sua escolha.

iii. Agora considere dois elétrons (vamos assumir que não interagem entre si) no mesmo átomo hidrogenóide (He). Faz sentido aplicar o princípio de Pauli para este caso? Construa vetores como exemplo e justifique sua escolha.

Exercício 5.

Durante a primeira aula, discutimos a contextualização científica que levou à introdução e formulação dos conceitos da Física Moderna. No período compreendido entre 1905-1927, o desenvolvimento da teoria da relatividade (restrita) e da teoria quântica permitiram aos físicos a compreensão e explicação de fenômenos físicos em escalas atômicas. A definição precisa das escalas da teoria quântica, entretanto, muitas vezes não é algo trivial.

Queremos aqui que você seja capaz de descrever tais escalas fisica e numericamente. Para isso, para cada item listado a seguir, *estime* as grandezas de cada experimento. Em seguida, *compare* suas estimativas com valores característicos da teoria quântica (procure por grandezas nas referências do curso). A partir destas informações, conclua se o experimento pode ou não ser analisado através de argumentos clássicos. Justifique.

i. Uma esfera rígida de massa $m = 1\text{kg}$, sob ação da gravidade, com densidade uniforme e raio $r = 10\text{cm}$ é solta sobre um plano inclinado.

ii. Uma esfera rígida de massa $m = 1\text{kg}$, sob ação da gravidade, com densidade uniforme e raio $r = 10\text{nm}$ é solta sobre um plano inclinado.

iii. Um filamento metálico a uma certa temperatura T, quando iluminado por luz com comprimento de onda $\lambda \sim 100\text{nm}$, ejeta elétrons que posteriormente são detectados num detector com energia essencialmente cinética.

iv. Um filamento metálico e muito fino é mantido aquecido a uma temperatura $T \approx 600K$ em um extremo de uma cápsula (assuma vácuo no ambiente interno). Ainda no interior da cápsula, na outra extremidade, há uma pequena placa metálica conectada a um resistor. Este encontra-se externo a cápsula e onde mede-se uma tensão V da ordem de milivolts.

v. Um fio de cobre de raio $r = 1\text{cm}$ possui tipicamente $\rho \approx 10^{23}$ elétrons por cm^3. Quando sujeitos a um campo elétrico ($|E| = 5$ V/m), estes ganham energia cinética na direção contrária ao campo.

vi. O mesmo fio de cobre do item anterior mas agora com raio $r = 1\text{nm}$.

vii. Um supercondutor é mantido a uma temperatura $T = 10\text{nK}$, no vácuo e no escuro. Dentro do supercondutor, há uma fotomultiplicadora que de tempos em tempos produz sinal para diversos comprimentos de onda. Ao final de um intervalo de tempo longo, observa-se que sinais de algumas ondas possuem maior contagem que outros.

viii. Gato de Schrödinger[2]: um gato "esférico" de $m = 5\text{kg}$ (raio $r = 30\text{cm}$ e temperatura $T = 310K$) é confinado numa caixa com uma ampôla de veneno e um átomo de um elemento radioativo (que decai, digamos, por emissão de partícula α). A ampôla (super sensível) libera o veneno a partir do momento que detecta um evento de decaimento.

2. Não se preocupe em resolver este dilema: foram necessários quase 35 anos para se resolver esse paradoxo.