

Material de Estudos para Mecânica Quântica
Programa de Pós-Graduação em Física, UFMG

Versão 1 - Dezembro de 2019 - Ado Jorio e João Vitor Frossard

Versão 2 - Fevereiro de 2023 - Ado Jorio

Prefácio

Estas notas de aula estão em desenvolvimento e têm como base principal o livro “Quantum Mechanics: A Modern Development”, de Leslie E. Ballentine. Este livro foi escolhido por trazer uma abordagem moderna da mecânica quântica.

Note que a física quântica é aprendida no curso de graduação em física seguindo, geralmente, um desenvolvimento histórico. Baseia-se nos conceitos adquiridos, são apresentados os experimentos chave que demonstraram a insuficiência das teorias clássicas, como os problemas da catástrofe do ultravioleta em radiação térmica e o efeito fotoelétrico, e introduz-se uma nova teoria (a quântica), que explica a realidade, ao menos aquela relacionada ao “mundo quântico” das partículas elementares. Esta forma de aprendizado, entretanto, vem comumente acompanhada do desconforto em relação às inconsistências, às vezes aparentes, às vezes fundamentais, entre o “mundo quântico” e o “mundo clássico”.

Neste contexto, o curso de Mecânica Quântica da Pós-Graduação que trazemos aqui inverte a lógica. O estudante é convidado a apagar seus (pré)conceitos e reaprender a física dos primórdios, fundamentada em postulados, na álgebra linear e na teoria da probabilidade, e com isso compreender o que realmente sabemos, e em que fundamentos este conhecimento está embasado. No final, esperamos que o estudante saia com a clareza do que é a mecânica quântica, suas aplicações e seus limites, sem nenhum sentimento de desconforto em relação aos conceitos limitados da mecânica clássica.

Agradecemos aos professores Carlos H. Monken e Reinaldo O. Vianna pela leitura crítica e por importantes adições neste material. E também aos alunos que já fizeram o curso e contribuíram direta ou indiretamente para o desenvolvimento deste material.

Sumário

I	Parte 1 - Fundamentos	3
1	Pré-requisitos matemáticos	9
1.1	Álgebra Linear	9
1.1.1	Espaços vetoriais lineares	9
1.1.2	Produto interno (ou produto escalar)	11
1.1.3	Base de um estado vetorial	11
1.1.4	Espaço Euclidiano e Espaço de Hilbert	12
1.1.5	Desigualdades de Schwarz e do triângulo	13
1.1.6	Matrizes	13
1.1.7	Sobre a notação de Dirac	15
1.2	Operadores Lineares	16
1.2.1	Notação matricial para operadores	17
1.2.2	Traço de matrizes	18
1.2.3	Operador agindo em um bra	18
1.2.4	Produto externo	19
1.2.5	Produto tensorial e de Kronecker	19
1.2.6	Espaço fator	20
1.3	Operadores auto-adjuntos (Hermitianos)	21
1.3.1	Propriedades e definição	21
1.3.2	Projetor	22
1.3.3	Teorema espectral	23
1.3.4	O teorema espectral e as soluções reais em física	27
1.3.5	Teoremas importantes sobre operadores Hermitianos	28
1.4	Teoria de probabilidade	29
1.4.1	Definições iniciais	29
1.4.2	Axiomas da teoria da probabilidade	30
1.4.3	Eventos independentes	31
1.5	Distribuições de probabilidade	32
1.5.1	Distribuição binomial	33
1.5.2	Distribuição gaussiana	34

1.5.3	Momentos de uma distribuição	35
1.5.4	Frequência e probabilidade de um evento	36
1.6	Exercícios	36
2	A formulação da mecânica quântica	39
2.1	Postulados	39
2.2	Operadores de estado	40
2.3	Estados puros e estados não-puros	40
2.4	Distribuição de probabilidades	41
2.5	Algumas questões de interpretação	42
2.6	Exercícios	44
3	Cinemática e dinâmica quânticas	47
3.1	Transformações de estados e observáveis	47
3.2	Simetrias no espaço-tempo	49
3.3	Geradores do grupo de Galileu	50
3.4	Identificação dos operadores com as variáveis dinâmicas	52
3.4.1	Operador posição	52
3.4.2	Operador velocidade	53
3.4.3	Deslocamento temporal	53
3.4.4	Comutação canônica entre Q e H	54
3.4.5	Deslocamento espacial	54
3.4.6	Comutação canônica entre Q e P	55
3.4.7	Rotação de um ângulo infinitesimal e comutação canônica entre Q e J	55
3.4.8	Deslocamento no espaço de velocidades e comutação canônica entre Q e G	55
3.5	Formas específicas dos geradores do grupo de Galileu	56
3.5.1	Caso 1: Partícula livre sem graus de liberdade internos	56
3.5.2	Caso 2: Partícula com spin	59
3.5.3	Caso 3: Partícula interagindo com campos externos	60
3.6	Sistemas compostos	61
3.7	Equações de movimento	62
3.8	Simetrias e leis de conservação	65
3.9	Comentários sobre mecânica quântica relativística	66
3.10	Comentário final	67
3.11	Exercícios	67
4	Representação das coordenadas e aplicações	69
4.1	Representação na Base dos Autovetores de Q	69
4.2	Equação de onda e sua interpretação	70

4.3	Formação de estados ligados	73
4.3.1	Potencial esférico	73
4.3.2	O átomo de hidrogênio	76
4.3.3	Outros casos de interesse	77
4.4	Transformações de Galileu na equação de Schrödinger	78
4.5	Fluxo de probabilidade	79
4.6	Condições de continuidade nas funções de onda	80
4.7	Autofunções de energia da partícula livre	80
4.8	Tunelamento	80
4.9	Integrais de Caminho	83
4.9.1	Propagador	83
4.9.2	Convergência da integração de caminho	85
4.9.3	Limite clássico	86
4.9.4	Tempo imaginário e física estatística	86
4.9.5	Exemplo de cálculo do propagador: partícula livre	87
4.10	Exercícios	89
5	Representação de momento e aplicações	91
5.1	Representação de momento	91
5.1.1	Função de onda na representação de momento	92
5.2	Distribuição de momento em um átomo	93
5.3	Estruturas periódicas	94
5.3.1	O espaço recíproco	95
5.3.2	O teorema de Bloch e a estrutura eletrônica dos sólidos	96
5.4	Estrutura eletrônica do trans-acetileno	97
5.5	Considerações finais	100
5.6	Exercícios	101
6	O Oscilador Harmônico	103
6.1	Solução algébrica	104
6.2	Soluções na representação das coordenadas	108
6.3	Solução na representação de H	108
6.4	Exercícios	109
7	Momento angular	111
7.1	Autovalores e elementos de matriz	111
7.2	Forma explícita dos operadores de momento angular	114
7.3	Momento angular orbital	115
7.4	Spin	116
7.5	Rotações finitas	118
7.6	Rotações de 2π	119

7.7	Adição de momento angular	121
7.8	Rotação de corpo rígido	122
7.9	Teoria de grupos e momento angular	122
7.9.1	O grupo $SU(2)$	123
7.9.2	O grupo $SO(3)$	123
7.9.3	Grupos de Lie	123
7.9.4	Álgebras de Lie	124
7.10	Exercícios	124
8	Preparação e determinação de estados	127
8.1	Preparação de estados	128
8.2	Determinação de estados	131
8.3	Estados de sistemas compostos	134
8.4	Relações de indeterminação	139
8.5	Exercícios	141
9	Medidas e Interpretação de estados	143
9.1	Um exemplo de medição de spin (aparato de Stern-Gerlach)	143
9.2	Teorema geral da teoria das medidas	144
9.3	Interpretação do vetor de estado	145
9.3.1	O gato de Schrödinger	146
9.3.2	Consistência com a teoria da medida	146
9.3.3	Onde está a incerteza?	148
9.3.4	O “colapso” da função de onda	149
9.3.5	Considerações finais	151
9.4	Decoerência	151
9.5	Probabilidades conjuntas e condicionais	152
9.6	Exercícios	157
10	Formação de estados ligados	159
10.1	Potencial esférico	159
10.2	O átomo de hidrogênio	162
10.3	Teoria de perturbação para estados estacionários	164
10.4	Exercícios	166
II	Parte 2 - Aplicações	167
11	Partícula carregada em um campo magnético	169
11.1	Teoria clássica	170
11.2	Teoria quântica	172

11.3 Movimento em um campo magnético estático e uniforme . . .	174
11.4 Efeito Aharonov-Bohm	176
11.5 Efeito Zeeman	178
11.6 Exercícios	179
12 Fenômenos dependentes do tempo	181
12.1 Teoria de perturbação dependente do tempo	182
12.2 Relação de incerteza energia-tempo	185
12.3 Aproximação de dipolo elétrico para radiação atômica	186
12.4 Aproximação adiabática	189
12.5 Exercícios	192
13 Simetrias discretas	193
13.1 Simetria de inversão do espaço	193
13.2 Não-conservação de paridade	196
13.3 Simetria de reversão temporal	196
13.3.1 Reversão temporal da equação de Schrödinger	197
13.3.2 Representação das coordenadas	198
13.3.3 Representação de momento	199
13.3.4 Reversão temporal e spin	199
13.3.5 Reversão temporal ao quadrado	199
13.3.6 Teorema de Kramers	200
13.4 Teorema CPT	200
13.5 Exercícios	202
14 Limite clássico	203
14.1 Teorema de Ehrenfest	204
14.2 Equação de Hamilton-Jacobi e o potencial quântico	207
14.3 Trajetórias quânticas	209
14.4 O limite para grandes números quânticos	209
14.5 Aproximação de Wentzel, Kramers e Brillouin (WKB)	210
14.6 Exercícios	211
15 Mecânica Quântica do campo eletromagnético	213
15.1 Modos normais do campo	213
15.2 Operadores de campo elétrico e magnético	215
15.3 Energia de ponto zero	217
15.4 Força de Casimir	218
15.5 Os estados do campo eletromagnético	220
15.5.1 Estado de número de fótons - estados de Fock	220
15.5.2 Estados coerentes - laser	221

15.6	Emissão espontânea	224
15.7	Detectores de fótons e o Cenário de Interações	226
15.8	Funções de correlação	230
15.8.1	Propriedades matemáticas das funções de correlação	230
15.8.2	Correlação de primeira ordem: interferência	231
15.8.3	Correlações de segunda ordem	234
15.9	Coerência	235
15.9.1	Coerência de primeira ordem	235
15.9.2	Estados de m -fótons com modo único - coerência parcial	236
15.9.3	Radiação térmica filtrada	237
15.9.4	Coerência temporal em segunda ordem, bunching, anti-bunching e super-bunching	238
15.10	Exercícios	242
16	Teorema de Bell e suas consequências	243
16.1	O argumento de Einstein, Podolsky e Rosen	243
16.2	Correlações de spin	244
16.3	Desigualdades de Bell	246
16.4	Demonstração do Teorema de Bell	248
16.5	Correlações de polarização	249
16.5.1	Decaimento do positrônio	250
16.5.2	A cascata $J = 0 \rightarrow 1 \rightarrow 0$	251
16.5.3	Testes experimentais	251
16.6	Exercícios	254
17	Informação quântica	255
17.1	Estados quânticos como carregadores de informação	256
17.1.1	A entropia de Shannon	256
17.1.2	Bits e qubits	257
17.2	Alguns teoremas em informação quântica	258
17.3	Transmissão quântica de informação	260
17.3.1	Tipos relevantes de probabilidade	260
17.3.2	Transmissão de informação - alguns exemplos	261
17.4	Criptografia	264
17.4.1	Criptografia quântica	265
17.5	Emaranhamento	266
17.5.1	Definição de emaranhamento	266
17.5.2	Identificação de emaranhamento	267
17.5.3	O significado físico do emaranhamento	268
17.6	Teletransporte de estados quânticos	270
17.6.1	Realização experimental do teletransporte	272

17.7	Informação quântica de pares independentes	274
17.8	Mensuráveis	274
17.8.1	Observáveis locais	275
17.8.2	Observáveis não-locais de dois objetos	275
17.9	Computação quântica	275
17.9.1	Operações quânticas (portas quânticas)	276
17.9.2	Algumas portas quânticas impossíveis	278
17.9.3	Vantagens e aplicações da computação quântica	278
17.10	Informação quântica e os fundamentos da M.Q. (CARO ESTUDANTE, ESTA SEÇÃO AINDA ESTÁ EM DESENVOLVIMENTO. PODE HAVER ALGUMA FRAGILIDADE DE CONCEITO.)	281
17.10.1	Interpretação de estados quânticos	282
17.11	Exercícios	285
18	Partículas idênticas	287
18.1	Simetria de permutação	287
18.1.1	Sistemas de duas partículas	287
18.1.2	Sistemas de três partículas	288
18.2	Indistinguibilidade de partículas	290
18.3	O postulado de simetrização	291
18.4	Operadores de criação e aniquilação	292
18.4.1	Férmions	293
18.4.2	Mudanças de base	295
18.4.3	Bósons	296
18.4.4	Representação de operadores - segunda quantização	297
18.4.5	Teorema de Wick	300
18.5	Exercícios	301
19	Sistemas de muitos férmions	303
19.1	Troca	303
19.1.1	O mar de Fermi	304
19.1.2	A interação de troca	306
19.2	O método de Hartree-Fock	308
19.3	Teoria BCS de supercondutividade	310
19.3.1	Estado fundamental BCS	311
19.3.2	Transformações de Bogoliubov	311
19.3.3	Minimização da energia	313
19.3.4	Um modelo simples	315
19.4	Exercícios	316

<i>SUMÁRIO</i>	1
A Autovalores e autovetores de uma matriz	317
B Representação Irreduzível e o Lema de Schur	321
C Teoria de Grupos de Espaço	325

