

**UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ - UTFPR
MESTRADO PROFISSIONAL EM MATEMÁTICA EM REDE NACIONAL -
PROFMAT**

RUDNEI MACHADO

**O USO DA MECÂNICA QUÂNTICA PARA O ENSINO DE MATRIZES - UMA
PROPOSTA DIDÁTICA PARA APLICAÇÃO EM AULA**

CURITIBA

2019

RUDNEI MACHADO

**O USO DA MECÂNICA QUÂNTICA PARA O ENSINO DE MATRIZES - UMA
PROPOSTA DIDÁTICA PARA APLICAÇÃO EM AULA**

Dissertação apresentada ao Mestrado Profissional em Matemática em Rede Nacional da Universidade Tecnológica Federal do Paraná em Curitiba - PROFMAT-UTCT como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre.

Orientador: André Fabiano Steklain Lisbôa

CURITIBA

2019

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação

M149u Machado, Rudnei

O uso da mecânica quântica para o ensino de matrizes : uma proposta didática para aplicação em aula / Rudnei Machado.— 2019.

88 f.: il.

Disponível via World Wide Web.

Texto em português com resumo em inglês.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Programa de Mestrado Profissional em Matemática em Rede Nacional, Curitiba, 2019 .

Bibliografia: f. 85-88.

1. Matemática - Dissertações. 2. Matrizes (Matemática) - Estudo e ensino (Ensino médio). 3. Teoria quântica. 4. Álgebra linear. 5. Hilbert, Espaço de. 6. Prática de ensino. 7. Aprendizagem. 8. Abordagem interdisciplinar do conhecimento na educação. I. Lisbôa, Andre Fabiano Steklain, orient. II. Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Programa de Mestrado Profissional em Matemática em Rede Nacional. III. Título.

CDD: Ed. 23 – 510

Biblioteca Central do Câmpus Curitiba – UTFPR
Bibliotecária: Luiza Aquemi Matsumoto CRB-9/794

TERMO DE APROVAÇÃO DE DISSERTAÇÃO Nº 58

A Dissertação de Mestrado intitulada “O USO DA MECÂNICA QUÂNTICA PARA O ENSINO DE MATRIZES – UMA PROPOSTA DIDÁTICA PARA APLICAÇÃO EM AULA”, defendida em sessão pública pelo candidato Rudnei Machado, no dia 14 de dezembro de 2018, foi julgada para a obtenção do título de Mestre, área de concentração Matemática, e aprovada em sua forma final, pelo Programa de Pós-Graduação em Matemática em Rede Nacional.

BANCA EXAMINADORA:

Prof. Dr. André Fabiano Steklain Lisbôa - Presidente – UTFPR

Prof. Dr. Francisco Itamarati Secolo Ganacim – UTFPR

Prof. Dr. Edgard Pacheco Moreira Amorim - UDESC

A via original deste documento encontra-se arquivada na Secretaria do Programa, contendo a assinatura da Coordenação após a entrega da versão corrigida do trabalho.

Curitiba, 14 de dezembro de 2018.

Carimbo e Assinatura do(a) Coordenador(a) do Programa

AGRADECIMENTOS

À Deus: autor e fonte de todo o conhecimento.

À minha esposa Lucilene, meu porto seguro em meio a tantas dificuldades e percalços que apareceram no caminho. Jamais me deixou desanimar e me desmotivar. Sempre lembrava que Deus nos capacita conforme as nossas necessidades.

À minha família: meus filhos Laura e Miguel, pelo tempo que o papai teve que dedicar aos estudos e não a vocês. Meus pais Bento e Margarida, Sogros Olívio e Íria, e aos meus cunhados e cunhadas por todo apoio e compreensão nas horas de minha dedicação aos estudos.

Ao Prof. André Fabiano Steklain Lisbôa, meu orientador, apoiador, pessoa que soube tirar de mim o meu melhor, melhor este, que nem eu sabia que existia. Meu muito obrigado pelas diversas conversas e por que não dizer aulas. Pela análise detalhada, correção e sugestões de modificação. Você professor, me motivou e me motiva a seguir adiante nessa carreira de educador. Obrigado por ser incentivador da busca do conhecimento e aprimoramento no desenvolvimento de novas roupagens para o ensino de física e matemática.

Aos membros da banca examinadora pelos comentários, sugestões e contribuições, que ajudaram a melhorar a qualidade e a redação final desta dissertação.

À Sociedade Brasileira de Matemática, pela idealização e pela manutenção do excelente programa de mestrado - PROFMAT.

À Sociedade Brasileira de Física, pela minha escolha na participação do curso CERN/The Portuguese Language Teacher Programme, que me possibilitou uma inserção sem igual no mundo da física de partículas; auxiliando mais ainda na minha dissertação. De modo especial aos professores Dr. Nilson Marcos Dias Garcia e ao Dr. Nelson Barrelo Júnior, coordenadores da Escola de Física CERN.

Ao LIP - Laboratório de Instrumentação de Partículas de Lisboa, representado na pessoa do prof. Dr. Pedro Abreu, por possibilitar que o Brasil participe do CERN/The Portuguese Language Teacher Programme.

Ao CERN - European Organization for Nuclear Research, gestora do CERN/The Portuguese Language Teacher Programme, onde se encontra o maior acelerador de partículas do mundo - o LHC (Large Hadron Collider), curso de altíssimo nível, com excelente formação acadêmica.

A todos que de alguma forma contribuíram com o meu progresso como aluno, como educador e como pessoa.

"Do or do not. There is no try."(Master Yoda, Star Wars)

RESUMO

MACHADO, Rudnei. O USO DA MECÂNICA QUÂNTICA PARA O ENSINO DE MATRIZES - UMA PROPOSTA DIDÁTICA PARA APLICAÇÃO EM AULA. 88 f. Dissertação. - Programa de Mestrado Profissional em Matemática em Rede Nacional - PROFMAT, Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Curitiba, 2018.

Este trabalho traz uma breve apresentação histórica do desenvolvimento da física de partículas, passando pelas grandes descobertas e seus respectivos descobridores. Faz-se uma revisão dos conceitos pertinentes de Álgebra Linear e tópicos relacionados. Apresenta-se o conceito de spin, sistemas de dois níveis e as matrizes envolvidas. Por fim, propõe-se uma atividade envolvendo conteúdos multidisciplinares – física, química e matemática, para trabalhar conceitos envolvendo matrizes.

Palavras-chave: Matrizes; Mecânica Quântica; Spin.

ABSTRACT

MACHADO, Rudnei. THE USE OF QUANTUM MECHANICS FOR TEACHING MATRICES - A TEACHING PROPOSAL FOR CLASS APPLICATION. 88 f. Dissertation. - Professional Master's Program in Mathematics in National Network - PROFMAT, Federal Technological University of Paraná. Curitiba, 2018.

This work presents a brief historical introduction of the development of particle physics, through the great discoveries and their respective discoverers. It reviews the relevant concepts of Linear Algebra and related topics. We present the concept of spin, two-level systems and the matrices that are involved. Finally, we propose an activity involving multidisciplinary contents - physical, chemical and mathematical, to work concepts involving matrices.

Keywords: Matrices; Quantum Mechanics; Spin.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Radiação de corpo negro para uma temperatura de 9000K. As regiões coloridas correspondem aos comprimentos de onda da radiação visível.	23
Figura 2 – Equação de Schrödinger.	25
Figura 3 – Equação de Dirac.	26
Figura 4 – Bola de Bilhar - Modelo atômico de Dalton.	27
Figura 5 – Modelo atômico de Thompson.	28
Figura 6 – Experimento de Rutherford.	29
Figura 7 – Modelo atômico de Bohr.	30
Figura 8 – Experimento de Stern-Gerlach.	30
Figura 9 – Resultado obtido no experimento de Stern-Gerlach.	30
Figura 10 – Modelo Padrão.	32
Figura 11 – Representação do experimento de Stern-Gerlach.	58
Figura 12 – Resultados obtidos no experimento de Stern-Gerlach. À esquerda, a distribuição dos átomos de prata com o campo magnético desligado. À direita, a distribuição dos átomos de prata quando o campo magnético estava ligado.	58
Figura 13 – Spin up e spin down.	59
Figura 14 – Divisão do feixe de átomos ao atravessar o aparato de Stern-Gerlach. Um feixe é defletido para cima (+), o segundo não sofre deflexão (0) e o último é defletido para baixo (-).	60
Figura 15 – O feixe de partículas defletido para cima (+) não é bloqueado e ingressa em um segundo aparato de Stern-Gerlach. Neste caso o feixe não se divide mais, pois é “purificado”.	60
Figura 16 – Aparato de Stern-Gerlach modificado.	61
Figura 17 – Sequência de dois aparatos de Stern-Gerlach modificados.	61
Figura 18 – Posições e símbolos dos filtros no aparato de Stern-Gerlach.	62
Figura 19 – Dois aparatos, o segundo rotacionado em um ângulo α	63
Figura 20 – Quantidade de partículas que entram em S e saem em S'	65
Figura 21 – Quantidade de partículas que entram em S e saem em S'	65
Figura 22 – Quantidade de partículas que entram em S e saem em S'	65
Figura 23 – Ângulos de rotação do vetor u , sendo o ângulo φ denominado ângulo azimutal e o ângulo θ o ângulo polar.	68
Figura 24 – Duas representações geométricas equivalentes para a molécula de amônia.	70
Figura 25 – Molécula de Benzeno - C_6H_6	73
Figura 26 – Duas configurações possíveis para o anel benzeno.	73
Figura 27 – Os dois estados possíveis para o anel benzeno.	73
Figura 28 – Representação do anel benzênico.	74

Figura 29 – Experimento Stern-Gerlach com o uso de um aparato.	77
Figura 30 – Experimento Stern-Gerlach com o uso de três aparatos.	78
Figura 31 – Experimento de Stern-Gerlach.	78
Figura 32 – Representação simplificada do aparato de Stern-Gerlach.	79
Figura 33 – Aparato de Stern-Gerlach com uma saída bloqueada.	79
Figura 34 – Dois aparatos de Stern-Gerlach.	79
Figura 35 – Três aparatos de Stern-Gerlach em sequência.	80
Figura 36 – Experimento de Stern-Gerlach em que átomos de spin um são divididos em três feixes.	80
Figura 37 – Simbologia adotada para representar os três feixes no aparato S	80
Figura 38 – Representação dos átomos passando pelo segundo aparato.	81
Figura 39 – Representação do bloqueio dos caminhos (0 e $-$) em S e em S'	81
Figura 40 – Representação do bloqueio dos caminhos (+ e 0) em S e dos caminhos (0 e $-$) em S'	81

SUMÁRIO

Introdução	17	
1	SOMENTE UM SALTO - DO PRINCÍPIO À MECÂNICA QUÂNTICA	21
1.1	APOIADO EM OMBROS DE GIGANTES	21
1.2	A NECESSIDADE E O SURGIMENTO DA MECÂNICA QUÂNTICA	23
1.3	UM PASSEIO PELAS MAIS IMPORTANTES DESCOBERTAS NO CAMPO DAS PARTÍCULAS	27
2	NOÇÕES BÁSICAS DE ÁLGEBRA LINEAR	33
2.1	ESPAÇOS E SUBESPAÇOS VETORIAIS	33
2.2	COMBINAÇÃO LINEAR, DEPENDÊNCIA LINEAR E BASE	36
2.2.1	Combinação Linear	36
2.2.2	Dependência e Independência Linear	37
2.2.3	Base de um Espaço Vetorial	38
2.3	TRANSFORMAÇÕES LINEARES	39
2.3.1	O Conceito de Transformação Linear	39
2.3.2	Representação Matricial de uma Transformação Linear	40
2.4	AUTOVALORES E AUTOVETORES	40
2.4.1	Uma Introdução a Autovalores e Autovetores	41
2.4.2	Determinantes, Autovalores e Autovetores	41
3	ESPAÇO DE HILBERT	45
3.1	PRODUTO INTERNO	45
3.1.1	Produto Interno Real	45
3.1.2	Produto Interno Complexo	46
3.2	FUNCAIONAIS LINEARES E ESPAÇO DUAL	47
3.3	ESPAÇO DE HILBERT	47
3.4	OPERADORES HERMITIANOS	48
4	POSTULADOS DA MECÂNICA QUÂNTICA	51
4.1	UM POUCO DE FORMALISMO	52
4.1.1	Notação de Dirac	52
4.1.2	Observáveis e Operadores	52
4.2	ESTADO DE SISTEMA	52
4.3	MEDIDAS	53
4.4	PROBABILIDADES	54
4.5	REDUÇÃO DO PACOTE DE ONDA	54

4.6	A EVOLUÇÃO TEMPORAL DOS SISTEMAS	55
5	SPIN UM, SPIN MEIO E SISTEMAS DE DOIS NÍVEIS	57
5.1	O SPIN	57
5.1.1	Descrição do Experimento de Stern-Gerlach	57
5.2	SPIN UM	59
5.3	SPIN MEIO	66
5.4	ESTADO DE DOIS NÍVEIS	69
5.4.1	Molécula de Amônia	69
5.4.2	A Molécula de Benzeno	72
6	PROPOSTAS DE ATIVIDADES PARA SEREM IMPLEMENTADAS NO ENSINO MÉDIO	75
6.1	INTRODUÇÃO	75
6.2	PRIMEIRA PROPOSTA DIDÁTICA	75
6.2.1	Tempo previsto para a atividade	76
6.2.2	Objetivos	76
6.2.3	Recursos Didáticos	76
6.2.4	Desenvolvimento da Aula	76
6.2.4.1	<i>Aula 1</i>	76
6.2.4.2	<i>Roteiro de uma Atividade para a Aula 2</i>	77
6.3	SEGUNDA PROPOSTA DIDÁTICA	82
6.3.1	Tempo Previsto Para a Atividade	82
6.3.2	Objetivos	82
6.3.3	Recursos Didáticos	83
6.3.4	Desenvolvimento da Aula	83
6.3.4.1	<i>Exercícios sugeridos para a segunda aula</i>	83
7	CONCLUSÃO	85
	REFERÊNCIAS	87

INTRODUÇÃO

O ADEUS AOS DEUSES

Antes mesmo de o homem dominar a razão, na alvorada da humanidade, quando ainda habitava nas cavernas, a curiosidade já o havia levado a tentar compreender o seu entorno. No início, ele olhava aquilo que estava ao seu alcance. Não satisfeito, subiu em árvores para olhar mais adiante. Depois, ainda inquieto, galgou montanhas, desbravou oceanos e mais recentemente, o espaço. O fato é que a espécie humana sempre tentou compreender o mundo, seus mistérios; a natureza e suas revelações. O *Homo sapiens* no seu desenvolvimento enquanto indivíduo, teve a percepção da necessidade do domínio sobre a natureza e, esse domínio o levou a procurar explicações para fenômenos da natureza, bem como a explicação para o surgimento do Universo. Elas, porém, nem sempre foram explicações baseadas no método científico como o conhecemos atualmente.

A ideia de propor explicações para fenômenos não compreendidos remonta a milênios antes de Cristo. No princípio, segundo JOAQUIM (2017a) e BRENNAN (2000), as explicações estavam associadas aos deuses, ao obscurantismo; aos elementos constituintes da Terra (terra, água, fogo e ar), segundo a ideia do filósofo grego Empédocles (490 - 430 a.C.). Por mais mitológica que seja a ideia dos quatro elementos nos dias de hoje, vale ressaltar que essa visão rompia com o pensamento da época, de que o Universo (matéria) era constituído por um único elemento. Tales de Mileto (624 - 527 a.C.) foi um dos pioneiros na busca para respostas científicas, respostas racionais para fenômenos da natureza, fundamentando suas explicações (teorias) na observação. Podemos dizer que Tales de Mileto iniciou a procura da origem das substâncias, compreensão de como a matéria é constituída e suas transformações sem recorrer a entidades divinas (mitologia). No mesmo período, Leucipo e Demócrito (500 - 400 a.C.), filósofos gregos, membros da escola atomista, propuseram a ideia que a matéria é composta por algumas espécies de átomos fundamentais, que diferem na sua forma e tamanho, e por espaço vazio. Claro que tudo isso ainda era baseado num raciocínio abstrato e filosófico, mas já apresentava parte da ideia que até hoje vigora na física moderna, a ideia de que a matéria é constituída por unidades discretas (JOAQUIM, 2017a). Esse conceito é tão importante que o conceituado físico Richard Feynman (1918 - 1988) escreveu, em suas famosas *Lições de Física*, (FEYNMAN; LEIGHTON; SANDS, 1965, p. 1-2):

Se, em algum cataclisma, todo o conhecimento científico for destruído e só uma frase for passada para a próxima geração, qual seria a afirmação que conteria a maior quantidade de informação na menor quantidade de palavras? Eu acredito que seria a hipótese atômica (ou o fato atômico ou como quiser chamá-lo) que todas as coisas são feitas de átomos - pequenas partículas que se movem em constante movimento, atraindo-se umas às outras quando separadas por pequenas distâncias, mas repelindo-se ao serem comprimidas umas sobre as outras. Nessa única frase, você verá, existe uma enorme quantidade de informação sobre o mundo, se aplicarmos apenas uma pequena quantidade de imaginação e raciocínio.¹

¹ “If, in some cataclysm, all of scientific knowledge were to be destroyed, and only one sentence passed on to

No campo científico, também não poderia ser diferente, muitas das concepções aceitas atualmente, foram motivo de teorias-experimentos a menos de 100 anos. Nesse sentido, a física moderna, comparada com a física clássica, ainda está dando seus passos iniciais. E por esse motivo, muitas pessoas sequer detêm conhecimento ou ouviram falar de termos como spin, sistemas de dois níveis ou modelo padrão.

O ENSINO DE MATEMÁTICA COM APOIO NA FÍSICA

Nesse campo da física moderna é que se desenrola esse trabalho. Com a ruptura do pensamento cartesiano, passamos a cada vez mais, agregar conhecimentos distintos. Estamos vivendo a era da tecnologia, do desenvolvimento científico, desenvolvimento este, que se dá em maior ênfase, principalmente, no fim do século XIX e início do século XX.

Porém, muitas vezes o ensino na educação básica não tem acompanhado esse desenvolvimento da ciência, muito pelo contrário, o que temos percebido é um ensino descontextualizado das aplicações tecnológicas, conforme nos dizem PINTO e ZANETIC (abr., 1999, p. 7)

A Física nele desenvolvida está longe de comparecer às aulas de nossas escolas. É preciso transformar o ensino de Física tradicionalmente oferecido por nossas escolas em um ensino que contemple o desenvolvimento da Física Moderna, não como uma mera curiosidade, mas como uma Física que surge para explicar fenômenos que a Física Clássica não explica, constituindo uma nova visão de mundo. Uma Física que hoje é responsável pelo atendimento de novas necessidades que surgem a cada dia, tornando-se cada vez mais básicas para o homem contemporâneo, um conjunto de conhecimentos que extrapola os limites da ciência e da tecnologia, influenciando outras formas do saber humano. Portanto, os vários campos abertos pela física deste século devem ter sua presença garantida nos currículos de nossas escolas médias, particularmente a Física Quântica e a Física Relativística que abriram novos horizontes de exploração científica inimagináveis aos olhos dos cientistas clássicos.

Já, por outro lado, pesquisas revelam a importância de se introduzir o conceito de física quântica no Ensino Médio, como nos dizem SILVA e ALMEIDA (dez., 2011, p. 625):

Muitos pesquisadores em Ensino de Física têm dedicado seus trabalhos a defender a tese de que se faz necessário enfrentar o desafio de inserir temas de Física Moderna e Contemporânea (FMC) no Ensino Médio (EM). Machado e Nardi (2007, p. 91) defendem a atualização curricular “(...) tendo em vista a formação de cidadãos capazes de compreender as bases de inúmeras tecnologias presentes no dia a dia, tais como os computadores, o laser e os sistemas de posicionamento global por satélite (GPS), dentre inúmeros outros.”. Seguindo a mesma linha de raciocínio, Oliveira et al (2007, p.447) dizem que o ensino de Física no nível médio “(...) não tem acompanhado os avanços tecnológicos ocorridos nas duas últimas décadas e tem se mostrado cada vez mais distante da realidade dos alunos.”. Moreira (2007, p.172) critica a falta de contemporaneidade dos

the next generations of creatures, what statement would contain the most information in the fewest words? I believe it is the *atomic hypothesis* (or the *atomic fact*, or whatever you wish to call it) *that all things are made of atoms—little particles that move around in perpetual motion, attracting each other when they are a little distance apart, but repelling upon being squeezed into one another.* In that one sentence, you will see, there is an *enormous* amount of information about the world, if just a little imagination and thinking are applied.” (FEYNMAN; LEIGHTON; SANDS, 1965, p. 1-2).

conhecimentos ensinados: “(...) não tem sentido que, em pleno século XXI, a Física que se ensina nas escolas se restrinja à Física (Clássica) que vai apenas até o século XIX.”.

O próprio MEC/SEF (1998) já ressalta nas competências e habilidades a importância das tecnologias do ensino contextualizado e da relação com as diversas disciplinas que compõem a grade de disciplinas da educação básica. O ensino da matemática contextualizado com outras disciplinas, torna aquela que está renegada a ser “apenas o ferramental” para as diversas áreas da ciências em atriz principal do processo de ensino-aprendizagem. O ensino de matemática contextualizado aproxima o aluno da matemática e o torna agente desse processo educacional.

Quanto ao ensino de matrizes na Educação Básica - Ensino Médio, tem sido relegado como nos diz BORBA (2011) ao cálculo de determinantes e na resolução de sistemas lineares por meio de matrizes quadradas. O uso dessas matrizes se limitam a cálculos mais simples, com números inteiros e fazendo uso de operações com matrizes. Grandes provas de vestibular, como por exemplo, a prova do ENEM, tem se restringido a demonstrar matrizes como sendo meramente uma informação disposta numa tabela. Cada vez mais o ensino de matrizes parece estar desvinculado da necessidade de estudo, não inserido nas novas aplicações tecnológicas que fazem uso da matriz, conforme nos diz SANCHES (2012).

Nesse contexto de desenvolvimento tecnológico do acesso à informação e o emprego de nomenclatura científica pelos alunos decorrente do acesso às mídias modernas, faz-se necessário ser capaz de dar uma nova roupagem ao ensino de matrizes, mostrar as mais diversas aplicações tecnológicas que usam as matrizes como base.

Novas roupagens, a priori não significam necessariamente o uso de novas tecnologias. Mas, o fato de sermos capazes de correlacionar o tema matrizes com outras áreas do conhecimento, como por exemplo: física e química; permite que mostremos a importância do estudo de matrizes. Nesse campo de estudo, a física quântica se mostrou um valioso instrumento de ensino e ao mesmo tempo, uma importante forma de promover o interesse dos alunos.

Por isso, esse trabalho busca trazer um levantamento histórico, passando pela fundamentação algébrica e, de posse desse conhecimento, desenvolver o conceito de spin e sistemas de dois níveis; usando o conceito de matriz como base para a compreensão dos conceitos estudados.

No primeiro capítulo desse trabalho, tratamos do desenvolvimento histórico da ciência, mais precisamente, o desenvolvimento do conceito de átomo. Fazemos uma correlação entre a mecânica clássica e a mecânica quântica, trazendo a diferenciação básica entre as duas mecânicas. No fim do capítulo, apresentamos o conceito atual sobre átomo e o modelo padrão.

Já no segundo capítulo, trazemos uma revisão dos conceitos essenciais de álgebra linear, para servir de suporte à compreensão de spin e de sistemas de dois níveis. Revemos os conceitos de espaço vetorial, transformações lineares, base e muitos outros.

O espaço de Hilbert é o tópico abordado no terceiro capítulo, trazendo uma revisão dos

conceitos de produto interno real e complexo, funcionais lineares, espaço dual, espaço de Hilbert e operadores hermitianos.

A base da mecânica quântica é formada por postulados, postulados estes que são tratados e definidos no quarto capítulo. Ainda tratamos do formalismo de Dirac e da matemática inerente à mecânica quântica - o uso do bra-ket, a função de onda e o estado de sistemas.

Já no quinto capítulo, faz-se a análise do experimento de Stern-Gerlach e a relação com o spin. Conceituamos spin um e spin meio e trabalhamos o conceito de sistemas de dois níveis com dois exemplos.

Terminamos o presente trabalho com o sexto capítulo, que traz duas sugestões elaboradas a partir de seu arcabouço teórico para utilização em sala de aula.

1 SOMENTE UM SALTO - DO PRINCÍPIO À MECÂNICA QUÂN- TICA

1.1 APOIADO EM OMBROS DE GIGANTES

A mecânica clássica como a conhecemos hoje, teve sua origem em Galileo Galilei (1564 - 1642). Mas, foi através das chamadas três leis de Newton que a mecânica clássica se popularizou e chegou até nós. NEWTON (1686) formulou três leis, na sua obra célebre *Philosophiae Naturalis Principia Mathematica*, que podem ser descritas de forma resumida como:

- 1ª Lei de Newton ou Lei da Inércia - Todo corpo tende a permanecer no seu estado natural (repouso ou movimento retilíneo uniforme), a não ser que seja compelido a mudar seu estado devido à aplicação de forças;
- 2ª Lei de Newton ou Princípio Fundamental da Mecânica - $\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt}$, que poderia também ser interpretada como a variação de movimento é proporcional à força aplicada, sendo aplicada na mesma direção da reta suporte da força;
- 3ª Lei de Newton ou Lei da Ação e Reação - Para toda força de ação existe uma força de reação de mesma intensidade, mesma direção mas, com sentido oposto à da força de ação. Sendo que a força de ação e a força de reação agem em corpos diferentes ($|\vec{F}_{12}| = |\vec{F}_{21}|$).

A mecânica clássica, desenvolvida por Newton, recebeu mais duas formalizações conforme escreve (TAYLOR; ROQUE, 2013, p.3):

No final do século XVIII e início do século XIX, duas formulações alternativas da mecânica foram desenvolvidas, batizadas com os nomes de seus inventores, o matemático francês e astrônomo Lagrange (1736-1813) e o matemático irlandês Hamilton (1805- 1865). As formulações Lagrangiana e Hamiltoniana da mecânica são completamente equivalentes às de Newton, mas fornecem soluções drasticamente mais simples para muitos problemas complicados e são também o ponto de partida para muitos dos desenvolvimentos modernos.

A mecânica clássica está apoiada em quatro conceitos, considerados fundamentais; que são: o espaço, o tempo, a massa e a força; sendo que na mecânica newtoniana o tempo é uma grandeza absoluta.

Até cerca de 1900 a mecânica clássica era tida como uma verdade absoluta e irrefutável. Porém, a mecânica vigente não conseguia explicar satisfatoriamente algumas das novas descobertas. Pode-se citar o fato de que a mecânica clássica funciona perfeitamente para objetos num referencial inercial; contudo, quando adotados referenciais não inerciais ¹, a mecânica clássica já

¹ Acelerando ou girando.

não é válida na sua forma padrão. Podemos dizer que a mecânica clássica não é a regra geral, mas sim um caso particular.

No dia 27 de abril do ano 1900, numa conferência no Royal Society de Londres, conforme nos diz JOAQUIM (2017b), Lorde Kelvin (1824 - 1907) declarou que a física já estava completa, com a base formada pela:

- A mecânica de Newton;
- A termodinâmica de Boltzmann;
- O eletromagnetismo de Maxwell.

O que restava era duas pequenas nuvens no horizonte:

- A incapacidade de detectar o éter ²;
- A catástrofe do ultravioleta ³.

Para Kelvin, a física estava ligada à medição de quantidades conhecidas e com grande precisão. Ledo engano, as duas nuvenzinhas no céu da física, transformaram-se em duas grandes tempestades. Tempestades que levaram ao desenvolvimento da chamada física moderna.

A final do século XIX e início do século XX, a sociedade pós revolução industrial passava por profundas mudanças. Temos um panorama em (PEREZ, 2016, p. 13), que nos diz:

As mudanças na sociedade trazidas pela revolução industrial influenciaram também novos avanços científicos. As indústrias começaram a pressionar governos e instituições educacionais a estudarem novas técnicas que pudessem representar maior eficiência nas linhas de produção. Seguindo esse movimento, surgiu em 1887, em Berlim, o primeiro instituto nacional de pesquisa, em parte financiado por indústrias, o *Physikalisch Technische Reichsanstalt*, ambiente onde boa parte das discussões, que culminaram com o surgimento da MQ⁴, aconteceram (MEHRA; ECHENBERG, 1982).

É preponderante perceber que o “salto” da física clássica para a física quântica não foi um evento estanque, mas sim uma construção apoiada na necessidade de responder novas perguntas, para novas constatações.

² “Em 1845, George Gabriel Stokes (1819-1903) propôs uma nova teoria do éter. Nela o éter seria um material viscoso que aderiria à superfície dos corpos, sendo quase que totalmente arrastado pela Terra, ficando em repouso em relação a ela próximo ao solo.” (DAMASIO; PEDUZZI, maio, 2017, p. 5) Esse fracasso na medição do éter está relacionado a diversos experimentos, mas destaca-se com maior relevância o experimento de Michelson-Morley para tentar detectar o movimento da Terra em relação ao éter.

³ Explicar a distribuição de energia na radiação de um corpo a uma dada temperatura.

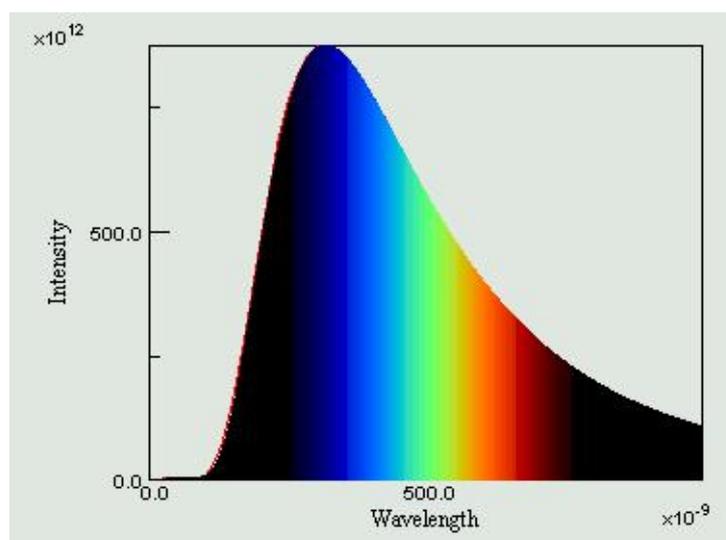
⁴ MQ é uma abreviatura para Mecânica Quântica.

1.2 A NECESSIDADE E O SURGIMENTO DA MECÂNICA QUÂNTICA

Um dos primeiros experimentos que influenciaram todo esse processo foi, segundo CHIBENI (1992), a *radiação do corpo negro*. A radiação do corpo negro, tem uma trajetória construída a muitas mãos, conforme nos relata (PEREZ, 2016, p. 17):

Considerando a definição de corpo negro proposta por Kirchhoff, em 1879, Josef Stefan apresentou uma lei empírica, que relacionava a potência irradiada por um corpo negro somente com sua temperatura, portanto não dependendo de outras características do corpo. [...] Para explicar teoricamente a lei de Stefan, em 1884 Ludwig Boltzmann propôs unir as ideias de Maxwell sobre fenômenos eletromagnéticos, e sua conexão com a radiação, com a termodinâmica, apresentando um estudo teórico que comprovava a lei experimental de Stefan. [...] Seguindo o método proposto por Boltzmann e a lei de Stefan, em 1893 Wihelm Wien propôs o que hoje conhecemos como Lei de Deslocamento de Wien. [...] Além disso, segundo Crepeau (2009) é também nesse artigo que “o conceito de *quantum* finito de energia, frequentemente atribuído a Planck, aparece”.

Figura 1 – Radiação de corpo negro para uma temperatura de 9000K. As regiões coloridas correspondem aos comprimentos de onda da radiação visível.



Fonte – Extraído de Santos (2009).

Em adição à lei de Stefan-Boltzmann e ao deslocamento de Wien, Rayleigh e Jeans propuseram, com base na teoria eletromagnética, uma lei que explicava satisfatoriamente o comportamento da curva de radiação para comprimentos de onda longos, porém falhava em descrever a radiação para comprimentos de onda curtos. Esta falha da teoria de Raileigh-Jeans era conhecida como *catástrofe do ultravioleta*.

Aqui já podemos perceber um dos conflitos em que a física clássica já não conseguia explicar os experimentos e os dados observados. A solução deste problema foi obtida apenas com o surgimento de uma nova teoria. Quem deu o primeiro passo e resolveu satisfatoriamente o problema da radiação de corpo negro foi Max Planck. Ele propôs que, diferentemente da

mecânica clássica, onde a energia é contínua, segundo a teoria da quantização, a energia seria quantificada em quantidades discretas.

Em meio ao fervilhar de tantos experimentos, tantas teorias, segundo JOAQUIM (2017b), um jovem promissor, chamado Einstein (1879 - 1955), em 1905, chamado de **“ano miraculoso de Einstein”** produziu quatro artigos nos temas:

- Efeito fotoelétrico;
- Movimento Browniano⁵;
- Relatividade Restrita⁶;
- Equivalência energia - massa.

Apesar de Einstein ser mais lembrado pela introdução da Relatividade (Restrita e Geral), é através da explicação do efeito fotoelétrico que ele deu sua contribuição mais importante no início da Mecânica Quântica. O prêmio Nobel de Física recebido por Einstein em 1921 foi devido a este trabalho.

O efeito fotoelétrico já fora descoberto experimentalmente por Hertz em 1887, mas foi Einstein o primeiro que conseguiu explicar o fenômeno com sucesso. No efeito fotoelétrico, um metal é atingido por uma radiação eletromagnética de alta frequência, acarretando na emissão de elétrons do metal. Isso ocorre porque um fóton incidente sobre essa superfície metálica transfere toda sua energia para um elétron. Se essa energia for suficiente, o elétron é arrancado imediatamente do metal; caso contrário, permanece na metal.

Evidentemente a ideia por trás da emissão destes *fotoelétrons* passava pela energia absorvida pelos elétrons ao se incidir a radiação. Contudo, o eletromagnetismo clássico fornece que a energia está ligada à amplitude dos campos eletromagnéticos, e não à sua frequência. Portanto, ao incidir uma radiação suficientemente intensa, não importando a frequência, seria possível emitir tais elétrons. No entanto, na prática não se observava este fenômeno. A emissão dos elétrons estava ligada à frequência da radiação, e não à intensidade luminosa.

Einstein aproveitou-se da teoria de Planck segundo a qual a energia se propagava por meio de *quanta* de valor $h\nu$, sendo h a constante de Planck e ν a frequência da radiação e estendeu este conceito para além do corpo negro. Nesta explicação a intensidade estava ligada

⁵ Movimento de partículas suspensas num líquido ou gás. Com base neste trabalho Jean Perrin (1870 - 1942) verificou experimentalmente a teoria de Einstein e determinou o número de Avogadro e recebeu o prêmio Nobel de Física em 1926.

⁶ Einstein formulou dois postulados sobre a relatividade restrita. Eles podem ser resumidos da seguinte maneira:

- As leis da Física são válidas em todos os referenciais inerciais;
- A velocidade da luz é constante e o seu valor não depende do estado de movimento do observador (nem da fonte).

à quantidade destes *quanta*, mas cada elétron absorve apenas um único *quantum* de energia. Portanto, o elétron só poderia ser emitido se recebesse um *quantum* suficientemente energético, ou seja, cuja frequência fosse suficientemente alta.

A teoria de Einstein para o efeito fotoelétrico, colidia com a física clássica, sendo inclusive criticada por Max Planck. Não era possível explicar corretamente esse fenômeno sem formular novas concepções, novas teorias.

Aqui surge então a necessidade de formular uma nova teoria. O próximo passo foi dado por Louis de Broglie (1892 - 1987). Planck e Einstein haviam proposto que a radiação eletromagnética, que classicamente era tratada como uma onda, em algumas circunstâncias apresentavam comportamento corpuscular. A contribuição de de Broglie foi inverter este conceito e propor que a mecânica das partículas poderia ser interpretada por meio de uma mecânica ondulatória. Ele previu que se elétrons fossem submetidos a um experimento de dupla fenda, por exemplo, eles também exibiriam propriedades como interferência (JOAQUIM, 2017b). Esta previsão foi então confirmada experimentalmente e ele recebeu o Prêmio Nobel em 1929.

Posteriormente Erwin Schrödinger (1887 - 1961) formulou uma nova interpretação para a Mecânica Quântica. Saímos do caráter determinístico, deixamos de pensar na posição e tempo e, passamos a pensar em qual a probabilidade ⁷ de uma partícula de estar numa posição num dado instante, a qual é ligada a uma entidade complexa chamada *função de onda*

$$\psi(\vec{r}, t).$$

Na Figura 2 reproduzimos a equação original de Schrödinger conforme encontrada em seu trabalho original (SCHRÖDINGER, 1926).

Figura 2 – Equação de Schrödinger.

$$\Delta\psi + 8\pi^2m(E - V)\psi/h^2 = 0$$

Fonte – Extraído de Schrödinger (1926).

E qual a importância da equação de Schrödinger? A sua resolução nos permite chegar a conjuntos de funções de onda (ψ) e de energias dos estados (E) que os elétrons se encontram no átomo em função da energia potencial eletrostática (V).

Voltando as contribuições de Einstein, conforme mencionado anteriormente, não podemos esquecer da Relatividade. No caso da Relatividade Restrita Einstein estabeleceu que a velocidade da radiação eletromagnética no vácuo, prevista através das Equações de Maxwell deveria ser a mesma em todos os referenciais inerciais. Entre as consequências previstas estão

⁷ Bohr foi o responsável por estabelecer a relação entre a função de onda e a probabilidade de se encontrar a partícula numa posição x no instante t , denotada por $|\psi(x, t)|^2$

fenômenos como a contração do espaço, dilatação do tempo e a equivalência massa-energia. Nesta última constatação reside a sua equação mais famosa:

$$E = mc^2,$$

onde c é a velocidade da luz no vácuo.

Na maioria dos livros introdutórios de Mecânica Quântica não fica evidente a relação entre o desenvolvimento inicial desta teoria e a Relatividade Especial. Nesta época a Relatividade era uma teoria respeitada, e desde o princípio havia a preocupação com a compatibilidade entre a Mecânica Quântica e a Relatividade Especial. Em sua tese de doutorado Louis de Broglie mencionou a importância da teoria da Relatividade e, Schrödinger buscou uma extensão relativista para a sua equação.

Em 1928, Paul Dirac (1902 - 1984) finalmente obtém uma equação quântica relativista que estava de acordo com os experimentos e, além disso, levava em conta o spin de uma forma natural. Na Figura 3 temos a equação desenvolvida por Dirac.

Figura 3 – Equação de Dirac.

$$[i\sum\gamma_{\mu}p_{\mu} + mc] \psi = 0, \quad \mu = 1, 2, 3, 4.$$

Fonte – Extraído de DIRAC (1930).

A ideia de Dirac foi unir duas teorias individuais em uma única teoria, a mecânica relativística e a mecânica quântica, dando assim a interpretação correta para o comportamento de partículas ao se aproximarem da velocidade da luz no vácuo ⁸. Outro item importante é que a equação de Dirac previa a existência de partículas com energia *negativa*, que não existem na física clássica. Em 1928, Dirac interpretou as soluções de energia negativa como correspondendo aos dois estados de spin de uma partícula com carga oposta. A resposta veio em 1931, quando Carl Anderson ⁹ (1905 - 1991) experimentalmente descobriu o pósitron (e^+), que é a antipartícula do elétron. A teoria de Dirac previra a existência de antimatéria.

Muito mais experimentos e descobertas influenciaram o surgimento da mecânica quântica, desde a concepção das ondas eletromagnéticas, a experiência de Young, o Raio-X e tantos outros. Não é possível aqui elencarmos todos esses experimentos. Fixamos nosso olhar naqueles que seriam de mais fácil compreensão e possibilitariam fazer uma linha temporal. Os eventos aqui citados não são de maior ou menor importância, apenas serve para uma contextualização do tema Mecânica Quântica.

⁸ A equação de Klein-Gordon também é relativística, porém tem como desvantagem chegarmos numa derivada segunda dependente do tempo. A equação relativística de Dirac possui a vantagem de evitar essa situação, definindo a equação de forma linear nas variáveis espacial e temporal.

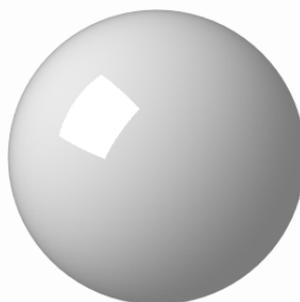
⁹ Recebeu o prêmio Nobel da Física em 1936.

Outro aspecto relevante é a compatibilidade entre a Relatividade Geral e a Mecânica Quântica. A Relatividade Geral fornece uma explicação elegante para a gravidade baseada na deformação do espaço-tempo. Contudo, nos dias atuais ainda não existe uma teoria capaz de explicar os efeitos da Mecânica Quântica e a Gravidade em um único formalismo. A Gravidade Quântica permanece como um dos grandes desafios da Física Moderna e um desafio para os físicos da atualidade e, quem sabe, do futuro. Talvez o formulador desta teoria possa sair de uma de nossas salas de aula.

1.3 UM PASSEIO PELAS MAIS IMPORTANTES DESCOBERTAS NO CAMPO DAS PARTÍCULAS

Em 1808, John Dalton (1766 - 1844) formulou a sua teoria atômica (modelo das esferas indivisíveis). Ele foi capaz de relacionar elementos conhecidos naquele período com seus respectivos símbolos químicos e também interações entre esses elementos.

Figura 4 – Bola de Bilhar - Modelo atômico de Dalton.



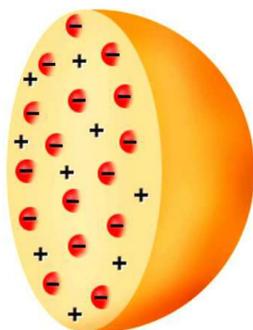
Fonte – Extraído de JOAQUIM (2017a).

Já em 1897, J. J. Thompson (1856 - 1940), por meio de um experimento usando um tubo de raios catódicos, provou a existência de cargas positivas e negativas no átomo, melhor dizendo: os raios catódicos são constituídos por partículas carregadas. O átomo era formado por um fluido contínuo, em que a carga negativa estava no meio e rodeada de carga positiva. Esse modelo ficou conhecido como o modelo do “pudim de passas”, pois se assemelha a uma ameixa.

No mesmo ano, Planck (1858 - 1947) ao explicar a radiação do corpo negro, teoriza que a energia não é contínua mas sim, em partículas (fótons) com quantidades discretas de energia, com um valor bem definido.

Em decorrência das descobertas de Thompson, o meio científico borbulhou de experimentos. Na sua maioria, os experimentos eram discrepantes com a mecânica newtoniana. Aqui, vale a ressalva de que no campo atômico, Newton se demonstrou um atomista convicto, conforme nos mostra (CHAVES; SAMPAIO, 2017, p.4):

Figura 5 – Modelo atômico de Thompson.



Fonte – Extraído de FONTANAILLES (2013).

Ao formular a mecânica com base em uma equação de movimento, implementou o princípio do determinismo causal (antecipado por Descartes), o que é o maior feito científico-filosófico da história. Newton demorou a publicar seus trabalhos, e o cálculo integro-diferencial foi desenvolvido independentemente por Leibniz quase duas décadas depois. Fortemente influenciado por Gassendi e ao contrário de Descartes, Newton adotou o atomismo. Como, por outro lado, acreditava convictamente na universalidade das leis físicas, defendeu que também a luz tivesse um caráter atômico. Opôs-se assim aos seus contemporâneos que defendiam o caráter ondulatório da luz.

Entre esses experimentos, um se destaca: o experimento de Rutherford (1871 - 1937), realizado com mais dois colegas, o físico Geiger (1882 - 1945) e Marsden (1889 - 1970) no ano de 1911, que tinha por objetivo testar o modelo atômico planetário de Rutherford e contrapor o modelo de Dalton (que dizia que as partículas eram esferas maciças).

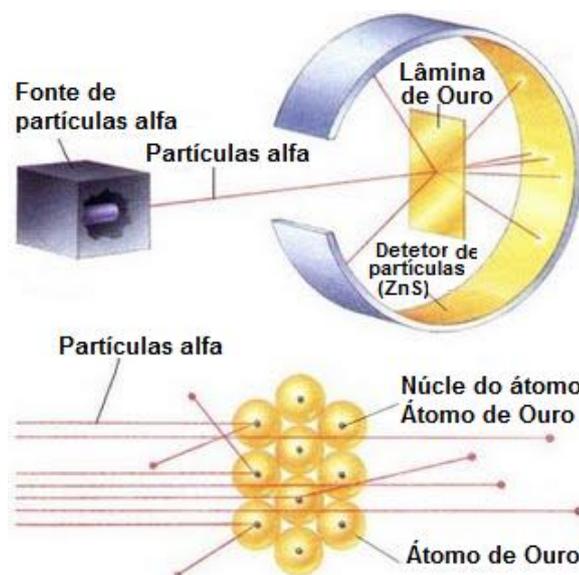
Sobre o experimento de Rutherford, (BRENNAN, 2000, p.142) diz:

Rutherford não estava de todo insatisfeito com o modelo de Thomson. [...] Rutherford observara que, ao passar através de finas folhas de metal, partículas alfa velozes produziam imagens difusas em chapas fotográficas, ao passo que, quando não havia nenhuma obstrução à sua passagem, produziam uma imagem bem definida. Havia concluído que as partículas alfa talvez fossem defletidas por passar perto de átomos da lâmina metálica, mas não havia prova disso e cálculos posteriores lançaram dúvida sobre a conjectura. [...] Rutherford sugeriu que Geiger e Marsden trabalhassem juntos num experimento de espalhamento. Queria que bombardeassem finas folhas de ouro com partículas alfa e procurassem deflexões de vulto. Estava bastante convencido de que não ocorreria deflexão considerável alguma porque (admitindo que o modelo do átomo de Thomson estava correto) os elétrons dos átomos de ouro seriam a única coisa capaz de defletir as partículas alfa. Mas, sendo vários milhares de vezes mais leves que as partículas alfa, os elétrons teriam tanta dificuldade para defletir-las quanto uma bolinha de gude para defletir uma veloz bala de canhão. Era extremamente improvável, pensava Rutherford.

Na Figura 6, temos a representação do experimento realizado por Rutherford.

Os resultados encontrados por Rutherford no experimento eram incompatíveis com o modelo atômico de Thomson. A conclusão de Rutherford era em duas vias: eles haviam cometido falha no experimento; ou então, a compreensão do átomo estava equivocada. Após dois anos do

Figura 6 – Experimento de Rutherford.



Fonte – Extraído de ??).

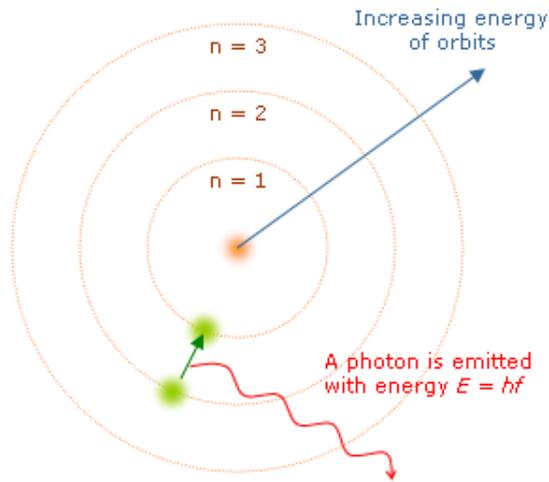
experimento, concluiu ele que no interior do átomo havia “alguma coisa” que tivesse massa maior do que a massa do elétron. Aqui chegava-se a conclusão de que o átomo possuía um núcleo. A sequência dessa conclusão foi postular sobre a existência de uma partícula de carga positiva que estava no núcleo atômico, denominada prótons. Ainda levantou hipóteses sobre a existência de uma outra partícula no núcleo, que ele denominou de nêutron. (BRENNAN, 2000).

O modelo atômico proposto por Rutherford, segundo (BRENNAN, 2000), propunha que o átomo assemelhava-se a um pequeno sistema solar, em que os elétrons eram os planetas que giravam em torno do núcleo, que representava o Sol. Um cientista chamado Bohr¹⁰ (1885 - 1962) tinha um questionamento a respeito de como era possível que elétrons (carga negativa) e prótons (carga positiva), que são cargas de sinais opostos, não se atraíssem? Por que os elétrons não colidiam com o núcleo? Em 1913, Bohr concebe um modelo atômico, representado na Figura 7, que representa uma leve variação do modelo atômico de Rutherford - modelo planetário em que o átomo era instável. O modelo atômico proposto por Bohr presumia que o elétron, em sua órbita particular, sempre estaria numa posição estável. Isso implicava que os elétrons, em qualquer órbita particular - mais próxima do núcleo ou mais afastada, não ganhava e nem cedia energia. Contudo, quando mudasse de órbita, ele ganharia (afastamento do núcleo) ou cederia energia (aproximação do núcleo). O modelo atômico de Bohr, trata-se de um modelo “semi-clássico” ou também chamado de “semi-quântico”, no qual ocorre a quantização do momento angular.

Na década de 20, mais precisamente no ano de 1922, um experimento proposto por STERN (1888 - 1969)-GERLACH (1889 - 1979) provaram que os elétrons possuem um momento angular intrínseco, ou seja, descobriram o spin; representado na Figura 8.

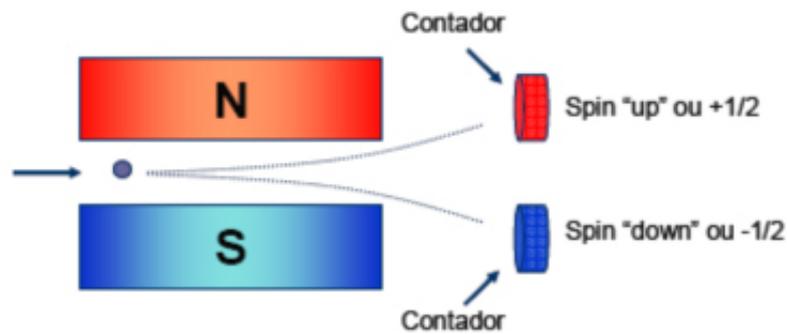
¹⁰ Recebeu o prêmio Nobel de Física em 1922.

Figura 7 – Modelo atômico de Bohr.



Fonte – Extraído de WIKIPEDIA (2018).

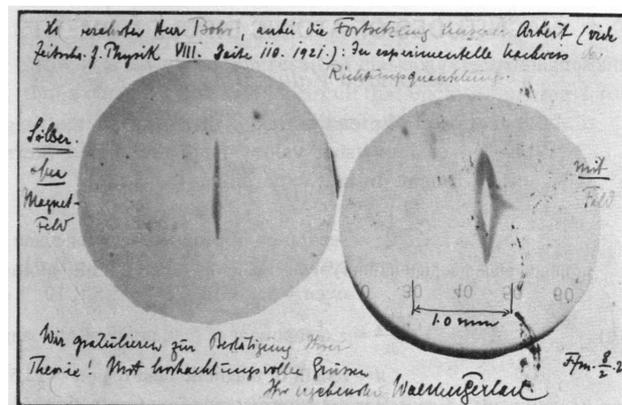
Figura 8 – Experimento de Stern-Gerlach.



Fonte – Extraído de MCT/MEC/FNDE/IGGEA (2010).

O resultado obtido por eles pode ser visualizado na Figura 9.

Figura 9 – Resultado obtido no experimento de Stern-Gerlach.



Fonte – Extraído de Gerstner (2008).

Podemos citar ainda Louis De Broglie¹¹ (1892 - 1987), que em 1924, teorizou sobre a natureza ondulatória da matéria, mais precisamente dos elétrons. Que foi verificada experimentalmente por Davisson (1881 - 1958) e Germer (1896 - 1971) em 1927.

Apesar do sucesso, o modelo atômico de Bohr apresentava diversas limitações. Por exemplo, ele servia como modelo para o Hidrogênio, mas não explicava a existência de átomos com mais elétrons como o Hélio (JOAQUIM, 2017b). Podemos elencar mais alguns pontos dessas limitações:

- Intensidade relativa das linhas de emissão;
- Não permitia descrever átomos com mais elétrons;
- Separação das linhas espectrais devido a campos magnéticos externos (efeito Zeeman);
- Estrutura fina e hiperfina dos átomos.

Logo em seguida, no ano de 1930, Pauli (1900 - 1958) propõe a existência de uma nova partícula para explicar um determinado experimento. Essa nova partícula é descoberta por James Chadwick (1891 - 1974) em 1932, o nêutron. Agora o modelo atômico estava mais próximo do modelo vigente.

Muitas outras partículas foram descobertas nesses últimos cem anos, e para organizar esse conglomerado de partículas e suas interações, foi criado o *Modelo Padrão* das interações forte, fraca e eletromagnética. A teoria do Modelo Padrão descreve o comportamento das partículas sob a ação das forças fundamentais da natureza.

Sabe-se atualmente, segundo o modelo padrão, que as partículas são divididas em dois grandes grupos:

1. Partículas elementares: não possuem estrutura interna. Podendo ser de dois tipos:

- Léptons: elétron, múon, tau, neutrino do elétron, neutrino do múon, neutrino do tau e suas respectivas antipartículas. Totalizando doze partículas.
- Quarks (carga fracionária, confinados e não livres). Os quarks são partículas que se combinam para formar os hádrons: quark up (u); quark down (d); quark charme (c); quark estranho (s); quark bottom (b) e quark top(t). Cada um pode apresentar três cores e sua respectiva antipartícula também pode apresentar três cores: vermelho, verde e azul. Totalizam trinta e seis partículas.

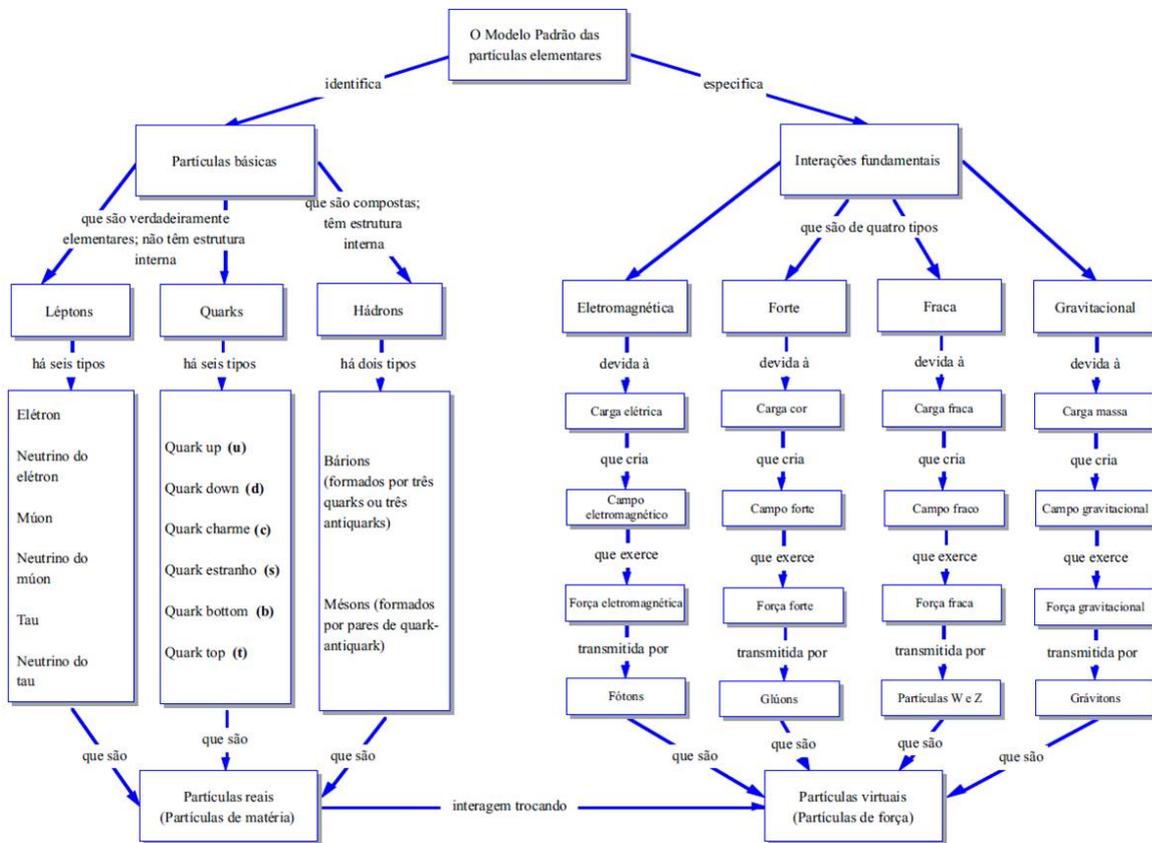
2. Hádrons: partículas que têm uma estrutura interna.

¹¹ Recebeu o prêmio Nobel de Física em 1929.

- **Bárions:** três quarks ou três antiquarks. Destacam-se aqui os prótons e os nêutrons; sendo o próton formado por dois quarks up e um quark down e, o nêutron é formado por um quark up e dois quark down.
- **Mésons:** quark mais um antiquark.
- **Méson π^+ :** formado por um antiquark (d) e um quark (u).
- **Méson π^- :** formado por um antiquark (d) e um quark (d).

Na Figura 10, temos uma representação esquemática da divisão das partículas subatômicas e também das interações fundamentais e suas respectivas forças da natureza.

Figura 10 – Modelo Padrão.



Fonte – Extraído de BARQUEIRO (2010).

2 NOÇÕES BÁSICAS DE ÁLGEBRA LINEAR

Este capítulo tem como objetivo fornecer uma rápida revisão de álgebra linear no corpo dos números complexos. Os conceitos abordados aqui são necessários para a compreensão dos conceitos de Mecânica Quântica, mas não precisam ser apresentados com este grau de formalismo aos estudantes. Serão abordados conceitos de espaço vetorial real, dependência e independência linear, transformações lineares e, finalmente, autovalores e autovetores.

2.1 ESPAÇOS E SUBESPAÇOS VETORIAIS

Seja F um corpo e V um conjunto munido de duas operações, *soma* (envolvendo dois elementos de V) e *multiplicação por escalar* (envolvendo um elemento de F e um elemento de V). Suponha que V seja fechado sob estas duas operações, ou seja:

$$(F1) \quad \forall \mathbf{u}, \mathbf{v} \in V, \mathbf{u} + \mathbf{v} \in V;$$

$$(F2) \quad \forall \alpha \in F \text{ e } \forall \mathbf{u} \in V, \alpha \mathbf{u} \in V.$$

O conjunto V que obedece a estas duas propriedades acima é dito *espaço vetorial* se os axiomas abaixo forem verificados (STEINBRUCH; WINTERLE, 1987; FERNANDES; KIMEV, 2015).

Axiomas da adição:

$$(A1) \quad (\mathbf{u} + \mathbf{v}) + \mathbf{w} = \mathbf{u} + (\mathbf{v} + \mathbf{w}), \forall \mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w} \in V;$$

$$(A2) \quad \mathbf{u} + \mathbf{v} = \mathbf{v} + \mathbf{u}, \forall \mathbf{u}, \mathbf{v} \in V;$$

$$(A3) \quad \exists 0 \in V, \forall \mathbf{u} \in V, \mathbf{u} + 0 = \mathbf{u};$$

$$(A4) \quad \forall \mathbf{u} \in V, \exists (-\mathbf{u}) \in V, \mathbf{u} + (-\mathbf{u}) = 0.$$

Axiomas da multiplicação por escalar:

$$(M1) \quad \alpha(\beta \mathbf{u}) = (\alpha\beta)\mathbf{u};$$

$$(M2) \quad (\alpha + \beta)\mathbf{u} = \alpha\mathbf{u} + \beta\mathbf{u};$$

$$(M3) \quad \alpha(\mathbf{u} + \mathbf{v}) = \alpha\mathbf{u} + \alpha\mathbf{v};$$

$$(M4) \quad 1\mathbf{u} = \mathbf{u},$$

para $\forall \mathbf{u}, \mathbf{v} \in V$ e $\forall \alpha, \beta \in F$.

São exemplos de espaços vetoriais os espaços euclidianos, os conjuntos \mathbb{R}^n e \mathbb{C}^n , com $n \in \mathbb{N}$ fazendo uso das operações usuais de adição e de multiplicação por escalar. O conjunto formado por matrizes quadradas de ordem n também são espaços vetoriais empregando-se as operações usuais de soma e produto por escalar. Existem diversos outros exemplos de espaços vetoriais, como polinômios, funções contínuas, entre outros. Estes objetos aparentemente tão distintos são abrigados nesta denominação por partilharem as propriedades acima, que permitirão obter resultados válidos independentemente da natureza do vetor. Em particular, o *estado* de uma partícula será tratado como um elemento de um espaço vetorial. Diversos resultados físicos podem ser obtidos por este simples fato.

Em geral, nos cursos de Álgebra Linear são abordados espaços vetoriais no corpo dos números reais, \mathbb{R} (STEINBRUCH; WINTERLE, 1987). Todavia, o corpo considerado neste trabalho será o corpo dos números complexos, \mathbb{C} . Esta abordagem é necessária na Mecânica Quântica, onde a fase do número complexo possui papel primordial na composição de um estado.

Vamos ver dois exemplos sobre espaços vetoriais.

Exemplo 2.1. *Exemplo adaptado de STEINBRUCH e WINTERLE (1987).*

Seja $\mathbb{C} = \{a + bi = (a; b) / a, b \in \mathbb{R}\}$ o conjunto dos números complexos. Mostre que \mathbb{C} é um espaço vetorial.

Solução: Seja $u = x_1 + y_1i = (x_1; y_1)$, $v = x_2 + y_2i = (x_2; y_2)$ e $w = x_3 + y_3i = (x_3; y_3)$ números complexos, com $\{x_1, y_1, x_2, y_2, x_3, y_3\} \in \mathbb{R}$.

Vamos verificar os oito axiomas de espaço vetorial:

$$A1) (u + v) + w = ((x_1, y_1) + (x_2, y_2)) + (x_3, y_3)$$

$$(u + v) + w = ((x_1 + x_2, y_1 + y_2)) + (x_3, y_3)$$

$$(u + v) + w = ((x_1 + x_2) + x_3, (y_1 + y_2) + y_3)$$

$$(u + v) + w = (x_1 + (x_2 + x_3), y_1 + (y_2 + y_3))$$

$$(u + v) + w = (x_1, y_1) + (x_2 + x_3, y_2 + y_3)$$

$$(u + v) + w = (x_1, y_1) + ((x_2, y_2) + (x_3, y_3))$$

$$(u + v) + w = u + (v + w)$$

$$A2) u + v = (x_1, y_1) + (x_2, y_2)$$

$$u + v = (x_1 + x_2, y_1 + y_2)$$

$$u + v = (x_2 + x_1, y_2 + y_1)$$

$$u + v = (x_2, y_2) + (x_1, y_1)$$

$$u + v = v + u$$

$$A3) \exists 0 = (0, 0) \in \mathbb{C}, \forall \mathbf{u} \in \mathbb{C},$$

$$\begin{aligned} \mathbf{u} + 0 &= (x_1, y_1) + (0, 0) = \\ &= (x_1 + 0, y_1 + 0) = \\ &= (x_1, y_1) = \\ &= \mathbf{u} \end{aligned}$$

$$A4) \forall \mathbf{u} = (x_1, y_1) \in \mathbb{C}, \exists (-\mathbf{u}) = (-x_1, -y_1) \in \mathbb{C},$$

$$\begin{aligned} \mathbf{u} + (-\mathbf{u}) &= (x_1, y_1) + (-x_1, -y_1) \\ \mathbf{u} + (-\mathbf{u}) &= (x_1 - x_1, y_1 - y_1) \\ \mathbf{u} + (-\mathbf{u}) &= (0, 0) = 0 \end{aligned}$$

$$M1) \forall \alpha, \beta \in \mathbb{R},$$

$$\begin{aligned} (\alpha\beta)\mathbf{u} &= (\alpha\beta)(x_1, y_1) = ((\alpha\beta)x_1, (\alpha\beta)y_1) = (\alpha(\beta x_1), \alpha(\beta y_1)) \\ (\alpha\beta)\mathbf{u} &= \alpha(\beta x_1, \beta y_1) = \alpha(\beta(x_1, y_1)) \\ (\alpha\beta)\mathbf{u} &= \alpha(\beta\mathbf{u}) \end{aligned}$$

$$M2) (\alpha + \beta)\mathbf{u} = (\alpha + \beta)(x_1, y_1) = ((\alpha + \beta)x_1, (\alpha + \beta)y_1)$$

$$\begin{aligned} (\alpha + \beta)\mathbf{u} &= (\alpha x_1 + \beta x_1, \alpha y_1 + \beta y_1) = \\ (\alpha + \beta)\mathbf{u} &= (\alpha x_1, \alpha y_1) + (\beta x_1, \beta y_1) \\ (\alpha + \beta)\mathbf{u} &= \alpha(x_1, y_1) + \beta(x_1, y_1) = \alpha\mathbf{u} + \beta\mathbf{u} \end{aligned}$$

$$M3) \alpha(u + v) = \alpha((x_1, y_1) + (x_2, y_2)) = \alpha(x_1 + x_2, y_1 + y_2) = (\alpha(x_1 + x_2), \alpha(y_1 + y_2))$$

$$\begin{aligned} \alpha(u + v) &= (\alpha x_1 + \alpha x_2, \alpha y_1 + \alpha y_2) = (\alpha x_1, \alpha y_1) + (\alpha x_2, \alpha y_2) \\ \alpha(u + v) &= \alpha(x_1, y_1) + \alpha(x_2, y_2) = \alpha u + \alpha v \end{aligned}$$

$$M4) 1\mathbf{u} = 1(x_1, y_1) = (1x_1, 1y_1) = (x_1, y_1)$$

$$1\mathbf{u} = \mathbf{u}$$

Exemplo 2.2. *Exemplo presente em (POOLE, 2016, p.3).*

O conjunto de todas as matrizes 2×3 é um espaço vetorial com as operações usuais de adição de matrizes e multiplicação de matrizes por escalar. Aqui os "vetores" são, na verdade, matrizes. Sabemos que a soma de duas matrizes 2×3 é também uma matriz 2×3 , e que multiplicar uma matriz 2×3 por um escalar nos dá outra matriz 2×3 ; assim, temos o fechamento. Os axiomas restantes seguem o mesmo raciocínio. Em particular, o vetor nulo \mathbf{O} é a matriz nula 2×3 , e o oposto de uma matriz 2×3 é justamente a matriz $-A$, de ordem 2×3 .

Não há nada de especial sobre matrizes 2×3 . Para quaisquer inteiros positivos m e n , o conjunto de todas as matrizes $m \times n$ forma um espaço vetorial com as operações usuais de adição de matrizes e multiplicação de matriz por escalar. Esse espaço vetorial é denotado por M_{mn} .

Tomando como base o trabalho de LIMA (2016), seja V um espaço vetorial e W um subconjunto não vazio de V . Diz-se que W é um *subespaço vetorial* de V se forem verificadas as seguintes condições:

(S1) $0 \in W$;

(S2) Se $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in W$ então $\mathbf{u} + \mathbf{v} \in W$;

(S3) Se $\mathbf{u} \in W$ então $\lambda \mathbf{u} \in W$ para todo $\lambda \in F$.

É fácil verificar que, satisfazendo estas propriedades, os demais axiomas são automaticamente satisfeitos pelo fato de V ser um espaço vetorial. Portanto, todo subespaço vetorial é um espaço vetorial.

Partindo da ideia de subconjuntos, é intuitivo que todo espaço vetorial admite pelo menos dois subespaços: o conjunto unitário $\{0\}$ e o próprio espaço vetorial V . Estes dois subespaços são chamados *subespaços triviais* de V .

2.2 COMBINAÇÃO LINEAR, DEPENDÊNCIA LINEAR E BASE

Nessa seção apresentaremos as noções de combinação linear, dependência e independência linear e base de espaços vetoriais em geral. Este serão úteis para o sistema quântico que será desenvolvido na próxima seção.

2.2.1 COMBINAÇÃO LINEAR

Já sabemos que um subespaço vetorial é um subconjunto de um espaço vetorial que é fechado em relação à adição de vetores e também é fechado em relação à multiplicação de um escalar por um vetor. Portanto, quando multiplicamos um escalar por um vetor pertencente ao espaço vetorial, o resultado é um novo vetor que também pertence ao espaço vetorial; da mesma maneira, quando somamos dois vetores pertencentes ao espaço vetorial, obtemos um novo vetor, que também pertence ao espaço vetorial. Uma *combinação linear*, conforme a Definição 2.3 abaixo, é dada por:

Definição 2.3. Dado V um espaço vetorial em um corpo F seja o conjunto $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n\} \subset V$, com $n \in \mathbb{N}$. Todo vetor $\mathbf{v} \in V$ que possa ser escrito na forma

$$\mathbf{v} = \alpha_1 \mathbf{v}_1 + \alpha_2 \mathbf{v}_2 + \dots + \alpha_n \mathbf{v}_n$$

para $\{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n\} \subset F$ é dito uma combinação linear dos vetores $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n\}$, com $n \in \mathbb{N}$.

É importante notar que dado um conjunto $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n\} \subset V$, o conjunto das combinações lineares destes vetores,

$$S = \{\mathbf{v} \in V \mid \mathbf{v} = \alpha_1 \mathbf{v}_1 + \alpha_2 \mathbf{v}_2 + \dots + \alpha_n \mathbf{v}_n\} \quad (2.1)$$

é um subespaço vetorial de V . Este subespaço é chamado *subespaço gerado* por $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n\}$.

2.2.2 DEPENDÊNCIA E INDEPENDÊNCIA LINEAR

Alguns tipos de espaços vetoriais podem ser gerados por um número *finito* de vetores. Neste caso é importante descobrir qual é o número mínimo de vetores que gera este espaço. Em um conjunto de geradores podem haver vetores que, de certo ponto de vista, são “redundantes”, ou seja, eles mesmos são combinações lineares dos demais. Para obter este número mínimo de geradores é central o conceito de *dependência e independência linear* (STEINBRUCH; WINTERLE, 1987).

Segundo ANTON e RORRES (2012), se os vetores de um conjunto se inter-relacionarem, ou seja, um vetor do conjunto puder ser escrito como uma combinação linear de outros vetores do conjunto, pode haver complicações da descrição deste espaço. Podemos dizer que um conjunto de vetores é *linearmente independente* se nenhum desses vetores for combinação linear dos outros vetores do conjunto. A Definição 2.4 fornece um critério para determinar quando um conjunto de vetores é linearmente independente.

Definição 2.4. *Seja $W = \{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n\}$ um conjunto finito, não vazio formado por vetores de um espaço vetorial V . Então a equação*

$$\alpha_1 \mathbf{v}_1 + \alpha_2 \mathbf{v}_2 + \dots + \alpha_n \mathbf{v}_n = \mathbf{0} \quad (2.2)$$

possui ao menos a solução $\alpha_1 = \alpha_2 = \dots = \alpha_n = 0$, denominada solução trivial. Se a equação 2.2 possui apenas a solução trivial, dizemos que W é um conjunto linearmente independente (L.I.); se existirem outras soluções além da solução trivial, dizemos que W é um conjunto linearmente dependente (L.D.).

Vamos utilizar os conceitos de L.I. e L.D. nos exemplos abaixo.

Exemplo 2.5. Exemplo retirado de (POOLE, 2016, p.444).

Em M_{22} , considere

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, C = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Então, $A + B = C$ e, portanto, o conjunto $\{A, B, C\}$ é linearmente dependente.

Exemplo 2.6. Presente no livro (STEINBRUCH; WINTERLE, 1987, p.54).

No espaço vetorial $V = \mathbb{R}^4$, os vetores $v_1 = (2, 2, 3, 4)$, $v_2 = (0, 5, -3, 1)$ e $v_3 = (0, 0, 4, -2)$ são linearmente independentes. De fato:

$$a(2, 2, 3, 4) + b(0, 5, -3, 1) + c(0, 0, 4, -2) = (0, 0, 0, 0)$$

$$(2a, 2a, 3a, 4a) + (0, 5b, -3b, b) + (0, 0, 4c, -2c) = (0, 0, 0, 0)$$

$$(2a, 2a + 5b, 3a - 3b + 4c, 4a + b - 2c) = (0, 0, 0, 0)$$

isto é:

$$y = \begin{cases} 2a = 0 \\ 2a + 5b = 0 \\ 3a - 3b + 4c = 0 \\ 4a + b - 2c = 0 \end{cases}$$

O sistema admite unicamente a solução:

$$a = 0, b = 0 \text{ e } c = 0.$$

2.2.3 BASE DE UM ESPAÇO VETORIAL

Os conceitos de espaço gerado e dependência e independência linear permitem estabelecer o conceito de base. Na Mecânica Quântica os espaços vetoriais possuem, em geral, infinitas dimensões, de forma que são necessários infinitos vetores para gerar este tipo de espaço. No entanto, alguns tipos de sistemas físicos são baseados em espaços de dimensão finita. Apenas estes últimos tipos de espaço são necessários ao desenvolvimento dos conceitos explorados neste trabalho, e, portanto, serão os únicos apresentados.

Definição 2.7. *Sejam V um espaço vetorial e $\mathcal{B} = \{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n\}$ um conjunto finito de vetores em V . Dizemos que \mathcal{B} é uma base de V se as duas condições a seguir são satisfeitas:*

(B1) \mathcal{B} é L.I.;

(B2) \mathcal{B} gera V .

Se um espaço vetorial V possui uma base com n elementos, qualquer outra base de V possuirá o mesmo número de vetores. O número de elementos da base de V é chamado *dimensão* de V , e denota-se

$$\dim(V) = n.$$

Se W é subespaço de V temos que $\dim(W) \leq \dim(V)$.

Facilmente pode-se demonstrar que dois vetores não-colineares são L.I. e, esses dois vetores geram o \mathbb{R}^2 se estiverem os dois vetores no \mathbb{R}^2 .

Agora, consideremos em \mathbb{R}^n os vetores $\mathbf{e}_1 = (1, 0, 0, \dots, 0)$, $\mathbf{e}_2 = (0, 1, 0, \dots, 0)$, \dots , $\mathbf{e}_n = (1, 0, 0, \dots, 1)$. O conjunto $\mathcal{B} = \{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_n\}$ é L.I. em \mathbb{R}^n . Pode-se facilmente perceber

que todo vetor $\mathbf{v} = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$, em que \mathbf{V} é formado por um conjunto de vetores, pode ser escrito como uma combinação linear dos elementos de \mathcal{B} , ou seja,

$$\mathbf{v} = v_1 \mathbf{e}_1 + v_2 \mathbf{e}_2 + \dots + v_n \mathbf{e}_n. \quad (2.3)$$

Como \mathcal{B} é L.I. e gera \mathbb{R}^n , este conjunto é uma base de \mathbb{R}^n . Esta base é conhecida como *base canônica* do \mathbb{R}^n .

Exemplo 2.8. Retirado de (POOLE, 2016, p.448).

Encontre a base para o espaço vetorial $W_1 = \begin{pmatrix} a \\ b \\ -b \\ a \end{pmatrix}$, com $W_1 \in \mathbb{R}^4$ e $a, b \in \mathbb{R}$.

Solução: Como $\begin{pmatrix} a \\ b \\ -b \\ a \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$, temos que $W_1 = \text{ger}(u, v)$ ¹, sendo $u = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ e

$$v = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

2.3 TRANSFORMAÇÕES LINEARES

2.3.1 O CONCEITO DE TRANSFORMAÇÃO LINEAR

O conceito de transformação linear é central na Mecânica Quântica. Neste trabalho será apresentado o conceito de transformações lineares entre dois espaços vetoriais quaisquer.

Uma transformação é um tipo especial de função (aplicação) na qual o conjunto domínio e o conjunto contradomínio são espaços vetoriais. Logo, as variáveis dependente e independente são representadas por vetores, como nos apresentam STEINBRUCH e WINTERLE (1987) e POOLE (2016) na definição a seguir:

Definição 2.9. *Uma transformação linear é uma aplicação $T : V \rightarrow W$ de um espaço vetorial V em outro espaço vetorial W , definidos no mesmo corpo F , tal que, $\forall \mathbf{u}, \mathbf{v} \in V$ e $\alpha \in F$ valem as relações abaixo:*

1. $T(\mathbf{u} + \mathbf{v}) = T(\mathbf{u}) + T(\mathbf{v})$;
2. $T(\alpha \mathbf{u}) = \alpha T(\mathbf{u})$.

¹ Significa dizer que o espaço vetorial W_1 é gerado pelos vetores u e v .

Caso $W = V$ a transformação T é chamada de *operador linear* em V (ANTON; RORRES, 2012).

O uso da palavra “linear” pode levar a uma generalização nem sempre verdadeira, ou seja, concluir que toda função linear automaticamente será uma transformação linear. Note, no entanto, que a Definição 2.9 implica necessariamente que $T(0) = 0$. Podemos citar como exemplo a função $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = x + 1$. Esta função não é uma transformação linear do espaço vetorial, pois $f(0) = 1 \neq 0$. A função $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $g(x) = 2x$ é uma transformação linear do espaço vetorial, pois $g(x + y) = 2(x + y) = 2x + 2y = g(x) + g(y)$ e $g(\alpha x) = 2\alpha x = \alpha 2x = \alpha g(x)$ para quaisquer $x, y, \alpha \in \mathbb{R}$.

2.3.2 REPRESENTAÇÃO MATRICIAL DE UMA TRANSFORMAÇÃO LINEAR

Sabemos “que matrizes podem ser usadas para transformar vetores, agindo como um tipo de ‘função’ da forma $\mathbf{w} = T(\mathbf{v})$ em que a variável independente v e a variável dependente w são vetores.”(POOLE, 2016). Inicialmente vamos definir o que é uma transformação matricial. Para tanto, usaremos a definição presente em FIGUEIREDO (2009, p.8).

Definição 2.10. *Seja A uma matriz $m \times n$. Para toda função dada por $T(x) = Ax$, a aplicação $T : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ dada por $x \rightarrow Ax$ é uma transformação matricial.*

Agora, de posse da definição de transformação matricial nos é possível definir uma transformação linear representada por matrizes. Usaremos a definição de transformação linear matricial presente em POOLE (2016).

Definição 2.11. *Seja A uma matriz $m \times n$. A transformação matricial $T(A) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ definida por $T_A(\mathbf{x}) = A\mathbf{x}$ (para \mathbf{x} em \mathbb{R}^n) é uma transformação linear.*

Exemplo 2.12. Exemplo em (POOLE, 2016, p.473).

Definido que $T : M_{n \times n} \rightarrow M_{n \times n}$ por $T(A) = A^t$. Prove que T é uma transformação linear.

Solução: Verificamos que, para A e B em $M_{n \times n}$ e escalar c ,

$$T(A + B) = (A + B)^t = A^t + B^t = T(A) + T(B)$$

$$T(cA) = (cA)^t = cA^t = cT(A)$$

e, portanto, T é uma transformação linear.

2.4 AUTOVALORES E AUTOVETORES

O estudo de autovalores e autovetores é importante para a matemática, com aplicações na engenharia, na física, na química e outras ciências; com destaque para estatística, mecânica

quântica, processamento de imagens e mecânica dos sólidos.

2.4.1 UMA INTRODUÇÃO A AUTOVALORES E AUTOVETORES

O conceito de autovalor e autovetor é um recurso de suma importância no ensino da álgebra linear, principalmente quando usada com matrizes. Nesta seção, todas as vezes em que falarmos em matrizes, fica subentendido que essas matrizes são quadradas, salvo se for dito algo distinto disso.

Definição 2.13. *Sejam A uma matriz quadrada de ordem n e λ um escalar ($\lambda \in \mathbb{R}$), diz-se que λ é o autovalor (também chamado de valor próprio ou valor característico) de A se existir um vetor não nulo x tal que $Ax = \lambda x$. Neste caso o vetor x é denominado de autovetor (ou vetor próprio ou vetor característico) de A associado a λ .*

Embora o autovetor não possa ser nulo - conforme definição 2.13 -, o autovalor pode ser nulo.

Para uma melhor compreensão segue o exemplo.

Exemplo 2.14. Mostre que o vetor $x = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}$ é um autovetor de $A = \begin{pmatrix} 3 & 5 \\ 5 & 3 \end{pmatrix}$ e encontre o autovalor correspondente.

Solução: Fazendo os cálculos, $Ax = \begin{pmatrix} 3 & 5 \\ 5 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 16 \\ 16 \end{pmatrix} = 8 \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix} = 8x$, de onde segue que x é um autovetor de A associado ao autovalor 8.

Definição 2.15. *Agora considere o conjunto de todos os autovetores associados a λ (que é o conjunto dos vetores não nulos do espaço anulado por $A - \lambda I$, acrescidos do vetor nulo, é chamado de autoespaço de λ , e denotado por E_λ o conjunto de todos os autovetores associados a um autovalor.*

2.4.2 DETERMINANTES, AUTOVALORES E AUTOVETORES

Para determinar o autovalor de uma matriz, segundo (POOLE, 2016), deve-se partir da definição 2.15, $A - \lambda I$, e perceber que λ é um autovalor de A se e somente se o espaço anulado por $A - \lambda I$ é não trivial. Isso só ocorrerá se o $\det(A - \lambda I) = 0$.²

Definição 2.16. *Seja A uma matriz quadrada de ordem n , os autovalores de A é o conjunto das soluções λ da equação $\det(A - \lambda I) = 0$.*

² A matriz A é inversível se e somente se $\det A$ é não nulo. Sabe-se também, pelo Teorema Fundamental das Matrizes Inversíveis que uma matriz determina um espaço anulado não trivial se e somente se ela é não inversível, ou seja, se e somente se o seu determinante é igual a zero.

Ao desenvolver $\det(A - \lambda I) = 0$, obtém-se um polinômio em λ ,

$$P(\lambda) = \det(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} - \lambda \end{vmatrix}$$

é chamado de polinômio característico de A . Já a equação $P(\lambda) = \det(A - \lambda I) = 0$, é chamada de equação característica de A . Como a matriz A é quadrada de ordem n , teremos então um polinômio característico de grau n , com no máximo n autovalores distintos.³

Para determinarmos os autovetores, deve-se para cada autovalor λ , encontrar todas as soluções não triviais do sistema linear homogêneo $(A - \lambda I)x = 0$. Essas soluções serão os autovetores de A associados ao autovalores λ .

Segue exemplo para uma melhor compreensão dos conceitos de autovalor e autovetor.

Exemplo 2.17. Encontre os autovalores e autovetores de $A = \begin{pmatrix} 3 & 4 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$

Solução: Primeiro vamos determinar os autovalores, resolvendo a equação $\det(A - \lambda I) = 0$.

$$\begin{aligned} \begin{vmatrix} 3 - \lambda & 4 \\ 2 & 1 - \lambda \end{vmatrix} &= 0, \\ (3 - \lambda)(1 - \lambda) - 8 &= 0, \\ \lambda^2 - 4\lambda - 5 &= 0. \end{aligned}$$

As raízes desta equação, correspondentes aos autovalores, são $\lambda_1 = 5$ e $\lambda_2 = -1$.

Agora vamos determinar os autovetores de A , substituindo cada um dos autovalores encontrados e encontrando as soluções não triviais do sistema linear homogêneo $(A - \lambda I)x = 0$; com $x = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$.

$$\begin{aligned} (A - \lambda I)x &= 0, \\ \begin{pmatrix} 3 - \lambda & 4 \\ 2 & 1 - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Para $\lambda_1 = 5$, temos:

$$\begin{pmatrix} -2 & 4 \\ 2 & -4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

³ O Teorema Fundamental da Álgebra diz que um polinômio de grau n , com coeficientes reais ou complexos, tem no máximo n raízes distintas.

Esta equação matricial corresponde ao seguinte sistema linear:

$$\begin{cases} -2a + 4b = 0, \\ 2a - 4b = 0, \end{cases}$$

Cujas soluções (autovetores) são dadas pela relação $a = 2b$, ou seja,

$$x_1 = b \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}, \forall b \in \mathbb{R}.$$

Similarmente, para $\lambda_2 = -1$, temos, para os autovetores:

$$x_2 = b \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \forall b \in \mathbb{R}.$$

Para verificar os autovalores e autovetores encontrados basta utilizar a matriz A :

$$Ax_1 = \begin{pmatrix} 3 & 4 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2b \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10b \\ 5b \end{pmatrix} = 5 \begin{pmatrix} 2b \\ b \end{pmatrix} = \lambda_1 x_1,$$
$$Ax_2 = \begin{pmatrix} 3 & 4 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -b \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ -b \end{pmatrix} = (-1) \begin{pmatrix} -b \\ b \end{pmatrix} = \lambda_2 x_2.$$

3 ESPAÇO DE HILBERT

3.1 PRODUTO INTERNO

3.1.1 PRODUTO INTERNO REAL

Normalmente no estudo de álgebra linear, trabalhamos com o conceito de produto interno no conjunto dos números reais. Vamos relembrar o conceito de produto interno, no conjunto dos números reais. Conforme (ANTON; RORRES, 2012) o produto interno no conjunto dos números reais, é definido a seguir:

Definição 3.1. *Seja V um espaço vetorial real. O produto interno é uma função que associa a cada par $(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \in V \times V$ um número real denotado por $\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle$ tal que em que os axiomas abaixo são válidos para quaisquer $\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w} \in V$ e $\alpha \in \mathbb{R}$:*

$$(P1) \langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle = \langle \mathbf{v}, \mathbf{u} \rangle;$$

$$(P2) \langle \mathbf{u} + \mathbf{w}, \mathbf{v} \rangle = \langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle + \langle \mathbf{w}, \mathbf{v} \rangle;$$

$$(P3) \langle \alpha \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle = \alpha \langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle;$$

$$(P4) \langle \mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle \geq 0 \text{ e } \langle \mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle = 0 \text{ se, e somente se, } \mathbf{u} = \mathbf{0}.$$

Um espaço vetorial munido de um produto interno é conhecido como espaço euclidiano. Podemos elencar mais alguns elementos importantes associados ao produto interno como destaca POOLE (2016):

1. Seja V um espaço euclidiano, para todo $\mathbf{u} \in V$ o número $\|\mathbf{u}\| = \sqrt{\langle \mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle}$ é chamado de *norma* do vetor \mathbf{u} , que representa geometricamente o comprimento deste vetor;
2. Seja V um espaço euclidiano, para todo $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in V$, a *distância* entre \mathbf{u} e \mathbf{v} é definido como sendo $d(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \|\mathbf{u} - \mathbf{v}\|$;
3. Partindo da desigualdade de Cauchy-Schwarz, chega-se a conclusão que dados $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in V$, V sendo um espaço euclidiano, o *ângulo* formado entre os vetores \mathbf{u} e \mathbf{v} é dado por $\cos \theta = \frac{\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle}{\|\mathbf{u}\| \|\mathbf{v}\|}$, com $\theta \in [0, \pi]$;
4. Em particular, para $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in V$, diz-se que \mathbf{u} e \mathbf{v} são *ortogonais* se $\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle = 0$.

3.1.2 PRODUTO INTERNO COMPLEXO

Até o momento o nosso padrão tem sido o conjunto dos números reais e, todas as definições e relações matemáticas se relacionavam ao conjunto dos números reais. Agora, iremos aprofundar a noção de produto interno, trabalhando com espaços vetoriais complexos. Temos a seguinte definição:

Definição 3.2. *Seja V um espaço vetorial complexo. O produto interno complexo é uma função que associa a cada par $(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \in V \times V$ um número complexo denotado por $\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle$ tal que em que os axiomas abaixo são válidos para quaisquer $\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w} \in V$ e $\alpha \in \mathbb{C}$:*

$$(P1') \quad \langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle = \overline{\langle \mathbf{v}, \mathbf{u} \rangle}^1;$$

$$(P2) \quad \langle \mathbf{u} + \mathbf{w}, \mathbf{v} \rangle = \langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle + \langle \mathbf{w}, \mathbf{v} \rangle;$$

$$(P3) \quad \langle \alpha \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle = \alpha \langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle;$$

$$(P4) \quad \langle \mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle \geq 0 \text{ e } \langle \mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle = 0 \text{ se, e somente se, } \mathbf{u} = \mathbf{0}.$$

A propriedade $(P1')$ da Definição 3.2 é justificável se pensarmos que, ao se utilizar a propriedade $(P1)$ da Definição 3.1, poderíamos construir um produto interno para \mathbb{C}^n análogo ao de \mathbb{R}^n , ou seja, multiplicando-se as componentes. Vamos denotar este produto por $\langle \cdot, \cdot | \cdot, \cdot \rangle_{\mathbb{R}}$. Porém, neste caso a propriedade $(P4)$ é violada. Vamos mostrar um exemplo em que isto acontece.

Exemplo 3.3. Adaptado de (POOLE, 2016). Seja $\mathbf{v} = (i, 1)$ um vetor no espaço vetorial dos números complexos. Temos que

$$\langle \mathbf{v}, \mathbf{v} \rangle_{\mathbb{R}} = i \cdot i + 1 \cdot 1 = -1 + 1 = \sqrt{0} = 0.$$

Ou seja, temos $\mathbf{v} \neq \mathbf{0}$ tal que $\langle \mathbf{v}, \mathbf{v} \rangle_{\mathbb{R}} = 0$ se utilizarmos o produto interno real.

Por isso, conforme POOLE (2016), a definição de produto interno no conjunto dos números complexos é ligeiramente diferente da definição de produto interno no conjunto dos números reais ao trocar-se a propriedade de simetria pela propriedade de *simetria hermitiana*². Sendo assim, podemos escrever o produto interno em \mathbb{C}^n , por exemplo, de acordo com a definição a seguir:

Definição 3.4. *Dado os vetores $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3, \dots, u_n)$ e $\mathbf{v} = (v_1, v_2, v_3, \dots, v_n)$ de \mathbb{C}^n o produto interno é dado por*

¹ Seja $z = a + bi$, com $a, b \in \mathbb{R}$, um número complexo na forma algébrica. O conjugado de z , denotado por \bar{z} , é representado por $\bar{z} = a - bi$, com $a, b \in \mathbb{R}$.

² Essa propriedade Hermitiana também se aplica à propriedade da homogeneidade. Por isso, a propriedade $P3$ da Definição 3.2 poderia ser escrita $\langle \alpha \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle = \bar{\alpha} \langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle$.

$$\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle = \bar{u}_1 v_1 + \bar{u}_2 v_2 + \bar{u}_3 v_3 + \cdots + \bar{u}_n v_n.$$

Assim como um espaço vetorial real com norma é chamado de espaço euclidiano, um espaço vetorial complexo com norma é dito *espaço unitário*.

Note que, pela propriedade $(P1')$ temos $\langle \mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle = \overline{\langle \mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle}$, o que implica que $\langle \mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle \in \mathbb{R}$, e justifica a manutenção da propriedade $(P4)$ como no caso real. De maneira análoga ao caso real é possível definir também o conceito de norma no espaço vetorial complexo, e assim poder conceituar o que é um espaço normado:

Definição 3.5. *Seja V um espaço vetorial nos complexos, para todo $\mathbf{u} \in V$ o número $\|\mathbf{u}\| = \sqrt{\langle \mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle}$ é chamado de norma do vetor \mathbf{u} . A distância entre dois vetores $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in V$ neste caso é dada por $\|\mathbf{u} - \mathbf{v}\|$. Esta função distância é dita induzida pelo produto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle$.*

O estabelecimento da função distância com suas propriedades (não negatividade, simetria, distância nula e desigualdade triangular) fazem com que todo espaço vetorial munido de um produto interno seja também um *espaço métrico*. Vamos agora estudar um tipo especial de espaço vetorial munido de produto interno, o *Espaço de Hilbert*, que é o espaço no qual a Mecânica Quântica foi desenvolvida.

3.2 FUNCIONAIS LINEARES E ESPAÇO DUAL

É fácil mostrar que as transformações lineares $T : V \rightarrow W$ entre dois espaços vetoriais formam um espaço vetorial próprio. Dado o espaço vetorial V no corpo F , seja o espaço das transformações lineares $f : V \rightarrow F$. Estas transformações são chamadas *funcionais lineares*.

O espaço dos funcionais lineares é chamado *espaço dual* e denotado V^* . Se V possui dimensão finita é fácil demonstrar que os dois espaços possuem a mesma dimensão. Se o espaço é munido de produto interno, existe um isomorfismo que associa a cada $f_{\mathbf{u}} \in V^*$ um elemento $\mathbf{u} \in V$ tal que $f_{\mathbf{u}}(\mathbf{v}) = \langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle$.

Se o espaço possui dimensão infinita, no entanto, o espaço dual é *maior* do que o espaço original, no sentido que, para todo $\mathbf{v} \in V$ é possível associar um único $f \in V^*$, porém o contrário nem sempre ocorre, ou seja, temos ao menos um elemento $f \in V^*$ ao qual não podemos associar nenhum $\mathbf{v} \in V$ (BUENO, 2002).

3.3 ESPAÇO DE HILBERT

Dentre os espaços vetoriais munidos de produto interno, na mecânica quântica e em várias áreas da matemática (principalmente probabilidade), o espaço de Hilbert é um dos mais relevantes. Podemos definir um espaço de Hilbert como:

Definição 3.6. *Seja H um espaço vetorial munido de produto interno $\langle \cdot, \cdot | \cdot, \cdot \rangle$. Se ele for um espaço métrico completo com relação à função distância induzida pelo produto interno, diz-se que H é um espaço de Hilbert.*

Não será aqui fornecida a definição de espaço métrico completo, bem como a demonstração de que \mathbb{C}^n é um conjunto completo, pois foge ao escopo deste trabalho. Esse tipo de demonstração pode ser encontrada em diversos livros de análise funcional (KREYSZIG, 2007). Em linhas gerais, um espaço métrico completo é aquele em que toda sequência de Cauchy converge para um elemento do espaço.

Conforme afirma LOPES (2017), algumas vezes é útil usarmos a notação $\langle x|y \rangle$ ao invés da notação $\langle x, y \rangle$. Esta notação é baseada na notação “bra-ket” introduzida por Paul Dirac em (DIRAC, 1930).

3.4 OPERADORES HERMITIANOS

Operadores lineares, conforme visto anteriormente, são transformações lineares que operam em um único espaço vetorial. Se este espaço vetorial é munido de um produto interno, podemos nos perguntar o que ocorre com o produto interno ao aplicarmos este operador em um dos elementos. Para alguns tipos de operador, é indiferente se aplicamos o operador no primeiro ou no segundo membro do produto, conforme a definição a seguir:

Definição 3.7. *Sejam V um espaço vetorial complexo munido de um produto interno $\langle \cdot, \cdot | \cdot, \cdot \rangle$, H um subespaço de V e o operador linear $T : H \rightarrow V$. Diz-se que T é um operador hermitiano em H se para todo $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in H$ for válida a igualdade*

$$\langle T(\mathbf{u}), \mathbf{v} \rangle = \langle \mathbf{u}, T(\mathbf{v}) \rangle.$$

Para um operador linear em um espaço vetorial complexo, os seus autovalores podem ser reais ou complexos. Porém, se \mathbf{u} é um autovetor de um operador hermitiano com autovalor λ , temos

$$\begin{aligned} \langle T(\mathbf{u}), \mathbf{u} \rangle &= \langle \lambda \mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle = \lambda \langle \mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle, \\ \langle \mathbf{u}, T(\mathbf{u}) \rangle &= \langle \mathbf{u}, \lambda \mathbf{u} \rangle = \bar{\lambda} \langle \mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle. \end{aligned}$$

Pela igualdade dos dois termos que $\lambda = \bar{\lambda}$, ou seja, $\lambda \in \mathbb{R}$. Ou seja, todos os autovalores de um operador hermitiano são *reais*. Além disso, se \mathbf{u}_1 é um autovetor cujo autovalor é λ_1 e \mathbf{u}_2 é um autovetor cujo autovalor é λ_2 com $\lambda_1 \neq \lambda_2$, temos

$$\begin{aligned} \langle T(\mathbf{u}_1), \mathbf{u}_2 \rangle &= \lambda_1 \langle \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2 \rangle, \\ \langle \mathbf{u}_1, T(\mathbf{u}_2) \rangle &= \lambda_2 \langle \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2 \rangle. \end{aligned}$$

Novamente pela igualdade das duas expressões e pelo fato que $\lambda_1 \neq \lambda_2$ devemos ter $\langle \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2 \rangle = 0$, ou seja, autovetores associados a autovalores diferentes são *ortogonais*. Isto permite formar

uma base ortonormal de autovetores para um espaço de dimensão finita. Estas propriedades são fundamentais para a Mecânica Quântica, como veremos no próximo capítulo, conforme nos diz (SHOSHANY, 2018, p.16):

Na teoria quântica, operadores hermitianos correspondem a observáveis, isto é, propriedades do sistema que podem ser medidos. Os autovalores destes operadores correspondem aos diferentes resultados possíveis da medição. Isso faz sentido porque sempre medimos números reais; não há dispositivos de medição que medem números complexos! Exemplos de observáveis são: posição, momento, momento angular, energia e spin. Todos esses podem ser representados como operadores Hermitianos em um espaço apropriado de Hilbert.³

³ “In quantum theory, Hermitian operators correspond to observables, that is, properties of the system that can be measured. The eigenvalues of these operators correspond to the different possible outcomes of the measurement. This makes sense because we always measure real numbers; there are no measurement devices that measure complex numbers! Examples of observables are position, momentum, angular momentum, energy and spin. All of these may be represented as Hermitian operators on an appropriate Hilbert space”.(SHOSHANY, 2018, p.16)

4 POSTULADOS DA MECÂNICA QUÂNTICA

Na mecânica clássica, estamos habituados a prever posições e velocidades das partículas em um determinado estado de movimento, por exemplo, fazendo uso das equações de Newton. Conforme nos diz COHEN-TANNOUJDI (1977), com controle determinístico, uma partícula pode ser representada usualmente pela n -upla $(x, y, z, \rho_x, \rho_y, \rho_z)$, onde a representação vetorial seria dada pelo par ordenado $(\mathbf{r}, \vec{\rho})$, em que \mathbf{r} é o vetor posição e $\vec{\rho}$ é o vetor momento. Isso significa dizer que dado o vetor $(\mathbf{r}_0, \vec{\rho}_0)$ representando um estado inicial e sabendo as forças que agem sobre esse sistema, somos capazes de determinar o vetor $(\mathbf{r}_t, \vec{\rho}_t)$ em qualquer instante t de forma *determinística*.

Comparado com à mecânica clássica, na mecânica quântica não podemos medir posições e velocidades de maneira determinística, mas como nos diz MERZBACHER (1961) a mecânica quântica nos permite descrever, correlacionar e prever o comportamento de uma vasta gama de sistemas físicos. Conforme JAMMER (1966), elas são descritas *probabilisticamente* por meio de funções das coordenadas do espaço, podendo ser representadas por $\Psi(\mathbf{r}, t)$ ou $\Phi(\vec{\rho}, t)$. Essas funções são chamadas de *funções de estado* ou *funções de onda*. Para determinar essas funções Ψ das coordenadas de um sistema e tempo, fazemos uso da equação de onda de Schrödinger e seus postulados auxiliares. Referente a essas funções (PAULING; WILSON, 1935, p.51) escreve:

O quadrado do valor absoluto de uma determinada função de onda é interpretado como uma função de distribuição de probabilidade para as coordenadas do sistema no estado representado por esta função de onda [...] Além de produzir a amplitude de probabilidade ou a função de onda Ψ , a equação de Schrödinger fornece um método de cálculo de valores da energia dos estados estacionários de um sistema.¹

Um conceito fundamental na mecânica quântica é o Princípio da Incerteza de Heisenberg (LIBOFF, 1998; GRIFFITHS, 1995), o qual estabelece que, devido à dualidade onda-partícula, *é impossível medir com precisão a posição e o momento linear de uma partícula* (HEISENBERG, 1958). De acordo com este princípio, não podemos dizer com exatidão onde a partícula estará no instante t , sem perder toda a informação sobre o seu movimento. Isto ocorre mesmo que a função de onda seja obtida deterministicamente. Na prática, podemos inferir sobre a probabilidade de que a partícula esteja ou não em determinada posição com determinada velocidade.

Ao passo que na mecânica clássica basta um espaço \mathbf{R}^6 para descrever o movimento de uma partícula, na mecânica quântica é preciso um espaço de Hilbert de dimensão infinita. O estado de uma partícula é representado por um vetor deste espaço. A função de onda é uma representação deste vetor na base das posições ou dos momentos.

¹ "The square of the absolute value of a given wave function is interpreted as a probability distribution function for the coordinates of the system in the state represented by this wave function [...] Besides yielding the probability amplitude or wave function Ψ , the Schrödinger equation provides a method of calculating values of the energy of the stationary states of a system."(PAULING; WILSON, 1935, p.51)

4.1 UM POUCO DE FORMALISMO

4.1.1 NOTAÇÃO DE DIRAC

A notação de Dirac, definida por DIRAC (1930), segundo NOVAES e STUDART (2016), é uma forma de escrever a função de onda como sendo um estado para o sistema estudado. Essa notação nos permite ao invés de falar sobre uma variável específica (por exemplo: posição ou momento), falar sobre o estado.

Essa notação, amplamente utilizada na mecânica quântica, pode ser representada como nos diz SAKURAI (1994), que a cada vetor \mathbf{u} , denotado por ket, representado por $|u\rangle$ existe um bra, representado por $\langle v|$.

Ainda sobre o conceito de função de onda e de estado “dizemos que as funções de onda [...] 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.” (NOVAES; STUDART, 2016).

4.1.2 OBSERVÁVEIS E OPERADORES

Um observável nada mais é do que uma quantidade física, como por exemplo: o spin, a posição, o momento e outros. Vale ressaltar que um observável nem sempre representa uma grandeza física. Esse observável é representado por um operador que provoca uma mudança de estado. Esse observável é colocado à esquerda do ket. Por exemplo, o operador do observável momento p pode ser representado como $\hat{P}|p\rangle$. Cabe aqui destacar um operador de muita importância para a mecânica quântica, o *operador Hamiltoniano*, ou simplesmente denominado de *Hamiltoniana*. Conforme nos diz NOVAES e STUDART (2016) esse operador equipara-se à energia do sistema.

4.2 ESTADO DE SISTEMA

Como já mencionado anteriormente, a mecânica quântica trabalha no campo da probabilidade e, portanto, a densidade de probabilidade é imprescindível. A função de onda de um sistema, conforme COHEN-TANNOUDI (1977) contém em si todas as informações possíveis de serem obtidas de uma partícula associada a essa função Ψ . A densidade de probabilidade para que uma partícula esteja em uma posição \mathbf{r} no instante t é dada por $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$, sendo $\Psi(\mathbf{r}, t)$ a função de onda do sistema. De maneira análoga, a probabilidade de que a partícula possua momento linear \vec{p} no instante t é dada por $|\Phi(\vec{p}, t)|^2$. As funções Ψ e Φ estão relacionadas por uma transformação de Fourier e são, portanto, diferentes representações de um mesmo objeto. Este objeto é um vetor (*ket*) de um espaço de Hilbert de dimensão infinita denotado por \mathcal{E}_r e denotado por $|\Psi(t)\rangle$. O valor da função de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ para cada \mathbf{r} representa o coeficiente

relativo à base ortonormal $\{|\mathbf{r}\rangle\}$, ou seja,

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r} | \Psi(t) \rangle .$$

De maneira análoga, temos para $\Phi(\vec{\rho}, t)$,

$$\Phi(\vec{\rho}, t) = \langle \vec{\rho} | \Psi(t) \rangle ,$$

sendo $\{|\vec{\rho}\rangle\}$ a base ortonormal dos momentos. De fato, para uma base $\{|\alpha\rangle\}$ temos, em geral:

$$\Phi(\alpha, t) = \langle \alpha | \Psi(t) \rangle .$$

Para considerar outros tipos de medida, como por exemplo, o spin, é preciso definir um espaço de estados mais complexo, formado pelo produto tensorial de diversos espaços. A definição deste espaço foge ao escopo deste trabalho, por isso, adotaremos uma simplificação. Ao abordarmos o spin, em vez de trabalharmos no espaço $\mathcal{E} = \mathcal{E}_r \otimes \mathcal{E}_S$, vamos considerar apenas o espaço \mathcal{E}_S . Este espaço é finito (de dimensão dois).

Com base neste conceito, temos então o primeiro postulado da Mecânica Quântica (COHEN-TANNOUJJI, 1977):

1º Postulado: Em um instante t o estado de um sistema físico é definido por um vetor (ket) $|\Psi(t)\rangle$ pertencente ao espaço de estados \mathcal{E} .

4.3 MEDIDAS

Em um instante t , dado um determinado estado $|\Psi(t)\rangle$, é preciso saber como efetuar uma medida. A medida de um determinado estado é efetuada atuando-se sobre este estado. O resultado final será outro estado de \mathcal{E} . Uma medida deve atender a alguns requisitos:

1. A medida deve refletir a sobreposição linear de estados;
2. O resultado de uma medida deve ser um número real;
3. Deve ser possível medir qualquer estado do sistema físico.

Portanto, temos os seguintes postulados:

2º Postulado: Qualquer quantidade física \mathcal{A} é descrita por um operador A atuando em \mathcal{E} . Este operador é um *observável*.

3º Postulado: Os únicos resultados possíveis da medida da quantidade física \mathcal{A} são os autovalores do observável correspondente A .

4.4 PROBABILIDADES

Vamos considerar um sistema em que o estado é definido, em um dado instante, por $|\Psi\rangle$, em que: $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$. Para prevermos o resultado da medição de uma quantidade física \mathcal{A} associada ao observável A , devemos estabelecer regras que nos permitam calcular a amplitude de obtermos autovalores de A .

Neste trabalho apenas trataremos do caso em que o espectro é discreto e não degenerado². Para tanto, vamos supor que o espectro do observável A é inteiramente discreto. Se todos os autovalores a_n de A forem não degenerados, a cada autovalor está associado um único autovetor $|u_n\rangle$:

$$A|u_n\rangle = a_n|u_n\rangle \quad (4.1)$$

Como A é um observável, o conjunto $|u_n\rangle$, considerado normalizado, constitui uma base ortonormal em \mathcal{E} , em que um vetor de estado genérico $|\Psi\rangle$ pode ser escrito:

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |u_n\rangle. \quad (4.2)$$

As quantidades c_n estão associadas à probabilidade de se obter cada autovalor a_n . De fato, temos o seguinte postulado:

4º Postulado: Toda vez que uma quantidade física associada a um operador é medida no sistema de estado normalizado $|\Psi\rangle$, a probabilidade de se obter um específico autovalor a_n é dada por: $p(a_n) = |\langle u_n|\Psi\rangle|^2$. Onde $|u_n\rangle$ é um autovetor normalizado associado ao autovalor a_n .

De acordo com o postulado acima, se $|\Psi\rangle$ é dado conforme a Equação 4.2 a probabilidade de se obter o autovalor a_n é, portanto, $p(a_n) = |c_n|^2$.

4.5 REDUÇÃO DO PACOTE DE ONDA

Imaginemos agora um estado $|\Psi\rangle$ que está associado a um estado físico antes de uma medida \mathcal{A} ser realizada, da qual temos as probabilidades dos possíveis resultados, que são os autovalores do observável A . Após a medição, teremos um novo estado diferente do $|\Psi\rangle$ da medida inicial. Ao efetuarmos uma nova medida, imediatamente depois da primeira, devemos obter o mesmo resultado com uma probabilidade 1. Em outras palavras, seja a_n o autovalor não degenerado que representa o resultado após a medida. O autovetor $|u_n\rangle$ de \mathcal{A} associado à medida a_n deve representar o estado do sistema *após* esta medida. Então podemos escrever o postulado:

² Os outros casos estão presentes em (COHEN-TANNOUDJI, 1977, p.217-219)

5º Postulado: Se a medida de uma quantidade física \mathcal{A} em um sistema de estado $|\Psi\rangle$ tem como resultado a_n , o estado do sistema imediatamente após a medida é a projeção normalizada de $|\Psi\rangle$, $\frac{P_n|\Psi\rangle}{\sqrt{\langle\Psi|P_n|\Psi\rangle}}$, no auto subespaço associado a a_n .

Considerando um espectro não degenerado os autosubespaços são gerados pelo único autovetor correspondente, ou seja, se a medida for a_n o sistema estará no estado $|u_n\rangle$. Este postulado também é conhecido como o *Colapso da Função de Onda*, segundo a *Interpretação de Copenhagen* e está no centro de uma das maiores polêmicas envolvendo a Mecânica Quântica.

4.6 A EVOLUÇÃO TEMPORAL DOS SISTEMAS

Enquanto não for efetuada uma medida no sistema, ele evoluirá de acordo com as leis físicas. No caso da Mecânica Quântica não relativística, a evolução temporal do vetor de estado $|\Psi\rangle$ é regida pela equação de Schrödinger³. Portanto, temos o postulado:

6º Postulado: A evolução temporal do vetor de estado $|\Psi(t)\rangle$ é governada pela Equação de Schrödinger:

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = H(t)|\Psi(t)\rangle,$$

onde $H(t)$ é o observável associado ao total de energia do sistema, ou seja, H é o *operador Hamiltoniano*.

Neste caso o operador Hamiltoniano H pode depender explicitamente do tempo. Caso esta dependência explícita não ocorra o Hamiltoniano é um observável cujos autovalores fornecem o espectro de autoenergias do sistema. O Hamiltoniano, portanto, é um dos observáveis mais relevantes, pois define quais as energias um determinado sistema pode obter.

Os postulados da Mecânica Quântica tradicional não são difíceis de se compreender com uma base mínima de Álgebra Linear. A dificuldade normalmente se encontra na interpretação física dos resultados, a qual, em diversas situações, não pode ser reduzida ao caso da Mecânica Clássica. Por isso, é importante o estudo de casos que, embora simples, fornecem efeitos que desafiam a intuição clássica. Quanto mais cedo os estudantes forem expostos a este tipo de efeitos, mais cedo podem adquirir uma intuição “quântica” dos conceitos com eles.

³ Neste trabalho consideraremos a interpretação de Schrödinger, na qual os estados evoluem temporalmente. A interpretação de Heisenberg, segundo a qual os observáveis evoluem temporalmente, é totalmente equivalente, e foge ao escopo deste texto.

5 SPIN UM, SPIN MEIO E SISTEMAS DE DOIS NÍVEIS

5.1 O SPIN

A demonstração da quantização dos componentes do momentum angular (também às vezes chamada “quantização do espaço”) devida à Otto Stern e Walter (GERLACH; STERN, 1922) é um dos mais conhecidos experimentos canônicos da Mecânica Quântica, especialmente pela elegância de sua simplicidade conceitual (DUCK; SUDARSHAN, 1998). Os resultados deste experimento foram publicados em 1922, porém, sua interpretação correta ocorreu apenas em 1927.

O conceito de *spin* foi introduzido no estudo do espectro de emissão de metais alcalinos. Em 1924, Wolfgang Pauli introduziu um “grau de liberdade quântico de dois valores” necessário para a descrição do elétron na camada mais externa destes átomos. No entanto, a natureza deste “grau de liberdade” ainda necessitava de uma interpretação física. Esta interpretação foi fornecida por George Uhlenbeck e Samuel Goudsmit em 1925. Apesar de uma resistência inicial, Pauli então formalizou a teoria do spin em 1927, sendo pioneiro na utilização das matrizes de Pauli como representação dos operadores de spin e introduzindo uma função de onda de duas componentes (o *spinor*).

A teoria do spin de Pauli, no entanto, era não relativística. Foi Paul Dirac, em 1928, quem apresentou a teoria relativística do elétron, usando um spinor de quatro componentes. Em 1940, Pauli então provou o *teorema da estatística do spin*, que estabelece que *bósons* possuem spin inteiro e *férmions* possuem spin semi-inteiro.

Neste capítulo apresentaremos uma descrição do spin 1 e $\frac{1}{2}$ como os autovalores referentes a um operador quântico não-relativístico. No fim, vamos generalizar a discussão do spin $\frac{1}{2}$ para sistemas de dois níveis.

5.1.1 DESCRIÇÃO DO EXPERIMENTO DE STERN-GERLACH

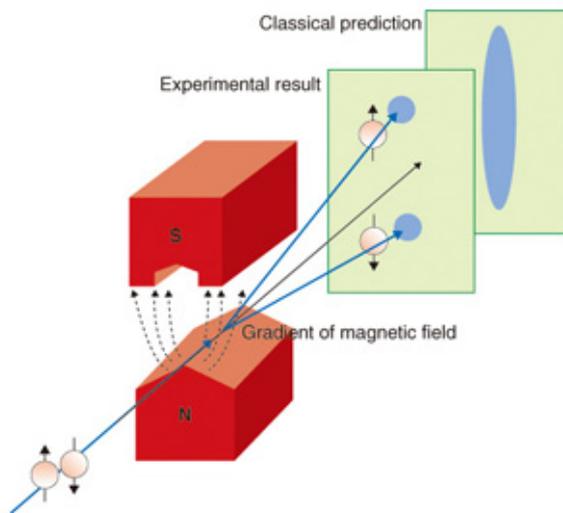
O experimento de Stern-Gerlach consistiu em lançar átomos de prata através de um campo magnético não uniforme, obtido através de um ímã com pólos de formatos diferentes, em direção a um aparato (GERLACH; STERN, 1922; COHEN-TANNOUDJI, 1977), conforme Figura 11.

A utilização de partículas neutras, como átomos de prata, servia para evitar a grande deflexão causada pelo campo magnético na trajetória de uma partícula com uma carga elétrica excedente. O campo magnético não uniforme era necessário para que as partículas fossem defletidas diferentemente em função do seu momentum angular. Considerando a mecânica clássica, esperava-se que o momentum angular associado às partículas estivesse distribuído de

maneira contínua e mais ou menos uniforme, o que seria refletido no experimento como uma distribuição contínua e uniforme de átomos no aparato.

No entanto, o resultado observado, conforme Figura 12, foi que, quando o campo magnético estava ligado, os átomos que atingiam o aparato estavam agrupados em dois conjuntos. Os dois pesquisadores concluíram, erroneamente, que o momentum angular referente a estes átomos deveria ser quantizado em consonância com o modelo de Bohr-Sommerfeld, a única teoria quântica disponível na época. Apenas mais tarde, sob a luz da teoria do spin do elétron é que o experimento de Stern-Gerlach recebeu a interpretação física correta (GOMES; PIETROCOLA, 2011).

Figura 11 – Representação do experimento de Stern-Gerlach.



Fonte – JOAQUIM (2017a).

Figura 12 – Resultados obtidos no experimento de Stern-Gerlach. À esquerda, a distribuição dos átomos de prata com o campo magnético desligado. À direita, a distribuição dos átomos de prata quando o campo magnético estava ligado.

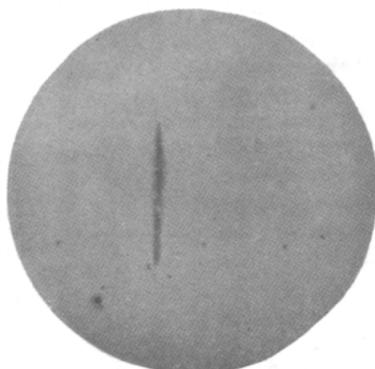


Fig. 2.

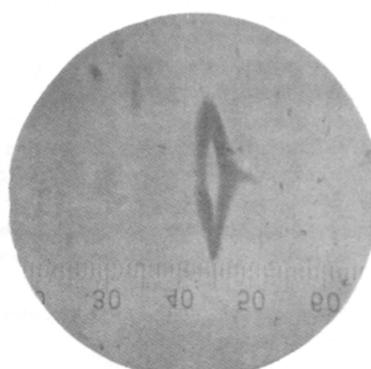
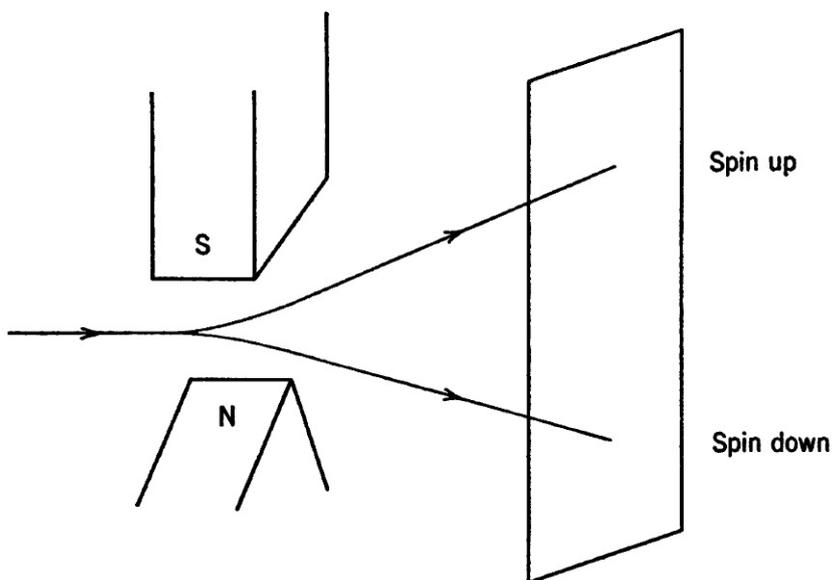


Fig. 3.

Fonte – Gerlach e Stern (1922).

O resultado pode ser representado como sendo dois valores, um spin *up* e um spin *down*.

Figura 13 – Spin up e spin down.



Fonte – Extraído de FEYNMAN, LEIGHTON e SANDS (1966).

5.2 SPIN UM

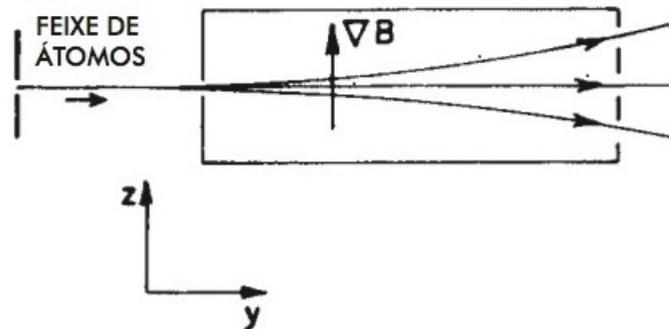
Vamos descrever de maneira simplificada o que ocorre em um sistema de spin 1. Esta abordagem é totalmente baseada nas *Feynman's Lectures on Physics* (FEYNMAN; LEIGHTON; SANDS, 1966). Feynman preferia a abordagem física de problemas que possuíssem uma matemática elaborada. Esta abordagem é complementar ao objetivo deste trabalho, que é ilustrar conceitos de matemática utilizando a física apenas como aplicação. Na próxima seção, abordaremos um sistema de spin $\frac{1}{2}$ utilizando as ferramentas matemáticas adequadas.

Conforme demonstrado pelo experimento de Stern-Gerlach, um feixe de partículas, ao atravessar um campo magnético não homogêneo é dividido em um número de feixes, sendo que esse número é determinado pelo tipo e o estado inicial das partículas. Suponha esse aparato conforme Figura 14, na qual são produzidos três feixes. O primeiro feixe é defletido para cima (+), o segundo não sofre deflexão (0) e o terceiro é defletido para baixo (-).

Segundo Feynman, ao bloquearmos os dois feixes de baixo, permitindo que o feixe de cima prossiga e atinja um novo aparato de Stern-Gerlach, conforme ilustrado na Figura 15, espera-se que o feixe de partículas seja defletido apenas em uma direção, pois temos agora um feixe “purificado”. Neste sentido, o primeiro aparato de Stern-Gerlach, juntamente com o bloqueio, atuou como um filtro, permitindo a passagem de apenas um tipo de feixe.

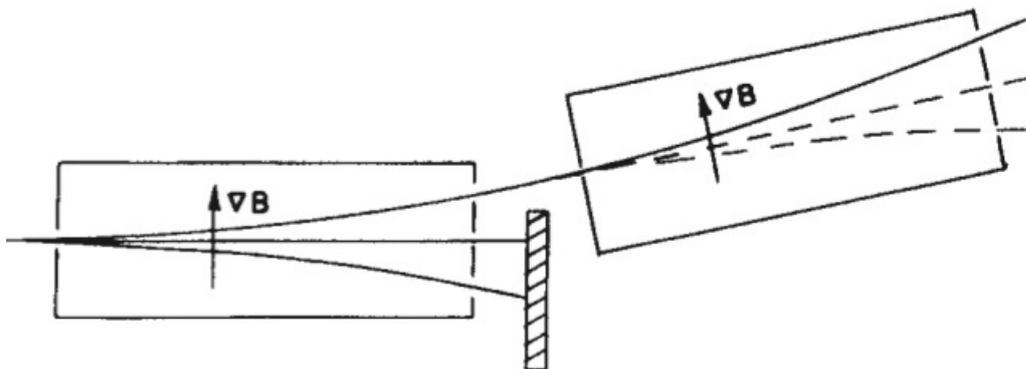
Continuando o raciocínio de Feynman, imaginemos agora um novo aparato, mais elaborado, chamado “aparato de Stern-Gerlach modificado”. O novo aparato é composto por três partes:

Figura 14 – Divisão do feixe de átomos ao atravessar o aparato de Stern-Gerlach. Um feixe é defletido para cima (+), o segundo não sofre deflexão (0) e o último é defletido para baixo (-).



Fonte – Extraído de FEYNMAN, LEIGHTON e SANDS (1966).

Figura 15 – O feixe de partículas defletido para cima (+) não é bloqueado e ingressa em um segundo aparato de Stern-Gerlach. Neste caso o feixe não se divide mais, pois é “purificado”.



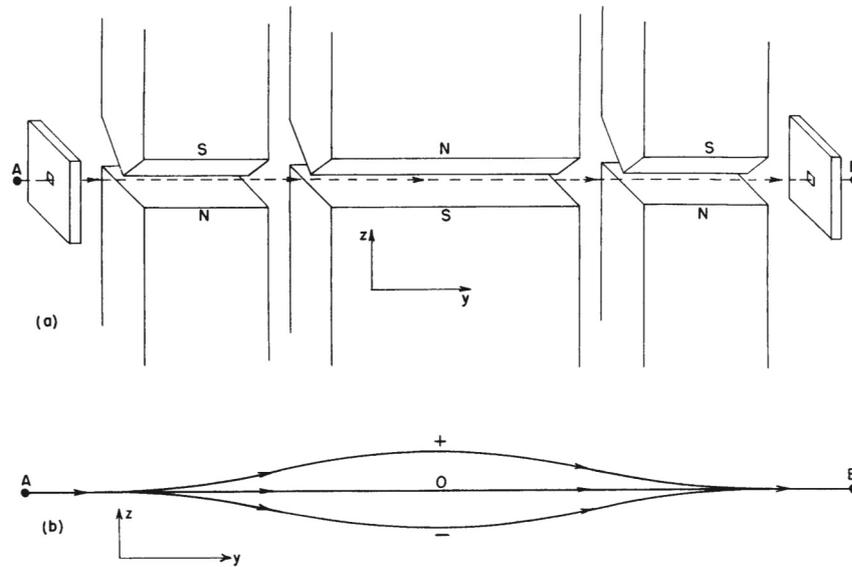
Fonte – Extraído de FEYNMAN, LEIGHTON e SANDS (1966).

1. Um aparato de Stern-Gerlach normal.
2. Um aparato com o campo magnético invertido e mais intenso.
3. Um segundo aparato normal.

O primeiro aparato recebe o feixe original de partículas e o divide em três. O segundo recebe os feixes divergentes e os faz convergirem. O terceiro aparato, por fim, recebe os feixes convergentes e os transforma em um único feixe colimado. Uma ilustração deste aparato pode ser vista na Figura 16. O feixe colimado que sai deste aparato pode então entrar em um segundo aparato modificado e assim por diante. É possível imaginar uma sequência de aparatos desta natureza.

Feynman reflete sobre que o que ocorreria se colocássemos uma barreira na frente de dois feixes do primeiro aparato (chamaremos de aparato *S*). Sabemos que neste caso, ao sair do

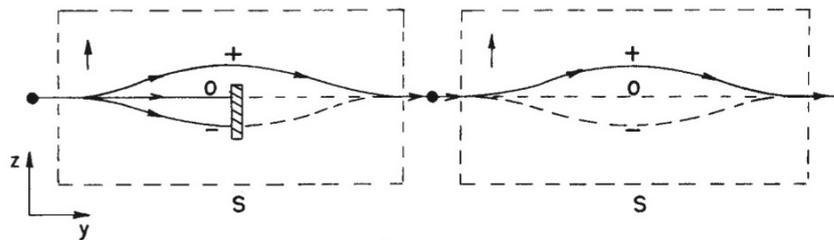
Figura 16 – Aparato de Stern-Gerlach modificado.



Fonte – Extraído de FEYNMAN, LEIGHTON e SANDS (1966).

aparato S , o feixe sai filtrado em relação a S (podendo ser +, 0 ou -), conforme Figura 17.

Figura 17 – Sequência de dois aparatos de Stern-Gerlach modificados.



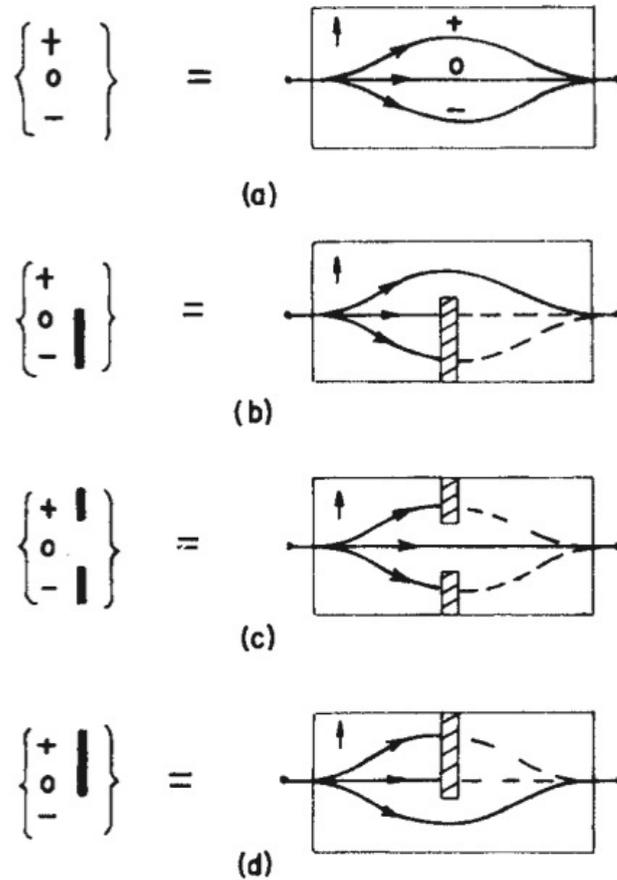
Fonte – Extraído de FEYNMAN, LEIGHTON e SANDS (1966).

Portanto, teríamos quatro possibilidades de diagramas dos feixes no aparato S ao colocarmos ou não uma barreira em dois dos três feixes, conforme Figura 18. Podemos, então, descrever o que ocorre com o feixe ao atravessar o aparato S . Na Figura 18 (b) podemos dizer que está no estado $+S$, em (c) o feixe está no estado $0S$ e, por último, em (d) temos o estado $-S$.

Para que possamos compreender a amplitude do movimento, vamos adotar a notação de Dirac: $\langle | \rangle$, conhecida como *bracket*. Denotamos por $\langle b|a \rangle$ (lê-se da direita para a esquerda) a *amplitude* que um átomo em um estado a vai atravessar o aparato para o estado b .

De posse agora dessa notação, temos que, ao passar do estado $+S$ para o estado $+S$ a amplitude é 1, ou seja, $\langle +S| +S \rangle = 1$; do estado $+S$ para o estado $-S$ a amplitude é 0, $\langle -S| +S \rangle = 0$; do estado $-S$ para o estado $+S$ a amplitude também é 0, $\langle +S| -S \rangle = 0$; e, por último, do estado $-S$ para o estado $-S$, a amplitude é 1, $\langle -S| -S \rangle = 1$. Ao agruparmos esses estados puros, podemos montar a Tabela 1.

Figura 18 – Posições e símbolos dos filtros no aparato de Stern-Gerlach.



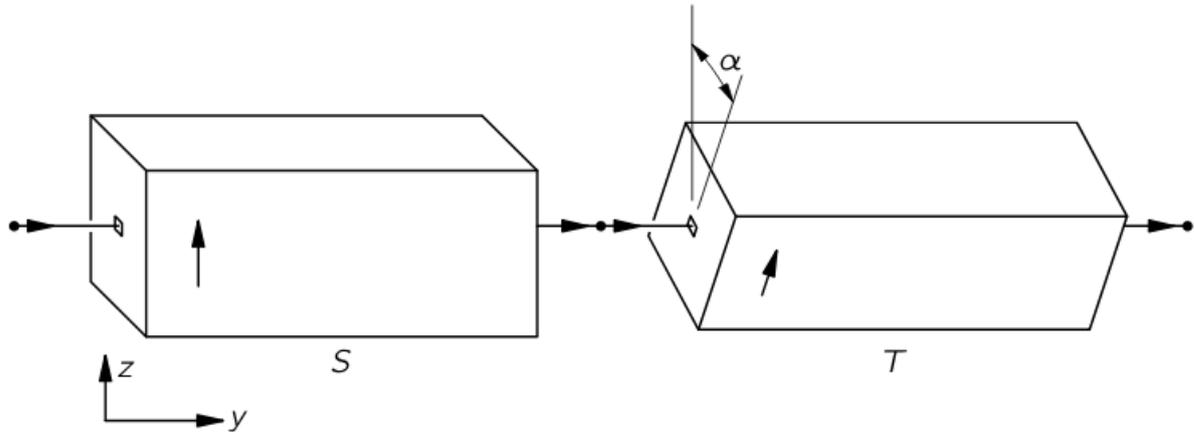
Fonte – Extraído de FEYNMAN, LEIGHTON e SANDS (1966).

Tabela 1 – Posições e símbolos dos filtros no aparato de Stern-Gerlach

		de		
		+S	0S	-S
para	+S	1	0	0
	0S	0	1	0
	-S	0	0	1

Fonte – Adaptado de FEYNMAN, LEIGHTON e SANDS (1966).

E se colocássemos dois aparatos em série? O que ocorreria? E se o segundo aparato for rotacionado com um ângulo α em relação ao eixo y conforme Figura 19, o feixe de átomos ou o átomo ao atravessar os dois aparatos em qual estado T ele se encontraria? Imaginemos a situação representada na Figura 19, dois aparatos em série, o feixe ou partícula entra no primeiro aparato, chamado de S e, ao sair, ele penetra no segundo aparato, que é rotacionado com um ângulo α em relação o eixo y , o qual chamaremos de T . Ao atravessar o filtro S , sabemos que temos três estados resultantes possíveis: $+S$, $0S$ e $-S$. Quando cada um desses estados penetram no filtro T , que pode ser rotacionado com um ângulo α em relação ao eixo y , teremos um dos três

Figura 19 – Dois aparatos, o segundo rotacionado em um ângulo α .

Fonte – Extraído de FEYNMAN, LEIGHTON e SANDS (1966).

Tabela 2 – Posições e símbolos dos filtros no aparato de Stern-Gerlach

		de		
		+S	0S	-S
para	+T	$\langle +T +S \rangle$	$\langle +T 0S \rangle$	$\langle +T -S \rangle$
	0T	$\langle 0T +S \rangle$	$\langle 0T 0S \rangle$	$\langle 0T -S \rangle$
	-T	$\langle -T +S \rangle$	$\langle -T 0S \rangle$	$\langle -T -S \rangle$

Fonte – Adaptado de (FEYNMAN; LEIGHTON; SANDS, 1966).

novos estados filtrados, a saber: $+T$, $0T$ e o $-T$. Podemos ir girando o filtro T, fazendo com que tenhamos probabilidades distintas em cada um dos três estado possíveis ao sair do aparato T.

É importante notar que, neste caso, se os átomos estão em um estado definido com relação a S , eles não estarão em um estado definido com relação a T . Por exemplo, um estado $+S$ não é um estado $+T$. Ao analisar todas as possibilidades do átomo ao atravessar o aparato S e o aparato T , poderíamos escrever novamente outra tabela, similar à Tabela 1, porém onde temos "de" $+S$, $0S$ e $-S$ "para" $+T$, $0T$ e $-T$ (veja a Tabela 2). A grande questão passa a ser como calcular a amplitude de cada uma dessas possibilidades. Na mecânica quântica, a probabilidade pode ser obtida fazendo a amplitude elevada ao quadrado. Por exemplo, a probabilidade da amplitude $\langle 0T|0S \rangle$ é dada por $|\langle 0T|0S \rangle|^2$.

Ao passar pelo aparato T , os átomos devem estar obrigatoriamente em um dos três estados possíveis ($+T$, $0T$, $-T$). Isso implica que ao somarmos as probabilidades de atingirem cada um dos três estados em relação ao segundo aparato, devemos ter 100%. Supondo que os átomos que entraram no filtro T estavam no estado $+S$, temos a seguinte relação:

$$|\langle +T|+S \rangle|^2 + |\langle 0T|+S \rangle|^2 + |\langle -T|+S \rangle|^2 = 1. \quad (5.1)$$

Analogamente, podemos obter relações similares para feixes que saem no aparato S no estado

$0S$ e $-S$:

$$|\langle +T|0S \rangle|^2 + |\langle 0T|0S \rangle|^2 + |\langle -T|0S \rangle|^2 = 1, \quad (5.2)$$

$$|\langle +T|-S \rangle|^2 + |\langle 0T|-S \rangle|^2 + |\langle -T|-S \rangle|^2 = 1. \quad (5.3)$$

Nesse ponto, Feynman desenvolve um novo raciocínio, só que agora com três filtros. Ele conclui, então, resultado similar ao experimentos anteriores, que ao passarem por uma aparato T, a probabilidade de irem para um dos estado filtrados de T é a mesma, ou seja, independem do que aconteceu antes de entrarem no aparato T. Então, podemos concluir conforme (FEYNMAN; LEIGHTON; SANDS, 1966, p.5-8):

Esses resultados ilustram um dos princípios básicos da mecânica quântica: qualquer sistema atômico pode ser separado através de um processo de filtragem em um certo conjunto que chamaremos de estado de base, e o futuro comportamento dos átomos em qualquer estado de base dado depende apenas da natureza do estado de base - ele é independente de qualquer história anterior. Os estados de bases dependem, claro, do filtro usado; por exemplo, do três estados $(+T)$, $(0T)$, e $(-T)$ que formam um conjunto de estados de bases, os três estados $(+S)$, $(0S)$, e $(-S)$ são outro. Há uma grande quantidade de possibilidades, cada uma tão boa quanto a outra. ¹

Até o momento, não nos preocupamos com situações reais; como a difração das fendas no experimento de Stern-Gerlach, tampouco nos preocupamos com posição, momento, nível de excitação e tantos outros fatores. Optamos por considerar situações ideais, perceptíveis, pois sempre pensamos em filtros com apenas um canal aberto, um estado de fase definido. Isso porque, caso contrário, teríamos partículas em todas direções, ou seja, teríamos partículas passando por mais de um estado no aparato.

É interessante notar que, uma vez filtrado, o estado da partícula “perde a memória” do seu estado anterior. Vamos imaginar que um feixe de átomos penetre no aparato S com filtro $+S$ e que, ao saírem os átomos, estão em quantidade N . Depois, esse feixe de N átomos penetra em outro aparato T com filtro $0T$, saindo desse aparato filtrado uma fração dos N átomos que nele penetraram, ou seja, uma quantidade αN . Na sequência, fazemos esses αN átomos passarem por um outro aparato S' com filtro $+S'$. Desse filtro $+S'$ sairá uma porção β da quantidade αN que entrou no aparato S' , ou seja, $\beta\alpha N$, conforme pode ser visto na Figura 20. Ao saírem de T , os αN átomos não possuem mais a memória de que estiveram no estado $+S$. Frequentemente este fenômeno é interpretado como um efeito da *separação* dos feixes, mas na realidade este é um efeito causado pela filtragem.

Para mostrar isto, vamos considerar dois experimentos envolvendo os aparatos S, TeS' . No primeiro, vamos considerar a montagem da Figura 20 e uma segunda montagem onde o

¹ "These results illustrate one of the basic principles of quantum mechanics: Any atomic system can be separated by a filtering process into a certain set of what we will call base states, and the future behavior of the atoms in any single given base state depends only on the nature of the base state—it is independent of any previous history. The base states depend, of course, on the filter used; for instance, the three states $(+T)$, $(0T)$, and $(-T)$ are one set of base states; the three states $(+S)$, $(0S)$, and $(-S)$ are another. There are any number of possibilities each as good as any other."(FEYNMAN; LEIGHTON; SANDS, 1966, p.5-8)

Figura 20 – Quantidade de partículas que entram em S e saem em S' .

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \xrightarrow{N} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \xrightarrow{\alpha N} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \xrightarrow{\beta \alpha N}.$$

$S \qquad T \qquad S'$

Fonte – Extraído de FEYNMAN, LEIGHTON e SANDS (1966).

aparato S' possui o filtro $0S'$, mostrado na Figura 21. Neste caso, um feixe $\gamma \alpha N$ emerge do aparato S' .

Figura 21 – Quantidade de partículas que entram em S e saem em S' .

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \xrightarrow{N} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \xrightarrow{\alpha N} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \xrightarrow{\gamma \alpha N}.$$

$S \qquad T \qquad S'$

Fonte – Extraído de FEYNMAN, LEIGHTON e SANDS (1966).

No segundo experimento, vamos retirar os filtros do aparato T . Neste caso, ao deixarem o aparato T , os N átomos continuam no estado $+S$ e o feixe passa na sua totalidade pelo aparato S' com filtro $+S'$. No entanto, se utilizarmos o filtro $0S'$, o feixe é completamente bloqueado, conforme Figura 22. Este resultado da Mecânica Quântica não é auto-evidente, em especial se pensarmos do ponto de vista clássico. No entanto, este comportamento foi comprovado em inúmeros experimentos.

Figura 22 – Quantidade de partículas que entram em S e saem em S' .

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \xrightarrow{N} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \xrightarrow{N} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \xrightarrow{N},$$

$S \qquad T \qquad S'$

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \xrightarrow{N} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \xrightarrow{N} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \xrightarrow{0}.$$

$S \qquad T \qquad S'$

Fonte – Extraído de FEYNMAN, LEIGHTON e SANDS (1966).

5.3 SPIN MEIO

Já vimos que o spin é um observável, conforme o experimento de Stern-Gerlach, ao qual podem ser atribuídos valores numéricos assim como ocorre com a massa ou a carga elétrica. Do conhecimento atual sobre o spin $\frac{1}{2}$, sabemos que os spins possuem um momento angular intrínseco e , ao medirmos uma das suas componentes, digamos na direção z , encontramos apenas dois valores, $+\frac{\hbar}{2}$ e $-\frac{\hbar}{2}$. Neste caso $\hbar = h/2\pi$, sendo $h = 6.62607004 \times 10^{-34} m^2 kg/s$ a constante de Planck. A teoria por trás deste valor não é relevante para a discussão a seguir, que possui um caráter mais geral e será aplicada a outros tipos de sistema. Podemos denotar estes valores simplesmente spin *up* e spin *down* respectivamente, e a única restrição é que eles sejam distintos.

Vamos denotar a medida da componente z deste momento angular intrínseco por \mathcal{S}_z e representá-la através do observável S_z . As outras componentes, naturalmente, serão representadas através dos observáveis S_x e S_y . Denotando $|\pm\rangle$ o respectivo autoestado correspondente ao autovalor $\pm\frac{\hbar}{2}$, temos

$$S_z |+\rangle = +\frac{\hbar}{2} |+\rangle, \quad (5.4)$$

$$S_z |-\rangle = -\frac{\hbar}{2} |-\rangle. \quad (5.5)$$

O conjunto de autoestados $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ formam uma base ortonormal (ordenada) para o espaço de estados deste sistema. Nesta base, um estado genérico $|\psi\rangle$ é representado por

$$|\psi\rangle = \alpha |+\rangle + \beta |-\rangle, \quad (5.6)$$

com $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ tais que $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Na representação matricial temos

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}. \quad (5.7)$$

Em particular, para os elementos da base,

$$|+\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (5.8)$$

$$|-\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (5.9)$$

É importante encontrar a representação matricial do operador S_z , nesta base. Neste caso, temos que a matriz deve ser 2×2 , ou seja, pode ser escrita na sua forma matricial como:

$$S_z = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} \\ s_{21} & s_{22} \end{bmatrix}, \quad (5.10)$$

com $s_{ij} \in \mathbb{C}$. Para encontrar os elementos desta matriz basta perceber que

$$[S_z |+\rangle] = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} \\ s_{21} & s_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s_{11} \\ s_{21} \end{bmatrix} = +\frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \left[\frac{\hbar}{2} |+\rangle \right], \quad (5.11)$$

ou seja, temos $s_{11} = \frac{\hbar}{2}$ e $s_{21} = 0$. Analogamente, temos

$$[S_z |-\rangle] = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} \\ s_{21} & s_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s_{12} \\ s_{22} \end{bmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \left[-\frac{\hbar}{2} |-\rangle \right], \quad (5.12)$$

ou seja, $s_{21} = 0$ e $s_{22} = -\frac{\hbar}{2}$. Portanto, a matriz referente ao observável S_z é dada por

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_z, \quad (5.13)$$

sendo σ_z uma das *matrizes de Pauli*:

$$\sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (5.14)$$

De outra forma, é fácil perceber que, por exemplo,

$$S_z |+\rangle = s_{11} |+\rangle + s_{21} |-\rangle. \quad (5.15)$$

Como a base é ortonormal, aplicando o *bra* $\langle +|$, temos

$$\langle +| S_z |+\rangle = s_{11} \langle +|+\rangle + s_{21} \langle +|-\rangle = s_{11}. \quad (5.16)$$

Generalizando este procedimento para os demais elementos, temos

$$[S_z] = \begin{bmatrix} \langle +|S_z|+\rangle & \langle +|S_z|-\rangle \\ \langle -|S_z|+\rangle & \langle -|S_z|-\rangle \end{bmatrix}. \quad (5.17)$$

As demais componentes do spin referem-se às medidas de S_x e S_y , sendo representadas pelos observáveis S_x e S_y . A teoria do momentum angular quântico estabelece que os observáveis referentes às três componentes de spin obedecem a relações de comutação bem definidas (COHEN-TANNOUJJI, 1977), a saber:

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z, \quad (5.18)$$

$$[S_y, S_z] = i\hbar S_x, \quad (5.19)$$

$$[S_z, S_x] = i\hbar S_y. \quad (5.20)$$

Estes observáveis também podem ser escritos na base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ dos autovetores de S_z . Temos:

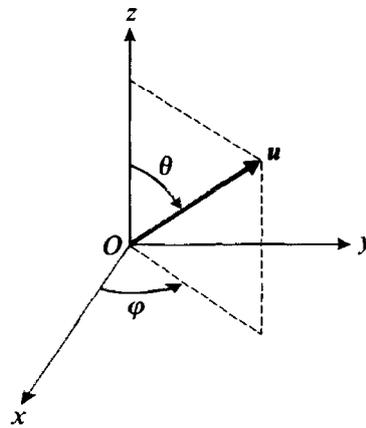
$$S_x = \begin{bmatrix} 0 & +\frac{\hbar}{2} \\ +\frac{\hbar}{2} & 0 \end{bmatrix} = +\frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = +\frac{\hbar}{2} \sigma_x, \quad (5.21)$$

$$S_y = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{i\hbar}{2} \\ +\frac{i\hbar}{2} & 0 \end{bmatrix} = +\frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} = +\frac{\hbar}{2} \sigma_y, \quad (5.22)$$

sendo novamente σ_x e σ_y matrizes de Pauli. Ao diagonalizarmos cada um destes operadores, encontramos novamente, os autovalores $\pm \frac{\hbar}{2}$.

Mas, e se quiséssemos um observável referente à medida de spin em uma direção \mathbf{u} qualquer? Segundo COHEN-TANNOUDJI (1977), é possível escrever o observável $S_{\mathbf{u}}$ na base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$. Para tanto, devemos imaginar que o observador, representado pelo vetor \mathbf{u} está representado no espaço através dos ângulos φ e θ que caracterizam o vetor no espaço do sistema de coordenadas esféricas, conhecido como esfera de Bloch.

Figura 23 – Ângulos de rotação do vetor \mathbf{u} , sendo o ângulo φ denominado ângulo azimutal e o ângulo θ o ângulo polar.



Fonte – Extraído de COHEN-TANNOUDJI (1977).

Podemos, então, escrever em coordenadas esféricas, que:

$$S_{\mathbf{u}} = S_x \text{sen}\theta \cos\varphi + S_y \text{sen}\theta \text{sen}\varphi + S_z \cos\theta$$

ou na forma de matricial como sendo:

$$S_{\mathbf{u}} = +\frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} \cos\theta & \text{sen}\theta e^{-i\varphi} \\ \text{sen}\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{bmatrix}.$$

Todos os operadores dos observáveis $S_{\mathbf{u}}$ terão sempre os mesmos autovalores, $+\frac{\hbar}{2}$ e $-\frac{\hbar}{2}$. É possível perceber este resultado fisicamente se notarmos que sempre podemos rotacionar o aparato de Stern-Gerlach, de tal forma que sempre tenhamos a representação da Figura 23.

É importante mencionar também que, ao considerarmos unicamente o espaço gerado por $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ qualquer operador linear pode ser representado por uma combinação linear envolvendo as três componentes de spin e a identidade. De outra forma, de A é um observável atuando neste espaço de estados, temos

$$A = \alpha \mathbb{1} + \beta S_x + \gamma S_y + \delta S_z, \quad (5.23)$$

sendo $\alpha, \beta, \gamma, \delta \in \mathbb{C}$ e $\mathbb{1}$ o operador identidade tal que $\mathbb{1} |\psi\rangle = |\psi\rangle$ para qualquer estado $|\psi\rangle$.

5.4 ESTADO DE DOIS NÍVEIS

Para entendermos de forma mais simples o que é um estado de dois níveis, vamos imaginar a situação descrita por AMARAL, BARAVIEIRA e CUNHA (2011), em que começamos com a ideia de um sistema de dois níveis clássico, que seria o sistema que, ao longo do tempo, só é possível obter dois valores. Podemos imaginar a evolução do estado de uma lâmpada ao longo do tempo, sabemos que a lâmpada ou está apagada, denotaremos por 0 ou a lâmpada está acesa, que a notação será 1; formando, assim, a base $\{0, 1\}$. Um sistema de dois níveis na mecânica quântica já começa a se diferenciar pelo uso de vetores v_0 e v_1 onde antes tínhamos apenas os estados 0 e 1, respectivamente². Assim, poderíamos descrever o estado $|\psi\rangle = \alpha v_0 + \beta v_1$, com $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$. Podemos dizer que os dois vetores são uma base de um espaço vetorial complexo, de dimensão 2 em \mathbb{C}^2 conforme descrito em BARAVIERA (2011)³.

Existem na física, numerosos casos em que a base dos estados é formada por duas dimensões (dois vetores) - como é o caso do spin $\frac{1}{2}$. Muitos destes casos envolvem o conceito de energia⁴.

5.4.1 MOLÉCULA DE AMÔNIA

Vamos mostrar por meio de um exemplo, a molécula de amônia, composta por dois estados. Este tratamento é baseado no exposto por Feynman nas *Feynman's Lectures on Physics* (FEYNMAN; LEIGHTON; SANDS, 1966).

A molécula de amônia é composta por um átomo de nitrogênio e três átomos de hidrogênio, sendo que o nitrogênio está acima do plano formado pelas moléculas de hidrogênio. O desenho característico dessa molécula de amônia é um tetraedro, com um átomo em cada um dos vértices, conforme Figura 24.

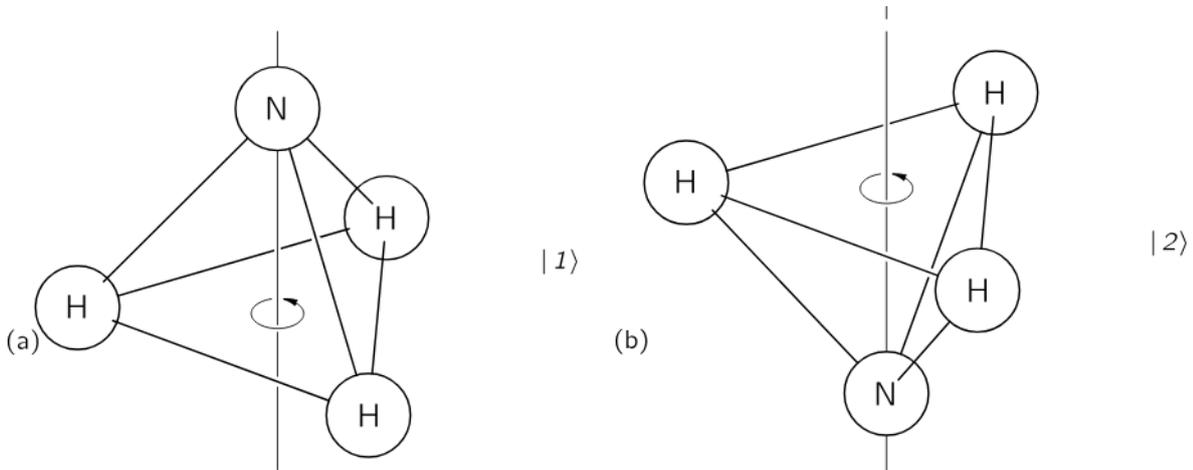
Essas moléculas podem vibrar internamente, movimentar-se em qualquer direção, podem livremente girar, entre tantos outros estados que poderíamos citar. Para simplificar a discussão, vamos imaginar um arranjo em que a molécula só possa se mover em relação ao seu eixo de simetria, ou seja, todos os demais graus de liberdade são desconsiderados, com exceção do estudado. O resultado esperado só pode ser representado por duas posições para a molécula de amônia: o estado representado pela Figura 24 (a) e pela Figura 24 (b). Essas duas posições representam para nós um sistema de dois níveis. Quando o nitrogênio está em cima do plano formado pelas moléculas de hidrogênio, diremos que está no estado $|1\rangle$ conforme Figura 24 (a). Já, quando a molécula de nitrogênio estiver abaixo do plano formado pelas moléculas de hidrogênio, conforme Figura 24 (b), dizemos que temos o estado $|2\rangle$. Estes dois estados formam

² No caso do spin $\frac{1}{2}$ esses valores são representados pelos operadores $|+\rangle$ e $|-\rangle$.

³ Vale ressaltar que também é uma possibilidade termos simultaneamente 0 e 1, já que qualquer estado $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$, com $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ e $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$

⁴ Em geral, os sistemas na natureza são formados por inúmeros níveis. Mas, muitos desses casos, somente dois níveis apresentam maior relevância.

Figura 24 – Duas representações geométricas equivalentes para a molécula de amônia.



Fonte – Extraído de FEYNMAN, LEIGHTON e SANDS (1966).

a nossa base de estudo para o comportamento da molécula de amônia. Então, dado um instante t qualquer, podemos representar o estado geral $|\Psi(t)\rangle$ da molécula, fornecendo $C_1(t) = \langle 1|\Psi(t)\rangle$, que descreve a amplitude de estar no estado $|1\rangle$; e $C_2(t) = \langle 2|\Psi(t)\rangle$, que exprime a amplitude de estar no estado $|2\rangle$. Portanto, o vetor de estado $|\Psi(t)\rangle$ pode ser escrito da seguinte maneira:

$$|\Psi(t)\rangle = |1\rangle \langle 1|\Psi(t)\rangle + |2\rangle \langle 2|\Psi(t)\rangle,$$

ou então,

$$|\Psi(t)\rangle = |1\rangle C_1(t) + |2\rangle C_2(t).$$

Note que a dependência temporal de $|\Psi(t)\rangle$ é expressa pelos coeficientes C_1 e C_2 , dado que a base $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ é fixa.

Imaginemos agora que a molécula se encontra inicialmente no estado $|1\rangle$. Desejamos saber se, após alguns instantes, existe uma possibilidade da molécula estar no estado $|2\rangle$. Para determinarmos essa probabilidade devemos resolver a equação que determina a evolução temporal do vetor de estado, definida pelo 6º Postulado da Mecânica Quântica e chamada de Equação de Schrödinger ($i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = H(t) |\Psi(t)\rangle$). Para isso, é necessário obter os coeficientes H_{ij} da matriz Hamiltoniana. Uma vez obtida a matriz Hamiltoniana, a evolução temporal será dada por

$$i\hbar \frac{dC_1}{dt} = H_{11}C_1 + H_{12}C_2 \quad (5.24)$$

$$i\hbar \frac{dC_2}{dt} = H_{21}C_1 + H_{22}C_2. \quad (5.25)$$

Note que nas Equações (5.24) e (5.25) os termos H_{12} e H_{21} são responsáveis pela transição do estado $|1\rangle$ para o estado $|2\rangle$ mutuamente e vice-versa. Vamos supor primeiramente que, uma vez que a molécula esteja no estado $|1\rangle$ ela não estará nunca no estado $|2\rangle$, e vice-versa. Neste caso, temos $H_{12} = H_{21}^* = 0$, restando apenas os valores de H_{11} e de H_{22} . Temos então:

$$i\hbar \frac{dC_1}{dt} = H_{11}C_1, \quad (5.26)$$

e

$$i\hbar \frac{dC_2}{dt} = H_{22}C_2. \quad (5.27)$$

Resolvendo essas equações vamos obter:

$$C_1(t) = C_1(0)e^{-(i/\hbar)H_{11}t}, \quad (5.28)$$

e

$$C_2(t) = C_2(0)e^{-(i/\hbar)H_{22}t}. \quad (5.29)$$

Note que existe uma dependência temporal das amplitudes. No entanto, ao tomarmos a probabilidade do estado estar em $|1\rangle$, por exemplo, temos que

$$\mathcal{P}(1) = |\langle 1|\Psi(t)\rangle|^2 = |C_1(t)|^2 = |C_1(0)|^2. \quad (5.30)$$

Ou seja, a probabilidade não depende do tempo. A matriz Hamiltoniana é diagonal na base $\{|1\rangle, |2\rangle\}$, e essas são as amplitudes dos estados estacionários de energia $E_1 = H_{11}$ e $E_2 = H_{22}$. Observe que, como o operador é hermitiano, isso faz com que os termos desta diagonal sejam reais. É razoável admitir que H_{11} e H_{22} sejam iguais, uma vez que no nosso modelo simplificado a molécula de amônia apresenta uma simetria definida. Escrevemos $H_{11} = H_{22} = E_0$. Portanto, a matriz Hamiltoniana possui E_0 como único autovalor.

Vamos supor agora que seja possível para um estado inicialmente em $|1\rangle$ passar para $|2\rangle$ e vice-versa. Neste caso, temos $H_{12} = H_{21}^* \neq 0$. Vamos escrever $H_{12} = A$. No caso mais geral deveríamos ter $H_{21} = A^*$. No entanto, não há perda de generalidade em considerar A real, e, portanto, $A = A^*$, em que A^* é a matriz transposta conjugada de A e está associada ao operador adjunto do operador linear ⁵. Reescrevendo as equações temos:

$$i\hbar \frac{dC_1}{dt} = E_0C_1 - AC_2, \quad (5.31)$$

e

$$i\hbar \frac{dC_2}{dt} = E_0C_2 - AC_1. \quad (5.32)$$

Somando as duas equações, obtemos:

$$i\hbar \frac{d}{dt}(C_1 + C_2) = (E_0 - A)(C_1 + C_2),$$

cujas solução é representado por:

$$C_1 + C_2 = ae^{-(i/\hbar)(E_0 - A)t}. \quad (5.33)$$

Agora, fazendo a subtração, teremos:

$$i\hbar \frac{d}{dt}(C_1 - C_2) = (E_0 + A)(C_1 - C_2),$$

⁵ Uma matriz é hermitiana se $A = A^*$

com solução dada por:

$$C_1 - C_2 = be^{-(i/\hbar)(E_0+A)t}. \quad (5.34)$$

As duas constantes a e b devem ser escolhidas de tal forma que forneçam as condições ideais de resolução do problema. Resolvendo o sistema formado pela Equação (5.33) e a Equação (5.34) vamos obter a solução para C_1 e para C_2 , sendo estas:

$$C_1(t) = \frac{a}{2}e^{-(i/\hbar)(E_0-A)t} + \frac{b}{2}e^{-(i/\hbar)(E_0+A)t}, \quad (5.35)$$

e

$$C_2(t) = \frac{a}{2}e^{-(i/\hbar)(E_0-A)t} - \frac{b}{2}e^{-(i/\hbar)(E_0+A)t}. \quad (5.36)$$

O que poderíamos concluir ao analisar essa solução? Se $b = 0$, teremos os dois termos com a mesma frequência, o que significa dizer que a energia é a mesma ($E_0 - A$). Portanto, existe um estado estacionário em que as probabilidades C_1 e C_2 são iguais. Mas se agora adotarmos $a = 0$, o que podemos concluir? Teremos novamente frequências iguais, o que implica que a energia é dada por ($E_0 + A$) se as amplitudes forem iguais, porém com sinais diferentes, ou seja, $C_1 = -C_2$. Podemos dizer ao final que como existe uma chance de o átomo de nitrogênio mudar de posição (para cima ou para baixo) a energia não é dada simplesmente por E_0 , e sim, por dois valores de energia, o ($E_0 + A$) e o ($E_0 - A$).

Vamos supor um artefato que permita capturar estas moléculas de amônia no estado correspondente à energia ($E_0 + A$). Este estado é estacionário, e, portanto, permanece o mesmo. No entanto, se colocarmos, por exemplo, um campo eletromagnético que obrigue estas moléculas a migrar para o estado correspondente a ($E_0 - A$), temos a liberação de energia na forma de radiação eletromagnética com frequência relativa à energia $\Delta = 2A$. Esta frequência justamente é a necessária para que outras moléculas migrem de um estado para outro, havendo, portanto, um efeito de emissão estimulada. Este é o princípio do *laser* (**L**ight **A**mplification by **S**timulated **E**mission of **R**adiation). No caso da amônia podemos empregar o termo *maser*, pois ao invés de luz visível a radiação é na forma de microondas.

5.4.2 A MOLÉCULA DE BENZENO

A molécula de benzeno, ou como é conhecida, o anel benzênico, é formada por seis átomos de carbono dispostos num hexágono regular, tendo três ligações duplas entre os átomos de carbono e mais seis átomos de hidrogênio, sendo que cada um dos átomos de hidrogênio está ligado a um átomo de carbono que está no vértice do hexágono regular, conforme podemos visualizar na Figura 25.

Conforme Feynman, em suas *Lições* o estado fundamental da molécula de benzeno é um sistema de dois níveis, pois as ligações duplas entre os átomos de carbono podem trocar de posição, conforme Figura 26 e Figura 27.

Se analisarmos os estados $|1\rangle$ e $|2\rangle$, podemos relacionar um com o outro através de uma rotação, ou seja existe uma simetria envolvida entre eles. Portanto, não poderíamos concluir que

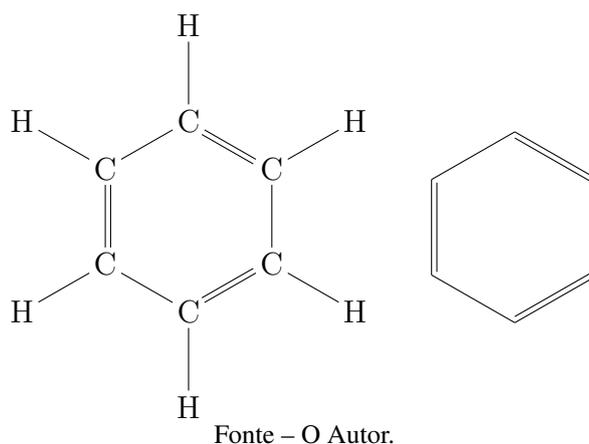
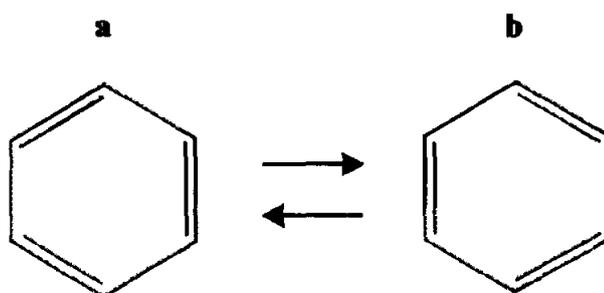
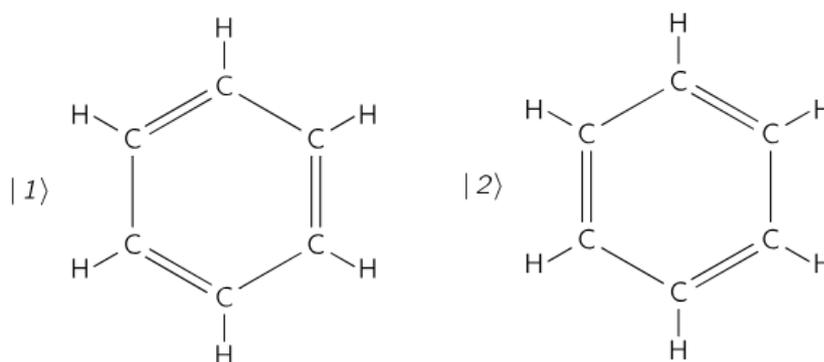
Figura 25 – Molécula de Benzeno - C_6H_6 .

Figura 26 – Duas configurações possíveis para o anel benzeno.



Fonte – Extraído de COHEN-TANNOUDJI (1977).

Figura 27 – Os dois estados possíveis para o anel benzeno.



Fonte – Extraído de FEYNMAN, LEIGHTON e SANDS (1966).

eles têm a mesma energia, ou seja, $E_1 = E_2 = E_m$. Esta energia pode ser obtida através dos cálculos necessários para formar as ligações duplas e simples da molécula, uma a uma. Existe também a possibilidade de que um estado passe para outro, de modo que a matriz hamiltoniana deve ter um termo não diagonal Δ , como na seção anterior. Ou seja, a matriz hamiltoniana deve

ter a forma

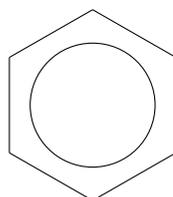
$$H = \begin{bmatrix} E_m & \Delta \\ \Delta & E_m \end{bmatrix}. \quad (5.37)$$

Note que novamente estamos considerando, sem perda de generalidade, uma matriz cujos termos são reais e positivos. Sabendo que o operador hamiltoniano é a observável através do qual podemos medir a energia, as possíveis energias serão os autovalores deste. Estes autovalores são facilmente obtidos como

$$E_{\pm} = E_m \pm \Delta.$$

Os autoestados correspondentes, por sua vez, são $|\Psi_1\rangle = |1\rangle + |2\rangle$ e $|\Psi_2\rangle = |1\rangle - |2\rangle$. Vamos analisar o menor destes autovalores, ou seja, $E_- = E - \Delta$. Note que ele de fato é *menor* no que a energia E_m necessária para constituir as ligações da molécula. Neste caso, a energia da molécula no seu estado fundamental deve ser E_- . Portanto o estado da molécula no estado fundamental não corresponde a $|1\rangle$ nem a $|2\rangle$, mas sim a uma combinação dos dois estados. Por esta razão quando se mede a energia do anel benzênico obtém-se que ele possui uma energia muito menor do que o esperado. Por esse motivo também, ao representarmos a molécula é comum descartar uma representação fixa das duplas ligações, mas, ao invés disso, utilizar a representação da Figura 28, em que o caráter dinâmico das duplas ligações fica explícito.

Figura 28 – Representação do anel benzênico.



Fonte – O Autor.

6 PROPOSTAS DE ATIVIDADES PARA SEREM IMPLEMENTADAS NO ENSINO MÉDIO

6.1 INTRODUÇÃO

As atividades propostas aqui tem como principal objetivo permitir ao aluno ampliar o conceito de matriz, bem como as suas aplicações dentro da ciência, mais especificamente na física e na química.

O tema física moderna, principalmente a mecânica quântica, tem sido abordado na atualidade com grande ênfase nas HQ, nas grandes produções cinematográficas que levam as HQ para o cinema e, também na nova literatura de ficção. E o público que mais consome esse tipo de mídia é o público representado pelos alunos do Ensino Médio. Por isso, o tema física quântica é sempre tão atrativo aos jovens. Não é nosso objetivo aqui verificar a veracidade de todas informações apresentadas nessas mídias. Mas sim aproveitar o interesse dos alunos por esse assunto, para abordar o tema desse trabalho.

6.2 PRIMEIRA PROPOSTA DIDÁTICA

Estudos tem demonstrado que o uso didático de softwares quando bem utilizados trazem resultados satisfatórios no processo de ensino aprendizagem, embora o uso desse tipo de recurso ainda cause dúvidas entre profissionais da educação, conforme nos relata (COSTA, 2017, p. 24):

Segundo Valente (2003 apud Miranda e Camossa 2010), a educação escolar e o professor não têm um referencial de mundo que se compatibilize com a realidade do estudante e com seus possíveis avanços no processo de ensino aprendizagem, pois as escolas procuram avançar tecnologicamente, aderindo ao uso de mídias eletrônicas que facilitem o processo de conhecimento por parte dos alunos, mas o fazem lentamente. Embora os benefícios da aprendizagem móvel estejam bem documentados, os educadores ainda estão relutantes em implementar iniciativas de aprendizagem com tecnologia no seu método de ensino (ALRASHEEDI; CAPRETZ, 2015).

Segundo VEEN e VRAKING (2009), a atual geração já cresceu inserida no mundo da tecnologia, na sociedade da informação. O jovem utiliza os recursos tecnológicos disponíveis para quase tudo em sua vida, o que tem provocado grande mudança na maneira de consumo e de acesso à informação.

A primeira atividade didática faz uso de software livre e trabalha o experimento de Stern-Gerlach e em conjunto a noção de spin. Sobre a importância desse experimento, (GOMES; PIETROCOLA, 2011, p. 2604-3) diz:

De maneira geral, o conceito de *spin* aparece no universo escolar na disciplina de química no Ensino Médio, quando do estudo da distribuição eletrônica nos átomos. Mas é no ensino universitário básico que o spin é estudado de modo

um pouco mais aprofundado. Para aqueles que seguem aos cursos universitários nas áreas de “ciências experimentais e engenharia”, este conceito reaparece ao final do ciclo básico no estudo, costumeiramente chamado “introdução à física moderna”. Para os estudantes que até ali chegam, e até mesmo para a maioria dos docentes desses cursos, esse conceito se associa a uma experiência que supostamente “provou” a sua existência: o experimento de Stern-Gerlach (SG). Ele foi proposto pelo físico alemão Otto Stern em 1921 e realizada, em conjunto com outro físico alemão, Walther Gerlach, entre 1921 e 1922.

Essa atividade pode ser desenvolvida conjuntamente com outros professores das disciplinas de:

- Física
- Química

6.2.1 TEMPO PREVISTO PARA A ATIVIDADE

- Aproximadamente 2 h/a.

6.2.2 OBJETIVOS

1. Trabalhar e/ou introduzir o conceito de spin.
2. Demonstrar a importância desse experimento no desenvolvimento da mecânica quântica no século XX.
3. Diferenciar a mecânica quântica da mecânica clássica, comparando o resultado esperado pelo aluno e o obtido no experimento.

6.2.3 RECURSOS DIDÁTICOS

- Desktop, notebook, smartphone ou tablet
- Site: <https://phet.colorado.edu/sims/stern-gerlach/stern-gerlach_en.html>.
- Data show

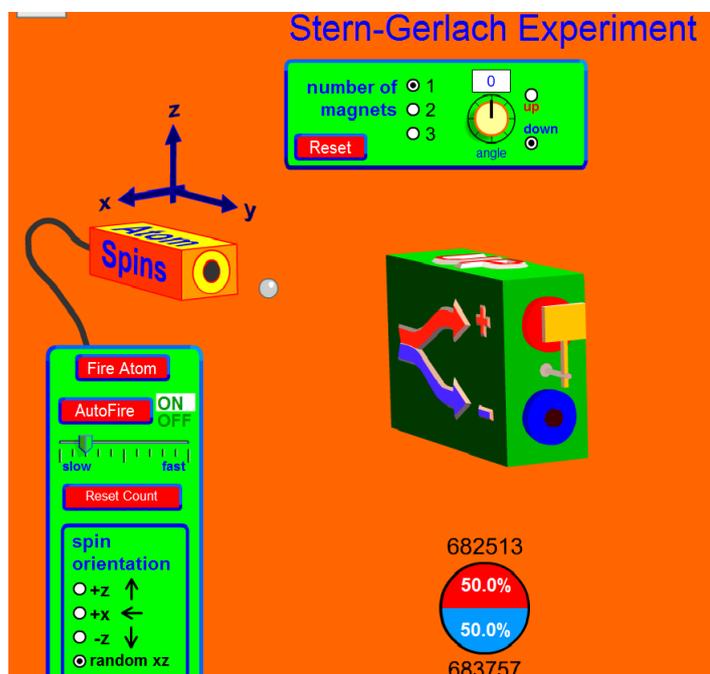
6.2.4 DESENVOLVIMENTO DA AULA

6.2.4.1 AULA 1

Inicialmente levar os alunos a imaginar o que ocorreria se eles tivessem um revólver a disparar projéteis continuamente, na horizontal, num anteparo à sua frente. E se agora, nós lançássemos partículas de prata com um campo magnético não uniforme, por exemplo, o que ocorreria? Nesse ponto, fazer uso do software, para demonstrar o experimento de Stern-Gerlach.

Sugerimos que o aluno possa, usando o software *phet.colorado.edu*, fazer o experimento com apenas um aparato e verificar a amplitude das probabilidades, conforme Figura 29.

Figura 29 – Experimento Stern-Gerlach com o uso de um aparato.



Fonte – Tela do app Phet Interactive Simulations.

É possível ao aluno rotacionar o aparato e verificar o que ocorre. Também é possível anexar mais aparatos, conforme Figura 30. São inúmeras as possibilidades: rotacionar o aparato, bloqueio *up* ou *down*, intensidade dos “disparos”, orientação do spin e a combinação de um ou mais itens.

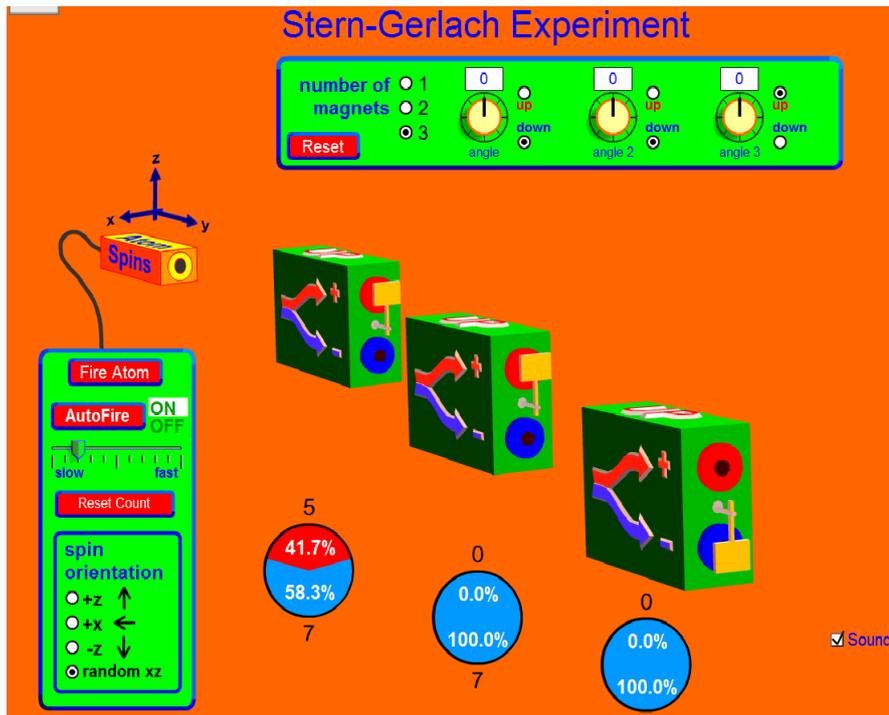
Encerrar a aula com o vídeo intitulado: “video explaining quantum spin versus classical magnet in the Stern–Gerlach experiment”, disponível no link <https://en.wikipedia.org/wiki/Stern%E2%80%93Gerlach_experiment> (sugestão de atividade presente em (NOVAES; STUDART, 2016)).

6.2.4.2 ROTEIRO DE UMA ATIVIDADE PARA A AULA 2

Questão 1 Ao olhar o experimento de Stern-Gerlach, qual era distribuição esperada pelos elétrons do átomo de prata ao atravessar o aparato? Qual foi o resultado obtido por Stern-Gerlach no experimento? O que podemos inferir sobre a diferença dos resultados?

Questão 2 Construa a matriz coluna de ordem 2×1 , chamada matriz spin, representada por $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ em que que 1 representa a saída livre do aparato e 0 representa a saída bloqueada do aparato. Você deve encontrar duas matrizes, uma referente ao spin up e outra referente ao spin down.

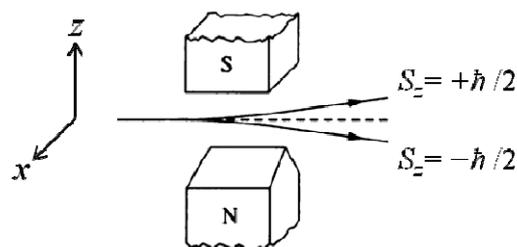
Figura 30 – Experimento Stern-Gerlach com o uso de três aparatos.



Fonte – Tela do app Phet Interactive Simulations.

Questão 3 Sugerimos que essa atividade seja realizada concomitantemente com o software Phet (Atividade retirada de (AGUIAR, 2014)). Um aparato de Stern-Gerlach com campo magnético orientado na direção z é esquematizado na Figura 31.

Figura 31 – Experimento de Stern-Gerlach.



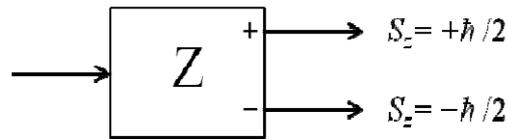
Fonte – Extraído de AGUIAR (2014).

De forma ainda mais esquemática representado pela Figura 32.

a) No experimento de Stern-Gerlach representado pela Figura 33, $N_0 = 10^5$ partículas passam pelo aparato. Na saída, o feixe correspondente a $S_z = -\frac{\hbar}{2}$ é bloqueado, e N_1 partículas são detectadas com $S_z = +\frac{\hbar}{2}$. Se o estado inicial das partículas é $|\Phi\rangle = 0,8|+z\rangle + 0,6|-z\rangle$, qual o valor esperado para N_1 ?

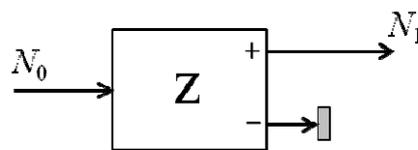
b) Dois analisadores de Stern-Gerlach são colocados um após o outro, como mostra Figura 34. Calcule quantas partículas sairão do segundo aparato com $S_z = +\frac{\hbar}{2}$, ou seja, obtenha

Figura 32 – Representação simplificada do aparato de Stern-Gerlach.



Fonte – Extraído de AGUIAR (2014).

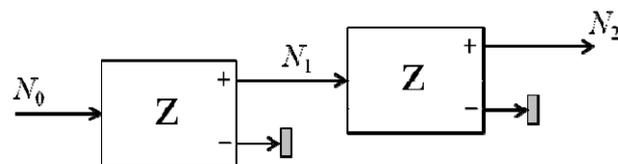
Figura 33 – Aparato de Stern-Gerlach com uma saída bloqueada.



Fonte – Extraído de AGUIAR (2014).

o valor esperado de N_2 .

Figura 34 – Dois aparatos de Stern-Gerlach.



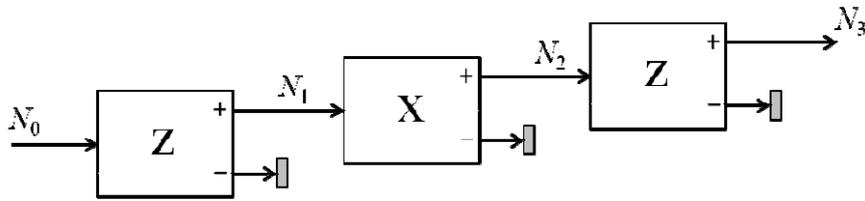
Fonte – Extraído de AGUIAR (2014).

c) Finalmente, mais um analisador na direção z é adicionado ao conjunto, como ilustrado na Figura 35. Qual o valor esperado para N_3 ?

Questão 4 (Questão elaborada com base em FEYNMAN, LEIGHTON e SANDS (1966))
Vamos agora imaginar um feixe de spin um, passando por um aparato de Stern-Gerlach (doravante chamaremos esse aparato simplesmente de S). Assim, as partículas ao atravessarem S podem seguir três possíveis trajetórias, conforme Figura 36.

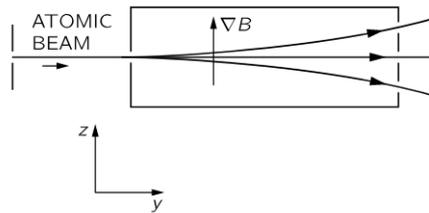
Imaginemos dois aparatos de Stern-Gerlach idênticos um na sequência do outro. Podemos agora purificar os feixes, colocando uma chapa no meio do aparato e bloqueando dois dos feixes. Os átomos ao atravessarem esse aparato podem tomar o caminho para cima de S , que diremos no “estado mais” em relação à S ; os que seguem o caminho do meio diremos que estão no “estado 0”

Figura 35 – Três aparatos de Stern-Gerlach em sequência.



Fonte – Extraído de AGUIAR (2014).

Figura 36 – Experimento de Stern-Gerlach em que átomos de spin um são divididos em três feixes.



Fonte – Extraído de FEYNMAN, LEIGHTON e SANDS (1966).

com relação à S ; e por fim, os que seguem para baixo estão no “estado menos” em relação à S , essa simbologia está representada na Figura 37. Na sequência, colocamos o segundo aparato,

Figura 37 – Simbologia adotada para representar os três feixes no aparato S .

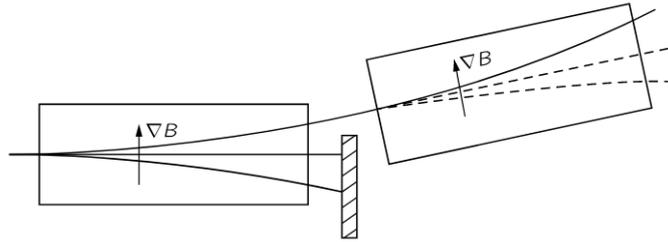
$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \\ S$$

Fonte – Extraído de FEYNMAN, LEIGHTON e SANDS (1966).

conforme Figura 38, que chamaremos de aparato S' , que temos como intuito, obter um feixe filtrado, ou seja, puro.

Vamos supor que tenhamos bloqueado o feixe (0) e o feixe (-) em S . Portanto ao sair de S as partículas seguirão trajetória (+) em relação à S . Ao chegar no segundo aparato (S') os feixes seguirão a mesma trajetória, ou seja, sairão do segundo aparato pelo caminho (+) em relação à S' . Neste ponto, poderíamos fazer diversas análises de bloqueio no primeiro aparato e também de bloqueio no segundo aparato. Vejamos alguns exemplos: se no primeiro aparato bloquearmos os caminhos (0 e -) e no no segundo aparato bloquearmos também os caminhos (0 e -), sabemos que 100% das partículas que passam em S também passam em S' , conforme Figura 39. ; por outro lado, se bloquearmos em S os caminhos (+ e 0) e em S' bloquearmos os

Figura 38 – Representação dos átomos passando pelo segundo aparato.



Fonte – Extraído de FEYNMAN, LEIGHTON e SANDS (1966).

Figura 39 – Representação do bloqueio dos caminhos (0 e -) em S e em S' .

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\}$$

$S \qquad S$

Fonte – Extraído de FEYNMAN, LEIGHTON e SANDS (1966).

caminhos (0 e -), nada sai no final, ou seja, 0%. Essa situação pode ser vista na Figura 40. Para

Figura 40 – Representação do bloqueio dos caminhos (+ e 0) em S e dos caminhos (0 e -) em S' .

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\}$$

$S \qquad S$

Fonte – Extraído de FEYNMAN, LEIGHTON e SANDS (1966).

analisarmos as amplitudes (probabilidade) de que um feixe esteja em uma determinada trajetória, usaremos a notação de Dirac. Esta notação, consiste em descrever a amplitude de um átomo que está no estado a passe para o estado b , denotado por $\langle b|a \rangle$ (lê-se da direita para a esquerda). Então, no caso da Figura 39, podemos dizer que amplitude de um átomo que no aparato S segue o caminho (+) de no aparato S' ele também seguir a trajetória (+) é de 100%, que denotaremos como $\langle +S'|+S \rangle = 100\% = 1$. Já na Figura 40, temos que a amplitude de um átomo passara de $-S$ para $+S'$ é de 0%, denotado por $\langle +S'|-S \rangle = 0\% = 0$.

De posse das informações do texto acima, determine:

$$\langle +S'|+S \rangle =$$

$$\langle 0S'|+S \rangle =$$

$$\langle -S'|+S \rangle =$$

$$\langle +S'|0S \rangle =$$

$$\langle 0S'|0S \rangle =$$

$$\begin{aligned} \langle -S' | 0S \rangle &= \\ \langle +S' | -S \rangle &= \\ \langle 0S' | -S \rangle &= \\ \langle -S' | -S \rangle &= \end{aligned}$$

Agora, complete a tabela abaixo:

Tabela 3 – Posições e símbolos dos filtros no aparato de Stern-Gerlach

		de		
		+S	0S	-S
para	+S			
	0S			
	-S			

Fonte – Adaptado de FEYNMAN, LEIGHTON e SANDS (1966).

Tomando como base a tabela acima, escreva a Matriz de estados puros, que chamaremos de matriz P , em que i e j representam dois estados quaisquer, sendo que $\langle j|i \rangle = 0$, se $i \neq j$; e, $\langle j|i \rangle = 1$, se $i = j$.

6.3 SEGUNDA PROPOSTA DIDÁTICA

O nosso grande objetivo nesse trabalho é expor aos alunos aplicações de matrizes na física, na química e nas diversas áreas da ciência. Para o desenvolvimento dessa atividade, o aluno deve já dominar o conceito de operações com matrizes.

Essa atividade pode ser desenvolvida conjuntamente com outros professores das disciplinas de:

- Física.
- Matemática.
- Química.

6.3.1 TEMPO PREVISTO PARA A ATIVIDADE

- Aproximadamente 3 h/a.

6.3.2 OBJETIVOS

1. Demonstrar aplicações para o uso de matrizes nas disciplinas de física, química e outras áreas do conhecimento científico.

2. Aplicar o conceito de operações com matrizes (principalmente o produto).
3. Diferenciar a mecânica quântica da mecânica clássica, comparando o resultado esperado pelo aluno e o obtido no experimento.

6.3.3 RECURSOS DIDÁTICOS

- Notebook.
- Lousa e giz/pincel para quadro branco.
- Data show.

6.3.4 DESENVOLVIMENTO DA AULA

1. Na primeira aula, apresentar uma sinópsse histórica do desenvolvimento da física clássica até chegar na mecânica quântica. Seria interessante trabalhar, principalmente, o conceito de spin e suas representações. Trabalho desenvolvido pelo professor de Física.
2. Na segunda aula, o professor de matemática introduz o conceito de autovalor e autovetor. Tomando como referência a primeira aula e o conteúdo trabalhado nessa aula, desenvolver os exercícios propostos.
3. Terceira aula: Mostrar aplicações do conceito visto na aula anterior. Mostrar a relação de matrizes, spin, sistemas de dois níveis por meio do anel benzeno e da molécula de amônia.

6.3.4.1 EXERCÍCIOS SUGERIDOS PARA A SEGUNDA AULA

Segundo BUENO e KANEKO (2018), “a aplicação de uma matriz sobre um vetor x rotaciona tal vetor no espaço”. Contudo, se \mathbf{x} é um autovetor de \mathbf{A} , então, a ação de \mathbf{A} sobre \mathbf{x} será apenas uma compressão ou expansão por um fator $|\lambda|$, na direção inicial de \mathbf{x} ”.

Exercício 1. Dada a matriz $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 4 & 5 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}$, mostre que:

a) $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}$ é um autovetor de \mathbf{A} e, determine o autovalor $|\lambda|$ associado ao autovetor \mathbf{x} .

b) $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} \frac{5}{2} \\ 1 \end{bmatrix}$ é um autovetor de \mathbf{A} e, determine o autovalor $|\lambda|$ associado ao autovetor \mathbf{x} .

Exercício 2. Determinar a matriz operador $S_y = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$ na base $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{\pm i}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$. Para determinar a matriz operador devemos efetuar a operação $S_y \mathbf{x} = \frac{\hbar}{2} \mathbf{x}$.

Exercício 3. Determinar a matriz operador $S_x = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$ na base $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{\pm 1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$. Para determinar a matriz operador devemos efetuar a operação $S_x \mathbf{x} = \frac{\hbar}{2} \mathbf{x}$.

Exercício 4. (Exercício adaptado de (AGUIAR, 2014)) As matrizes de Pauli são definidas por $\sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$, $\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$ e $\sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$, de modo que $S_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z$, $S_x = \frac{\hbar}{2} \sigma_x$ e $S_y = \frac{\hbar}{2} \sigma_y$. Mostre que as matrizes de Pauli tem as seguintes propriedades:

a) $\sigma_z^2 = I$, $\sigma_x^2 = I$ e $\sigma_y^2 = I$ com I igual a matriz identidade de ordem 2.

b) $\sigma_z \sigma_x = \sigma_y$, $\sigma_y \sigma_x = \sigma_z$ e $\sigma_z \sigma_y = \sigma_x$.

c) $\sigma_z \sigma_x = -\sigma_x \sigma_z$, $\sigma_z \sigma_y = -\sigma_y \sigma_z$ e $\sigma_y \sigma_x = -\sigma_x \sigma_y$.

7 CONCLUSÃO

Neste trabalho fizemos um levantamento histórico da concepção do átomo, descrevendo como o conceito de átomo foi mudando ao longo dos séculos, com o advento de novos experimentos, novos elementos foram sendo incorporados aos átomos, até chegarmos no modelo padrão atual. O próprio conceito de física teve que ser modificado, principalmente no início do século XX, quando novas descobertas mudaram radicalmente a nova visão da mecânica. Passamos de uma física clássica-Newtoniana para o advento da física moderna, da mecânica quântica. Possibilitando, assim, não mais uma análise determinística, mas sim, a análise probabilística de que determinado evento seja medido.

Em meio a todas essas mudanças, um experimento recebeu maior ênfase: o experimento de Stern-Gerlach. Esse experimento, que de imediato não teve a sua extensão totalmente de imediato compreendida, ao longo do tempo nos auxiliou na comprovação da existência do spin, nos possibilitou o desenvolvimento de todo o conceito de matrizes na física quântica. Serviu de base para introduzir o conceito de sistemas de dois níveis sendo que esses sistemas de dois níveis, foram exemplificados pela molécula de amônia e o anel benzênico (também conhecido como anel aromático). Muitas outras aplicações ainda poderão ser exploradas em outros trabalhos vindouros, como: a molécula de hidrogênio, forças nucleares, o íon molecular do hidrogênio, contraponto entre informação binária clássica para a informação quântica, corantes, o comportamento do elétron num campo magnético.

O uso do ferramental da álgebra linear demonstrou-se essencial para a compreensão de conceitos da física quântica. Vale ressaltar que a álgebra linear tem um grande potencial a ser explorado pelo professor de Ensino Médio, assunto, aliás, de grande importância na mecânica quântica e dentro de outras áreas da ciência, permitindo, assim, inferir mais aplicações decorrentes do uso de matrizes. Essas aplicações podem ser utilizadas para contextualizar o ensino, bem como, para servir de tema de oficinas ou ainda de seminários e pesquisas.

A Mecânica Quântica possui um formalismo próprio, que se faz necessário para uma compreensão dos estados que compõem a física moderna. Infelizmente, esse mesmo formalismo configura-se como um dos grandes pontos de dificuldade na explanação da física moderna. A introdução de conceitos quânticos, mesmo fazendo uso de uma linguagem mais simples, torna-se uma tarefa de grande dificuldade, extremamente exigente para os educadores. Quais pontos devo destacar? Quais posso omitir? E a parte histórica? Qual momento histórico devo dar mais ênfase? Todos esses questionamentos aparecem quando tentamos levar o aluno a fazer essa transição da física clássica para a física moderna.

Também não é diferente quando analisamos a linguagem usada no ensino da mecânica quântica, conforme (PAULO; MOREIRA, 2011, p. 430):

O problema da verbalização ou da linguagem, tanto na compreensão como no ensino da Mecânica Quântica, é de particular importância, pois, dado o grau de abstração dos conceitos, há um risco considerável de que sejam deturpados em função de uma palavra ou frase mal colocada. O mundo ou domínio atômico parece apresentar-se como uma junção (ou acoplamento) de concepções contrárias. [...] sabemos que os aspectos ondulatórios e corpusculares não podem ser medidos simultaneamente. Para “realizar” ou tornar real o conceito de dualidade, não basta um traço de junção ou o acréscimo da preposição “e” entre os dois adjetivos, formando o termo “onda-partícula” ou “onda e partícula”. Instaura-se, aqui, um problema de conceitualização na Física Quântica que, até nos dias atuais, não está resolvido. Não há consenso sobre qual é o melhor termo para descrever ou caracterizar a entidade quântica. Ou seja, empregamos palavras que definem o mundo macroscópico num âmbito microscópico.

Essa dificuldade de ensinar mecânica quântica não é exclusividade do Ensino Médio. Ela também tem sido também objeto de discussão no ensino universitário, principalmente porque "seus princípios fogem da visão clássica de mundo que possuímos"(GRECA; MOREIRA; HERSCOVITZ, dez., 2001, p. 444).

Em vista de todas as dificuldades apresentadas e tantas outras que sabemos que existem, é que uma abordagem mais simplificada envolvendo o conceito de matrizes, torna-se relevante. A possibilidade de “matematizar” o pensamento quântico por meio de matrizes e conseguir demonstrar aplicações da mecânica quântica, como os sistemas de dois níveis, faz com que conceitos tidos como “estranhos” possam tornar-se mais compreensíveis aos alunos. Na mesma via, o ensino da mecânica quântica pode fomentar o interesse deles por matrizes.

Enfim, esperamos que esse trabalho possa servir valorosamente para o professor de Matemática, Física ou Química no preparo de suas aulas, constituindo-se, assim, em um suporte pedagógico. Nosso desejo, então, é que ele possa levar os professores a buscar, cada vez mais, novas formas de ministrar suas aulas, bem como encontrar novos métodos de ensinar conjuntamente com outras áreas do conhecimento.

REFERÊNCIAS

- AGUIAR, C. E. **Mecânica Quântica - Lista de Exercícios 3**. 2014. Disponível em: <http://www.if.ufrj.br/~carlos/fismod/antigo/exerciciosMQ2014_3.pdf>. Acesso em: 15/09/2018.
- AMARAL, B.; BARAVIEIRA, A. T. B.; CUNHA, M. O. T. **Mecânica quântica para matemáticos em formação - 28º Colóquio Brasileiro de Matemática**. Rio de Janeiro: IMPA, 2011.
- ANTON, H.; RORRES, C. **Álgebra linear com aplicações**. tradução técnica: Claus Ivo Doering. - 10 ed. Porto Alegre - RS: Bookman, 2012.
- BARAVIERA, A. T. **Introdução à mecânica quântica**. 2011. Disponível em: <<http://www.mat.ufmg.br/~tcunha/intmecquant-Baravi.pdf>>. Acesso em: 29/08/2018.
- BARQUEIRO, R. **O Modelo Padrão da Física de Partículas - Blogspot**. 2010. Disponível em: <<http://atomoemeio.blogspot.com/2010/03/o-modelo-padrao-da-fisica-de-particulas.html>>. Acesso em: 02/05/2018.
- BORBA, E. M. **Trabalho de Conclusão de Curso (Matemática Pura e Aplicada) – Uma Proposta para o Ensino de Matrizes com o Apoio de Tecnologia**. 2011. Disponível em: <<http://www.lume.ufrgs.br/bitstream/handle/10183/31617/000784022.pdf?sequence=1>>. Acesso em: 30/10/2018.
- BRENNAN, R. P. **Gigantes da Física: uma história da física moderna através de oito biografias**. Rio de Janeiro: Jorge Zahar Editor Ltda., 2000.
- BUENO, H. P. **Álgebra Linear - Um segundo curso**. 2002. Disponível em: <<https://docs.ufpr.br/~akirilov/ensino/2012/arquivos/alhb.pdf>>. Acesso em: 28/12/2018.
- BUENO, J. d. F.; KANEKO, U. F. **Cálculo diferencial e integral IV**. Londrina: Editora e Distribuidora Educacional S.A., 2018.
- CHAVES, A.; SAMPAIO, J. F. **Física básica: Mecânica**. Rio de Janeiro: LTC, 2017.
- CHIBENI, S. S. **O Surgimento da Física Quântica (Notas de aula)**. 1992. Disponível em: <<http://www.unicamp.br/~chibeni/textosdidaticos/fisquantica.pdf>>. Acesso em: 20/06/2018.
- COHEN-TANNOUJJI, B. e. a. **Mécanique Quantique**. Paris: Hermann, 1977.
- COSTA, J. M. **Dissertação de Mestrado em Software Interativo como Ferramenta para a Otimização do Ensino de Biologia Celular**. 2017. Disponível em: <http://repositorio.utfpr.edu.br/jspui/bitstream/1/2662/1/PG_PPGECT_M_Costa%2C%20Jess%20C%20Murilo_2017.pdf>. Acesso em: 30/12/2018.
- DAMASIO, F.; PEDUZZI, L. O. Q. **Einstein usou dados experimentais ao propor a relatividade?** Revista Física na Escola, maio, 2017. v. 15, n. 1, 4-11 p. Disponível em: <<http://www1.fisica.org.br/fne/phocadownload/Vol15-Num1/a02.pdf>>. Acesso em: 18/12/2018.
- DIRAC, P. **The Principles of Quantum Mechanics**. London: Oxford U. Press, 1930.

- DUCK, I.; SUDARSHAN, E. C. G. **Toward an understanding of the spin-statistics theorem**. American Association of Physics Teachers, 1998. 284 p. Disponível em: <<https://aapt.scitation.org/doi/10.1119/1.18860>>. Acesso em: 29/09/2018.
- FERNANDES, R. K.; KIMEV, D. C. B. **Álgebra linear e vetorial**. Londrina - PR: Editora e Distribuidora Educacional S.A., 2015.
- FEYNMAN, R. P.; LEIGHTON, R. B.; SANDS, M. **The Feynman - Lectures on Physics: Quantum Mechanics, vol. 1**. Massachusetts: Addison-Wesley, 1965.
- FEYNMAN, R. P.; LEIGHTON, R. B.; SANDS, M. **The Feynman - Lectures on Physics: Quantum Mechanics, vol. 3**. Massachusetts: Addison-Wesley, 1966.
- FIGUEIREDO, L. M. **Álgebra linear 1: v. 2**. 2. ed. – Rio de Janeiro: Fundação CECIERJ, 2009.
- FONTANAILLES, G. **Química Espetacular Blogspot**. 2013. Disponível em: <<http://espetacularquimica.blogspot.com/2013/02/o-modelo-atomico-de-thomson.html>>. Acesso em: 01/05/2018.
- GERLACH, W.; STERN, O. Der experimentelle nachweis der richtungsquantelung im magnetfeld. **Zeitschrift für Physik**, v. 9, n. 1, p. 349–352, Dec 1922. ISSN 0044-3328. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF01326983>>. Acesso em: 29/09/2018.
- GERSTNER, E. Answers on a postcard. **Nature Milestones**, p. 1, Mar. 2008. Disponível em: <<https://www.nature.com/milestones/milespin/pdf/milespin02.pdf>>. Acesso em: 29/09/2018.
- GOMES, G. G.; PIETROCOLA, M. O experimento de Stern-Gerlach e o spin do elétron: um exemplo de quasi-história. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 33, n. 2, 2011. ISSN 1806-1117. Disponível em: <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1806-11172011000200019&lng=p>. Acesso em: 29/09/2018.
- GRECA, I. M.; MOREIRA, M. A.; HERSCOVITZ, V. E. **Uma Proposta para o Ensino de Mecânica Quântica**. Revista Brasileira de Ensino de Física, dez., 2001. v. 23, n. 4, 444-457 p. Disponível em: <<http://www.scielo.br/pdf/rbef/v23n4/v23n4a10.pdf>>. Acesso em: 01/11/2018.
- GRIFFITHS, D. J. **Introduction to Quantum Mechanics**. New York: Prentice Hall Inc., 1995.
- HEISENBERG, W. **Physics and Philosophy The Revolution in Modern Science**. 1958. Disponível em: <<https://doi.org/EBDHEISEN>>. Acesso em: 07/10/2018.
- JAMMER, M. **The Conceptual Development of Quantum Mechanics**. New York: McGraw-Hill, 1966.
- JOAQUIM, F. **Introduction to particle Physics**. 2017. Disponível em: <https://indico.cern.ch/event/577125/contributions/2676159/attachments/1518180/2370392/FJoaquim_Escola_Profs_CERN_2017_1-4.pdf>. Acesso em: 20/06/2018.
- JOAQUIM, F. **Introduction to particle Physics**. 2017. Disponível em: <https://indico.cern.ch/event/577125/contributions/2676177/attachments/1519578/2373256/FJoaquim_Escola_Profs_CERN_2017_2de4.pdf>. Acesso em: 20/06/2018.
- KREYSZIG, E. **Introductory Functional Analysis with Applications**. Wiley India Pvt. Limited, 2007. (Wiley classics library). ISBN 9788126511914. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=osXw-pRsptoC>>. Acesso em: 17/11/2018.

- LIBOFF, R. L. **Introductory Quantum Mechanics**. New York: Addison Wesley, 1998.
- LIMA, E. L. **Álgebra linear**. Rio de Janeiro - RJ: IMPA, 2016.
- LOPES, A. O. **Uma Breve Introdução à Matemática da Mecânica Quântica - 31º Colóquio Brasileiro de Matemática**. 2017. Disponível em: <https://impa.br/wp-content/uploads/2017/09/31CBM_09.pdf>. Acesso em: 23/09/2018.
- MCT/MEC/FNDE/IGGEA. **Física Vivencial**. 2010. Disponível em: <http://www.fisicavivencial.pro.br/sites/default/files/sf/312SF/05_teor%C3%ADa_frame.htm>. Acesso em: 02/05/2018.
- MEC/SEF, B. **Parâmetros Curriculares Nacionais: Ensino Médio - Matemática. Secretaria da Educação Básica**. [S.l.], 1998. Disponível em: <<http://portal.mec.gov.br/seb/arquivos/pdf/ciencian.pdf>> Acesso em: 19 out. 2018.
- MERZBACHER, E. **Quantum Mechanics**. New York: John Wiley & Sons, 1961.
- NEWTON, S. I. **Philosophiæ naturalis principia mathematica**. 1686. Disponível em: <<https://www.wdl.org/pt/item/17842/>>. Acesso em: 18/12/2018.
- NOVAES, M.; STUDART, N. **Mecânica quântica básica**. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2016.
- PAULING, L.; WILSON, E. B. **Introduction Quantum Mechanics: Whith Applications to Chemistry**. New York and London: McGraw-Hill, 1935.
- PAULO, I. J. C. d.; MOREIRA, M. A. **O Problema da Linguagem e o Ensino da Mecânica Quântica no nível Médio**. Ciência & Educação (Bauru), 2011. v. 17, n. 2, 421-434 p. Disponível em: <<http://www.scielo.br/pdf/ciedu/v17n2/a11v17n2.pdf>>. Acesso em: 01/11/2018.
- PEREZ, S. **Mecânica quântica: um curso para professores da educação básica**. São Paulo: Livraria da Física, 2016.
- PINTO, A. C.; ZANETIC, J. **É Possível levar a Física Quântica para o Ensino Médio?** Caderno Catarinense de Ensino de Física, abr., 1999. v. 16, n. 1, 7-34 p. Disponível em: <<https://periodicos.ufsc.br/index.php/fisica/article/download/6873/6333>>. Acesso em: 01/11/2018.
- POOLE, D. **Álgebra linear: uma introdução moderna**. tradução técnica Martha Salerno Monteiro, Celia Mendes Carvalho Lopes. - 2 ed. - São Paulo: Cengage Learning, 2016.
- SAKURAI, J. J. **Modern Quantum Mechanics**. Massachussets: Addison-Wesley Publishing Company, 1994.
- SANCHES, M. H. F. **Dissertação de Mestrado em Aplicações de Matrizes no Ensino Médio - Efeitos de uma estratégia diferenciada do ensino dos conceitos de matrizes**. 2012. Disponível em: <<http://www.bibliotecadigital.unicamp.br/document/?code=vtls000253634>>. Acesso em: 30/10/2018.
- SANTOS, C. A. dos. **Física Moderna**. 2009. Disponível em: <https://www.if.ufrgs.br/tex/fis142/fismod/mod03/m_s02.html>. Acesso em: 17/11/2018.
- SCHRÖDINGER, E. An Undulatory Theory of the Mechanics of Atoms and Molecules. **Physical Review**, v. 28, n. 6, p. 1049–1070, dec 1926. ISSN 0031-899X. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.28.1049>>. Acesso em: 29/09/2018.

SHOSHANY, B. **“Thinking Quantum”**: Lectures on Quantum Theory for High-School Students. 2018. Disponível em: <<https://arxiv.org/pdf/1803.07098.pdf>>. Acesso em: 23/09/2018.

SILVA, A. C. d.; ALMEIDA, M. J. P. M. d. **Física Quântica no Ensino Médio: o que dizem as Pesquisas**. Caderno Brasileiro de Ensino de Física, dez., 2011. v. 28, n. 3, 624-652 p. Disponível em: <<https://dialnet.unirioja.es/descarga/articulo/5165629.pdf>>. Acesso em: 01/11/2018.

STEINBRUCH, A.; WINTERLE, P. **Álgebra linear e geometria analítica**. São Paulo - SP: Pearson Prentice Hall, 1987.

TAYLOR, J. R.; ROQUE, W. L. **Mecânica clássica**. Porto Alegre: Bookman, 2013.

VEEN, W.; VRAKKING, B. **Homo Zappiens: educando na era digital**. Porto Alegre: Artmed, 2009.

WIKIPEDIA. **Átomo de Bohr**. 2018. Disponível em: <https://pt.wikipedia.org/wiki/%C3%81tomo_de_Bohr>. Acesso em: 01/05/2018.