

FACULDADE DE CIÊNCIAS
UNIVERSIDADE DO PORTO

Mecânica Quântica & Tecnologia

Bruno Amorim

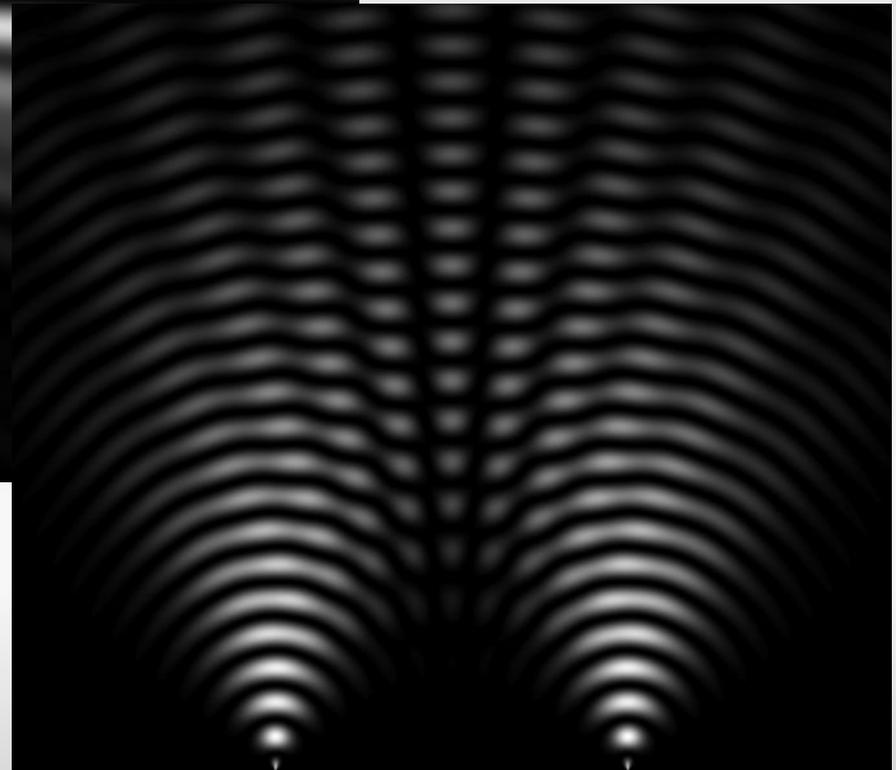
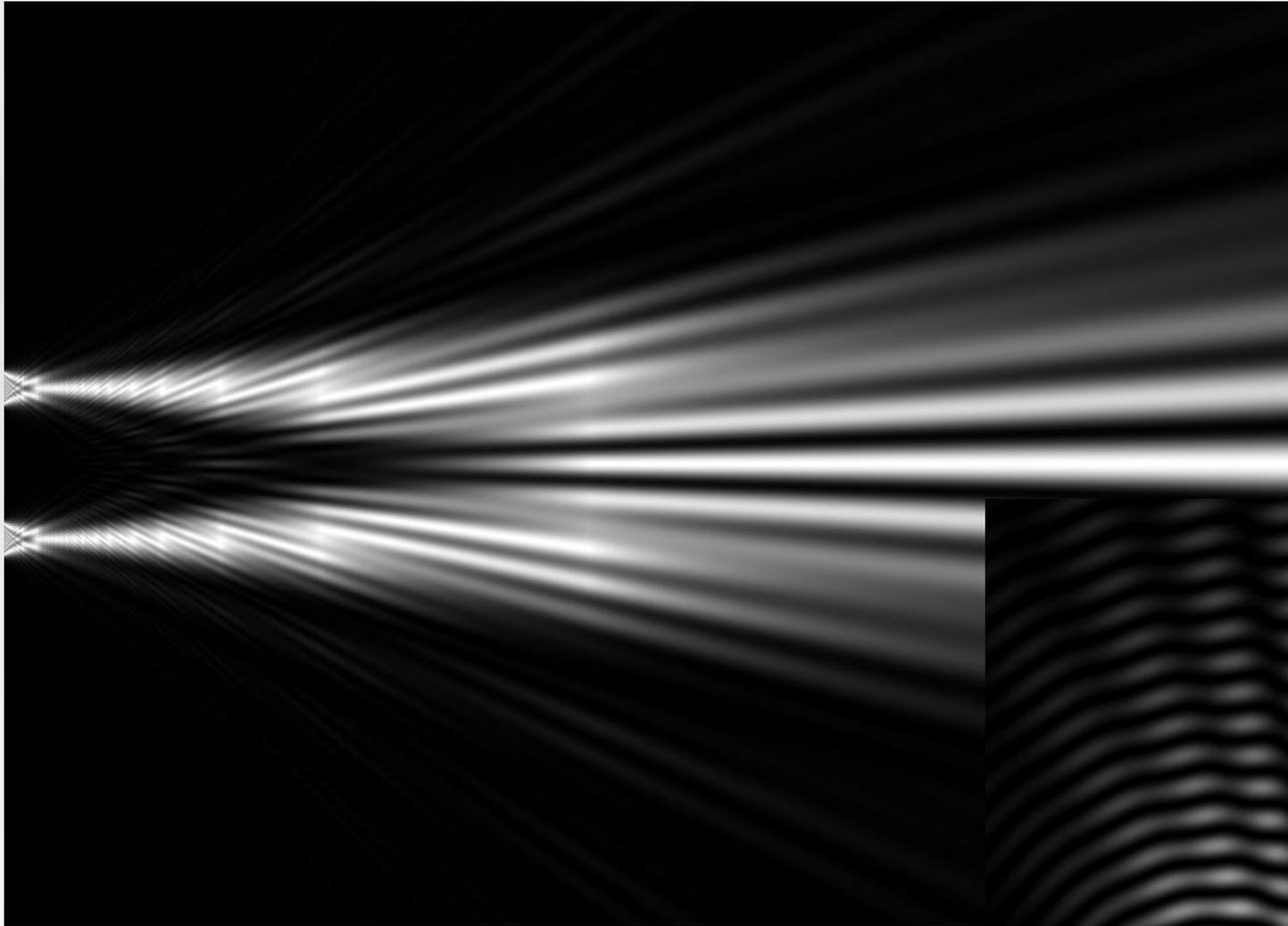
U.PORTO | *r*

Escola de Verão de Física 2011

Resumo do curso

- Porquê Mecânica Quântica?
- Partícula vs Onda
- As Regras do Jogo
- Tecnologia Quântica

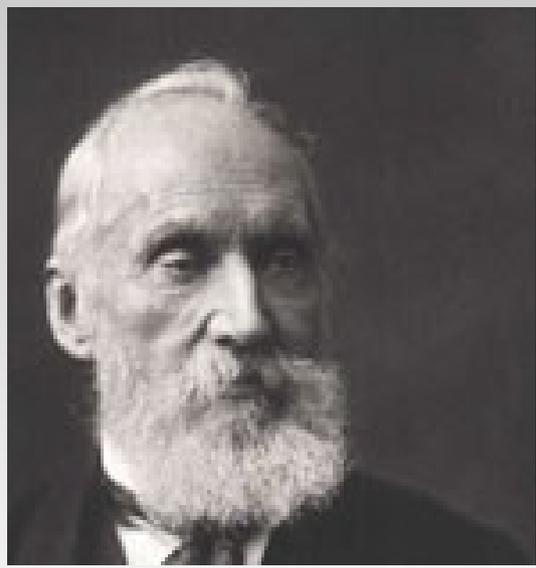
Porquê Mecânica Quântica?



“Quantum mechanics is the description of the behaviour of matter and light in all its details and, in particular, of the happenings on an atomic scale. Things on a very small scale behave like nothing that you have any direct experience about. They do not behave like waves, they do not behave like particles, they do not behave like clouds, or billiard balls, or weights, or like anything that you have ever seen.”



em The Feynman Lectures on Physics



“There is nothing new to be discovered in physics now. All that remains is more and more precise measurement.”

Lord Kelvin (?)

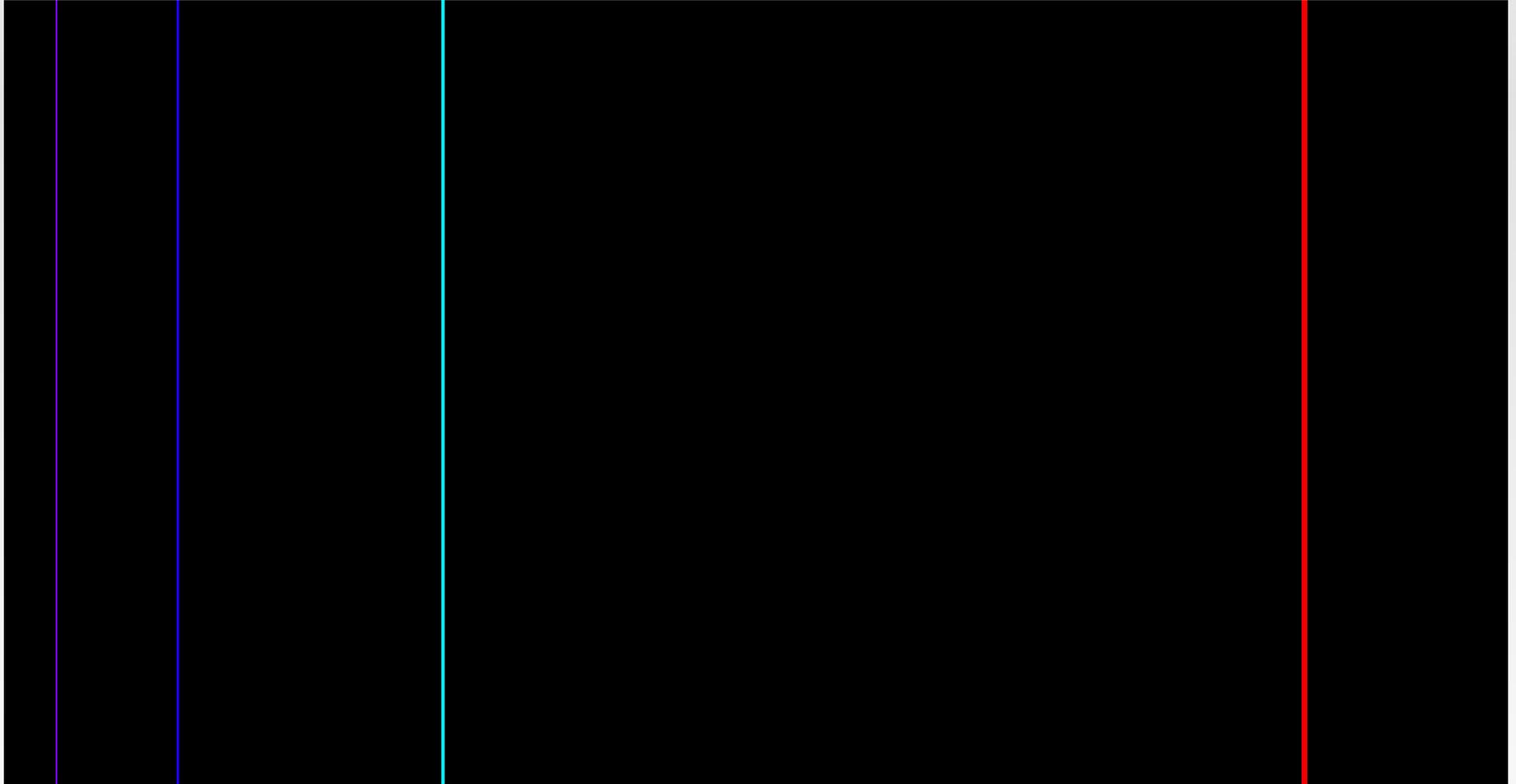
Final século XIX – Início do século XX

Três problemas...

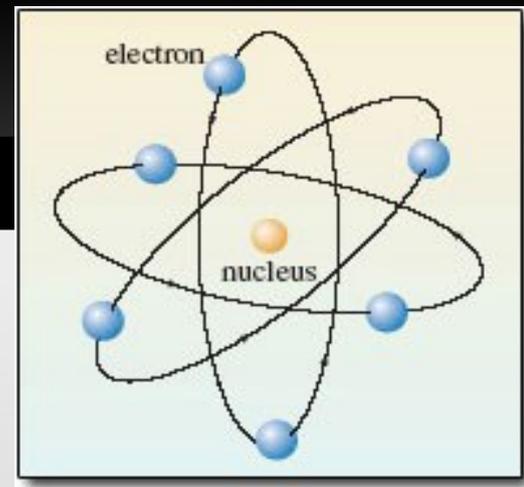
- Átomo de hidrogénio
- Radiação de corpo negro
- Efeito fotoelétrico

Porquê mecânica quântica?

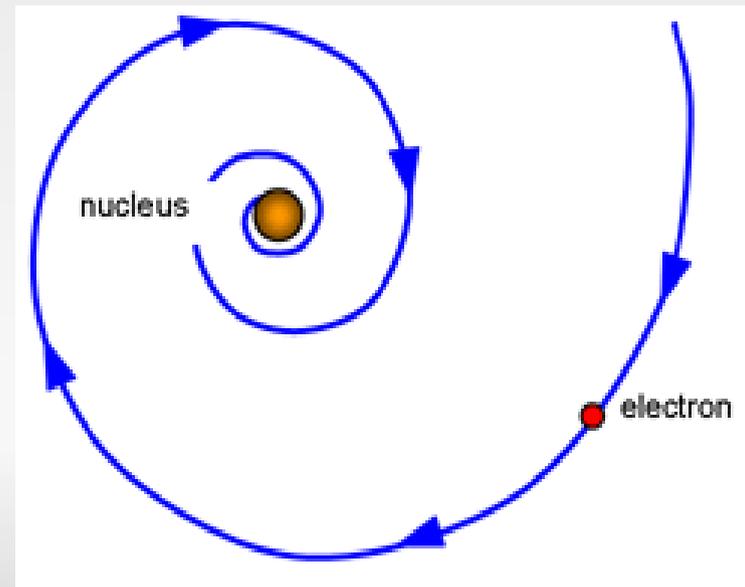
Átomo de hidrogênio



Átomo de hidrogénio



- 1909, Geigner-Marsden:
átomo é constituído por núcleo rodeado de electrões
- Modelo de Rutherford: átomo é análogo a sistema solar
- Problemas
 - Não explica riscas do espectro
 - Átomo devia ser instável



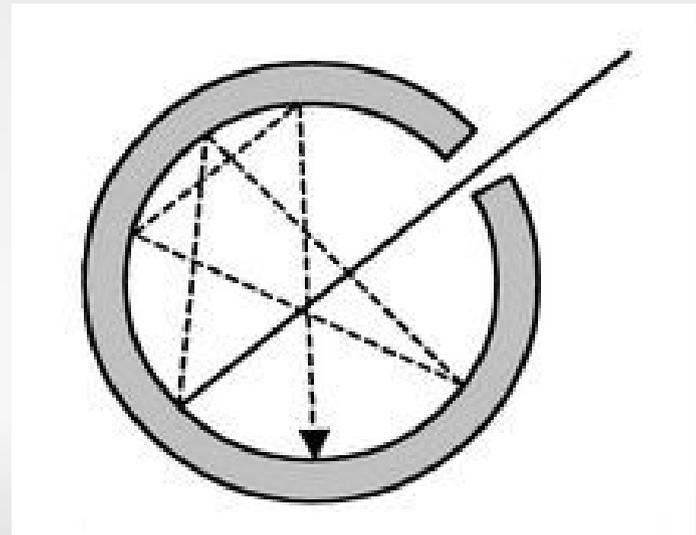
Porquê mecânica quântica?

Radiação de Corpo Negro



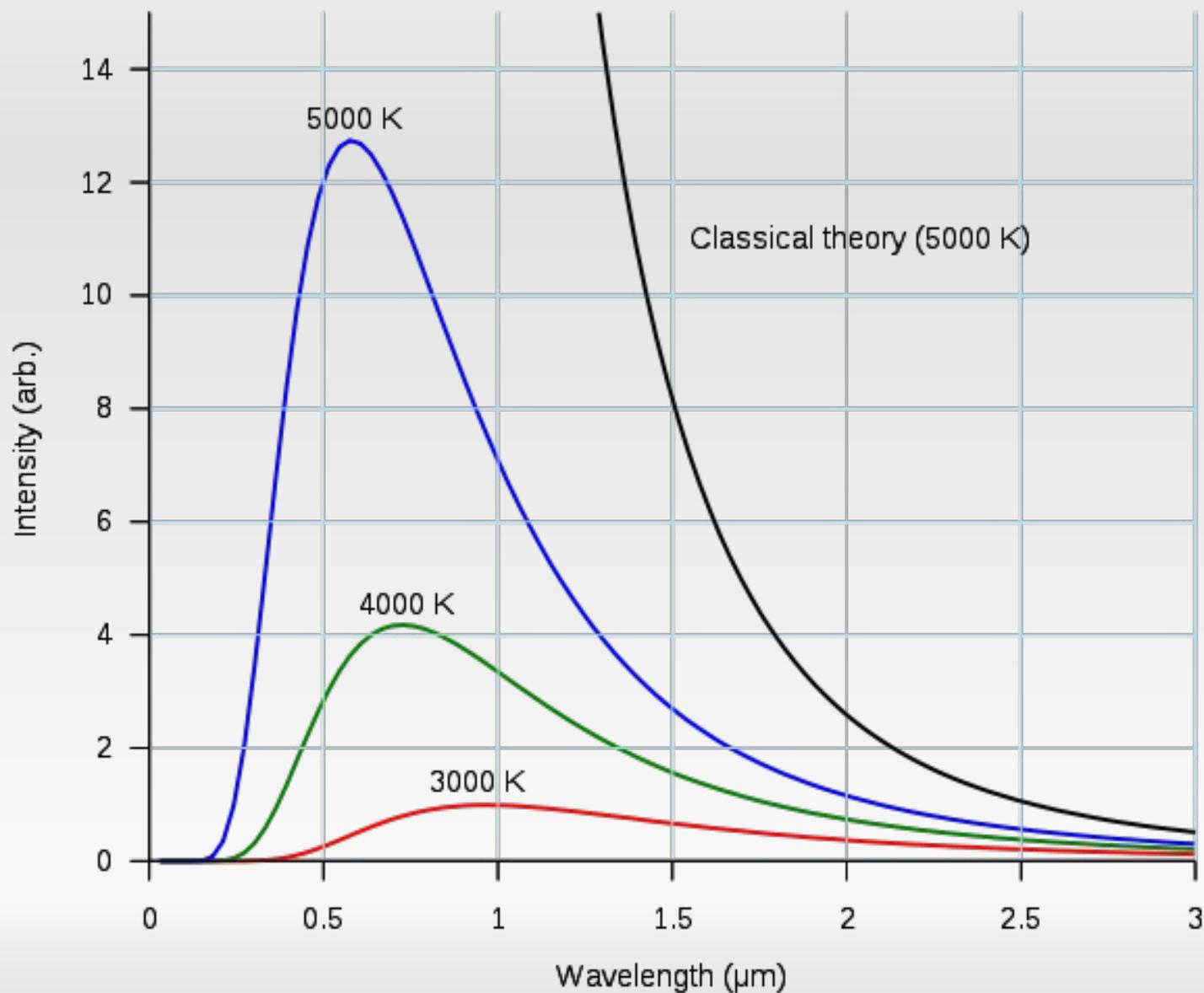
Radiação de Corpo Negro

- Um corpo quando aquecido emite radiação
- À medida que o corpo aquece o brilho torna-se mais intenso e azulado
- Um corpo negro é um objecto que absorve toda a radiação que nele incide, também é um radiador perfeito

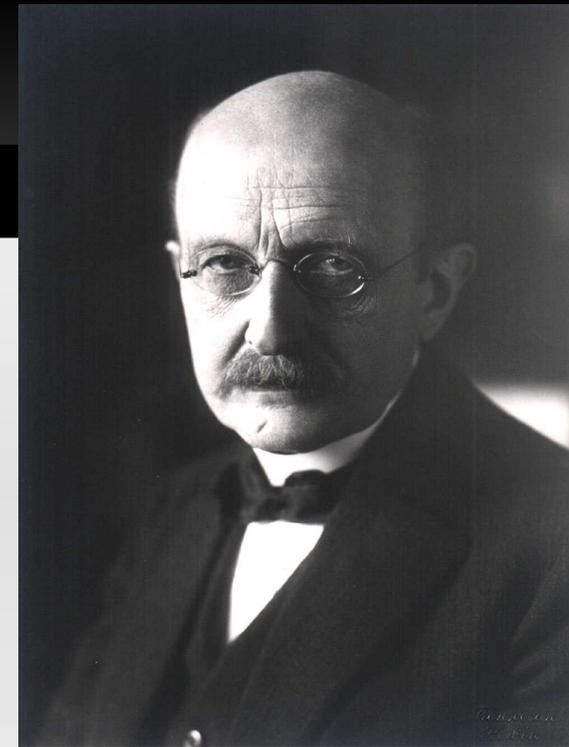


Porquê mecânica quântica?

Radiação de Corpo Negro



Radiação de Corpo Negro



- Em 1900, Max Planck consegue explicar o espectro observado
- Recorre à ideia de osciladores em equilíbrio com radiação
- **Postulado de Planck:**

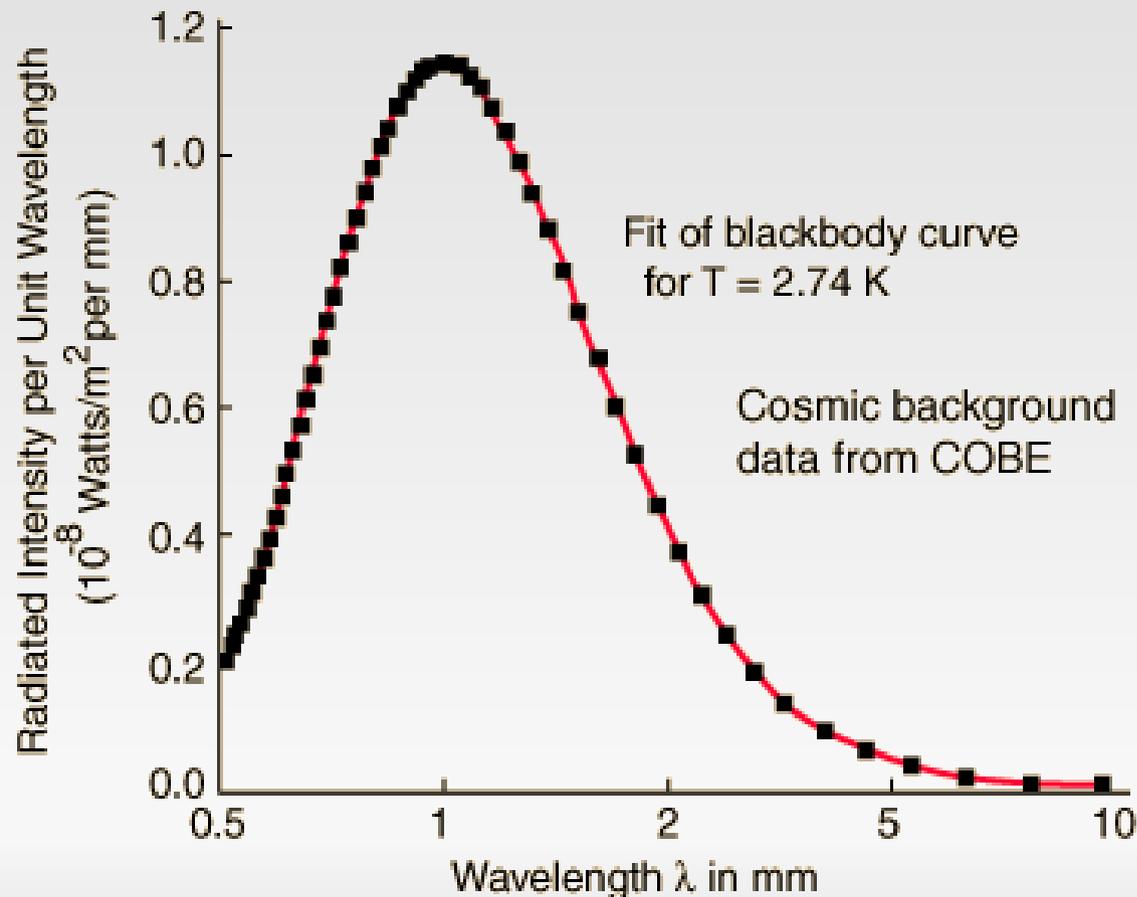
Energia dos osciladores é um múltiplo da quantidade

$$E = h \nu$$

Constante de Planck
 $h = 6,6 \times 10^{-34} \text{ J.s}$

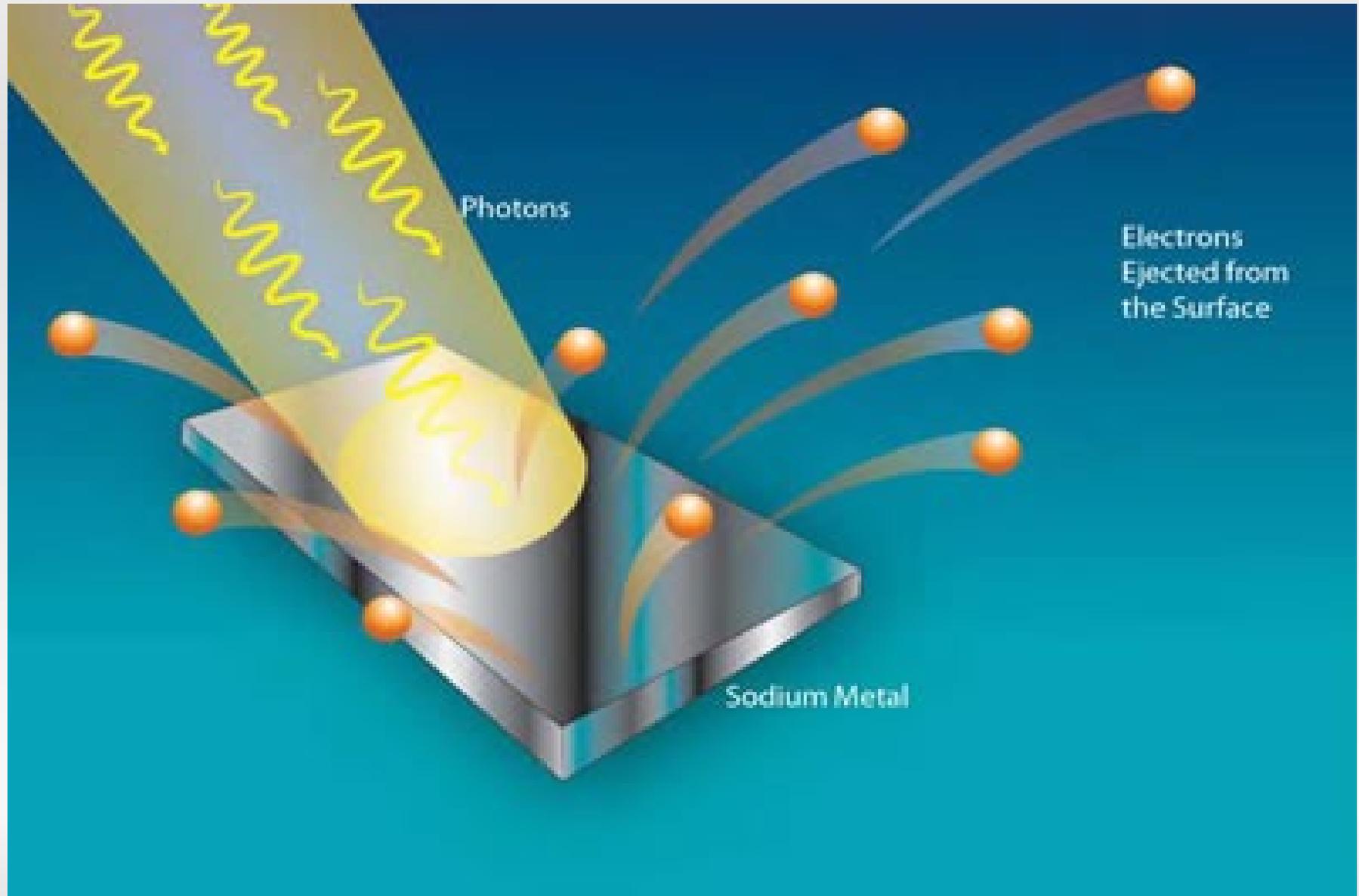
Radiação de Corpo Negro

Radiação cósmica de fundo é o corpo negro mais perfeito conhecido



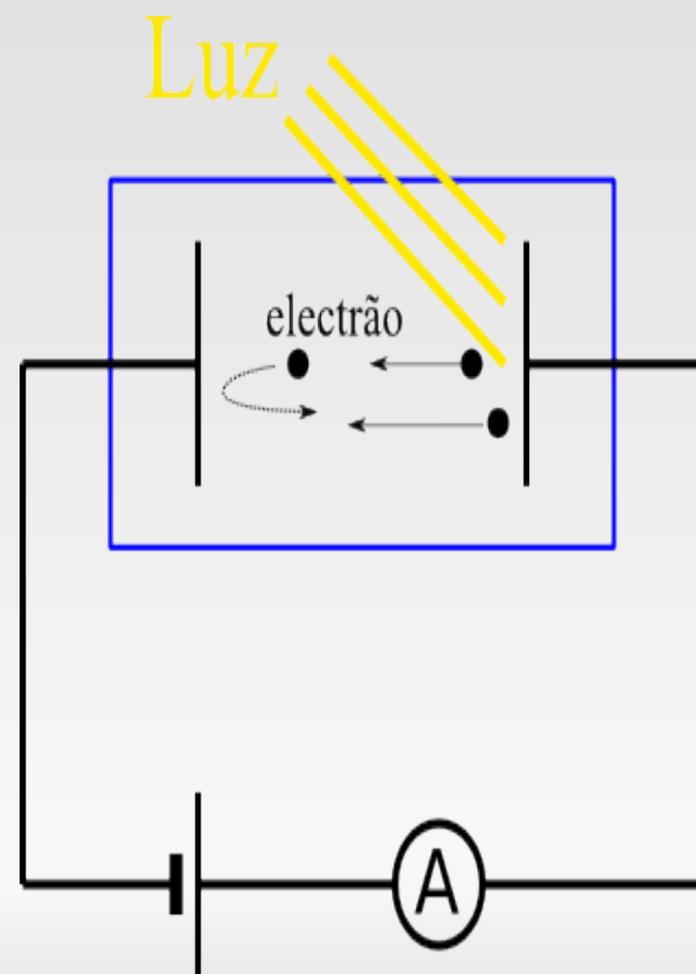
Porquê mecânica quântica?

Efeito fotoelétrico



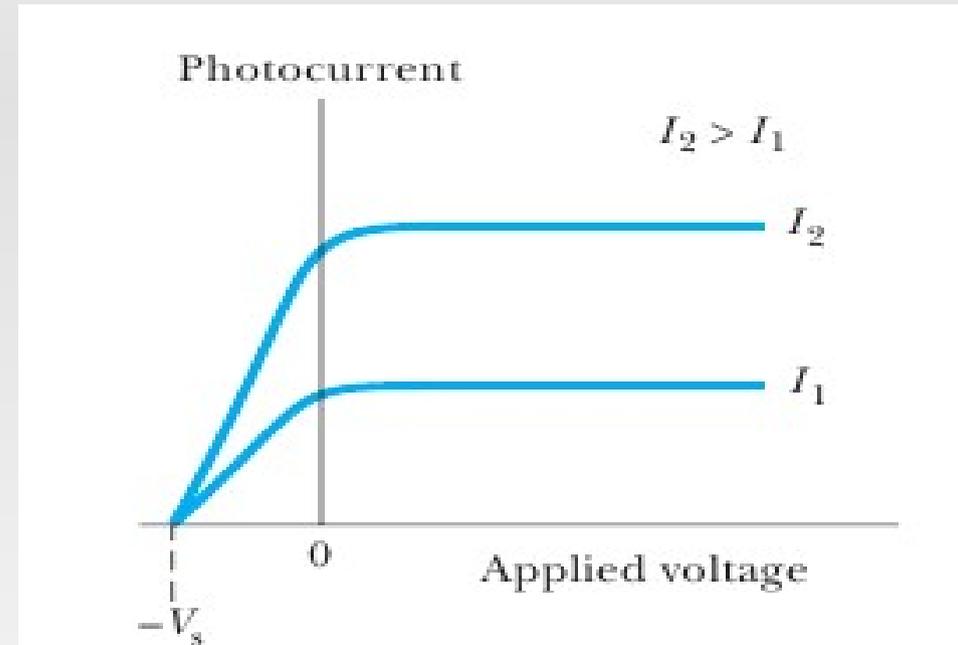
Efeito fotoelétrico

- Descoberto em 1887 por Hertz. Explorado por Philipp Lenard em 1900
- O que se esperava:
 - Energia dos electrões proporcional a intensidade de luz
 - Emissão de electrões ocorre para qualquer frequência da luz

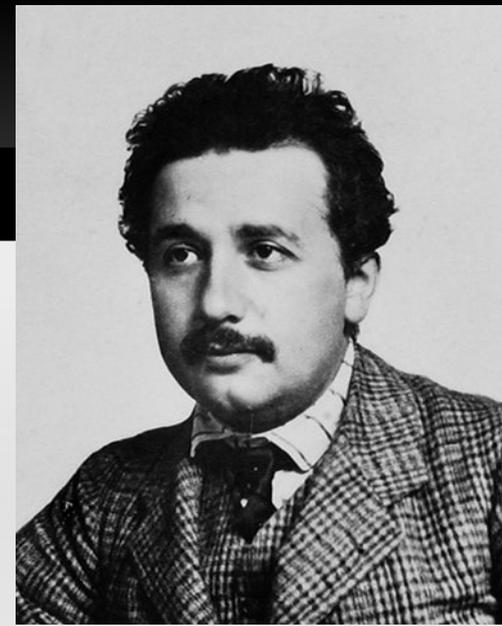


Efeito fotoelétrico

- O que se verificou:
 - Energia dos electrões é independente de intensidade
 - Não há emissão de electrões abaixo de uma frequência característica do metal
 - Número de electrões é proporcional a intensidade da luz
 - Emissão é instantânea ($\Delta t < 10^{-9} s$)



Efeito fotoelétrico



- Em 1905, Einstein explicou efeito fotoelétrico
- Levou mais longe a ideia de quantificação de Planck
- Luz **existe** em pacotes discretos, **quanta** (mais tarde designados por *fotões*)
- Cada *quantum* tem energia $E = h \nu$
- Equação de Einstein:

$$e V_s = \frac{1}{2} m v^2 = h \nu - \phi$$

Luz, que se pensava ser uma onda, parece comportar-se como uma partícula!

Mas afinal o que é uma partícula?

E o que é uma onda?

Partícula vs Onda

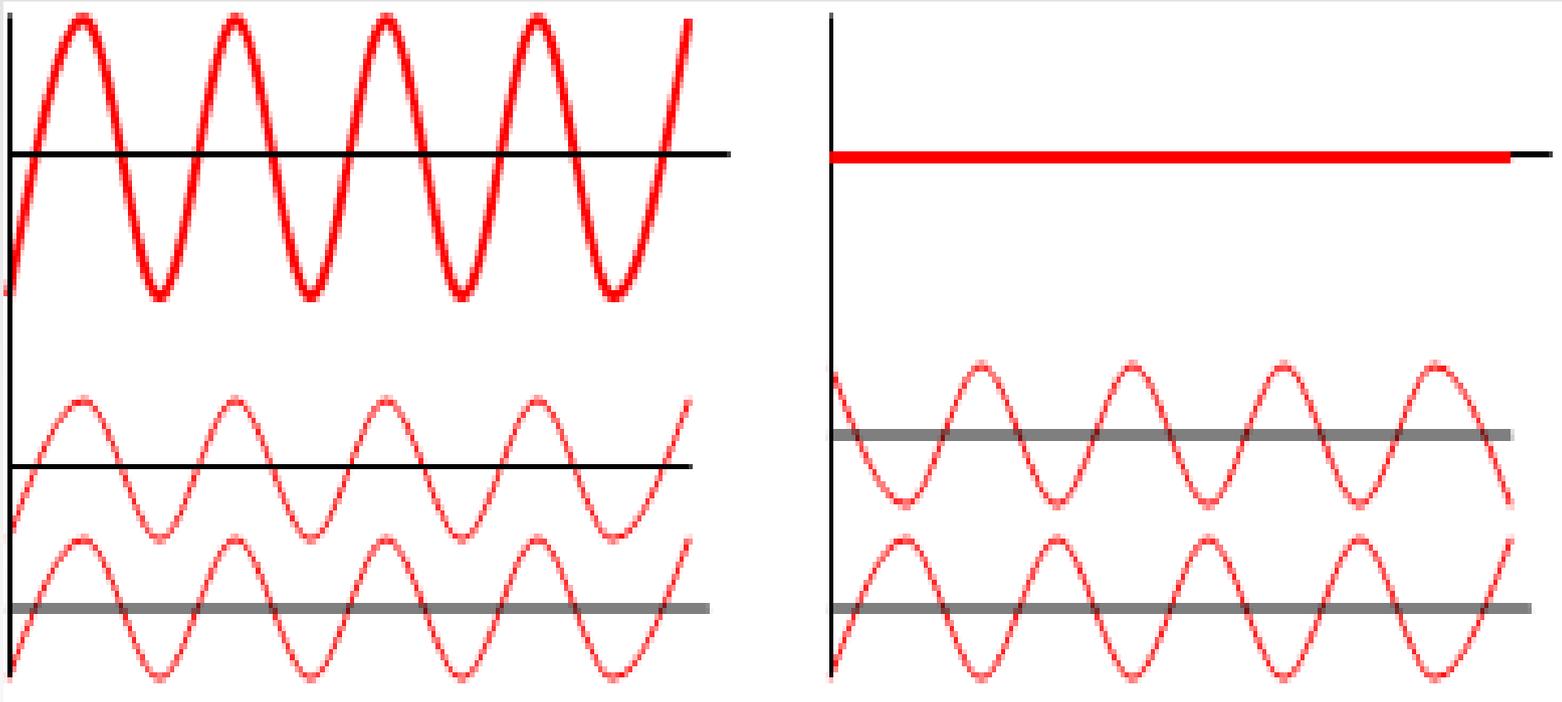


Partícula vs Onda

Ondas: Interferência

Construtiva

Destrutiva



Sobreposição de ondas ➔ Interferência!

Partícula vs Onda

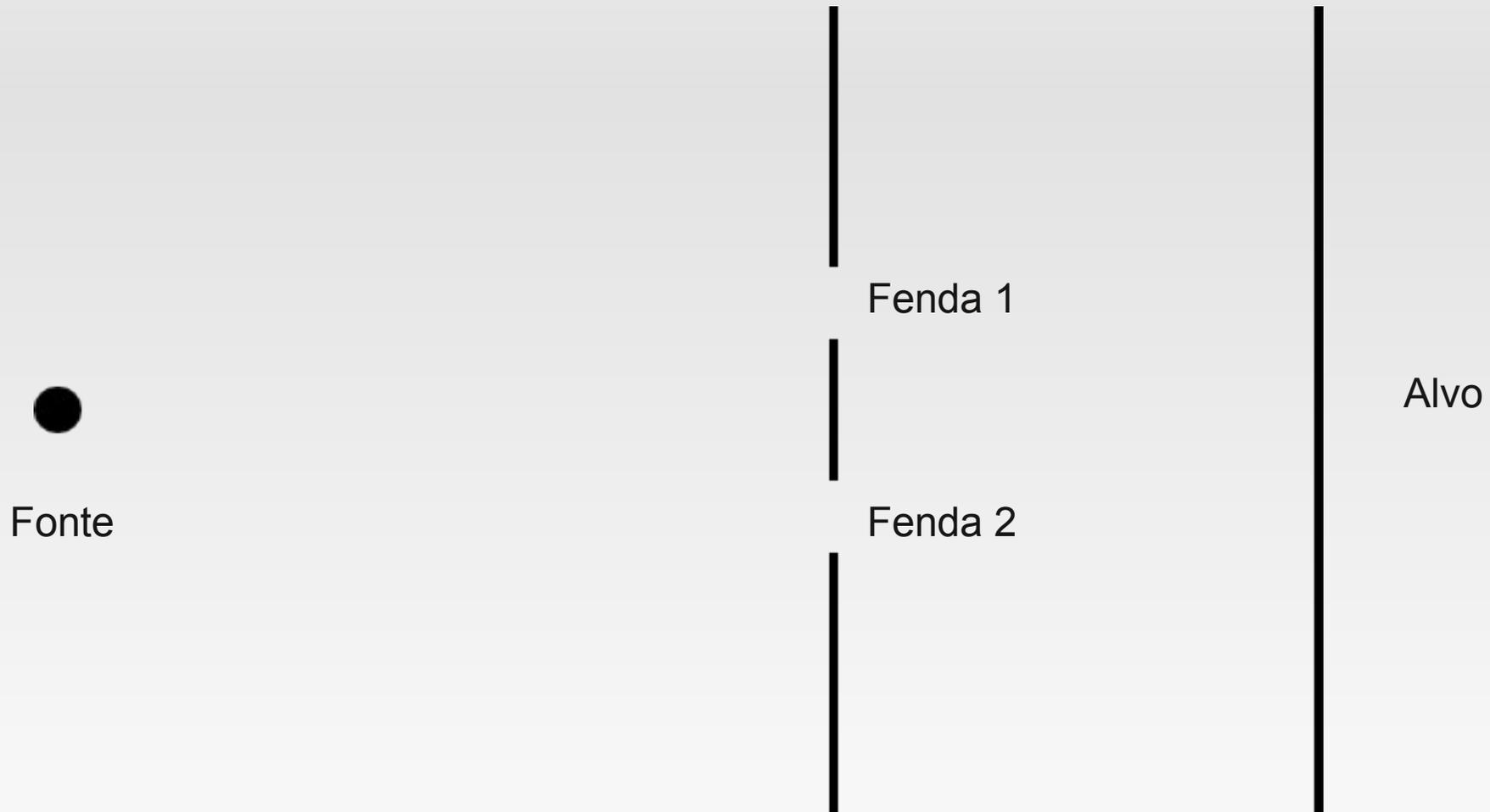
Partículas: Contáveis

- Podemos contar berlindes (1, 2, 3...)
- Não faz sentido falar em meio berlinde
- Quando dois berlindes colidem, não dão origem a um berlinde maior, nem se aniquilam

Partículas são contáveis!

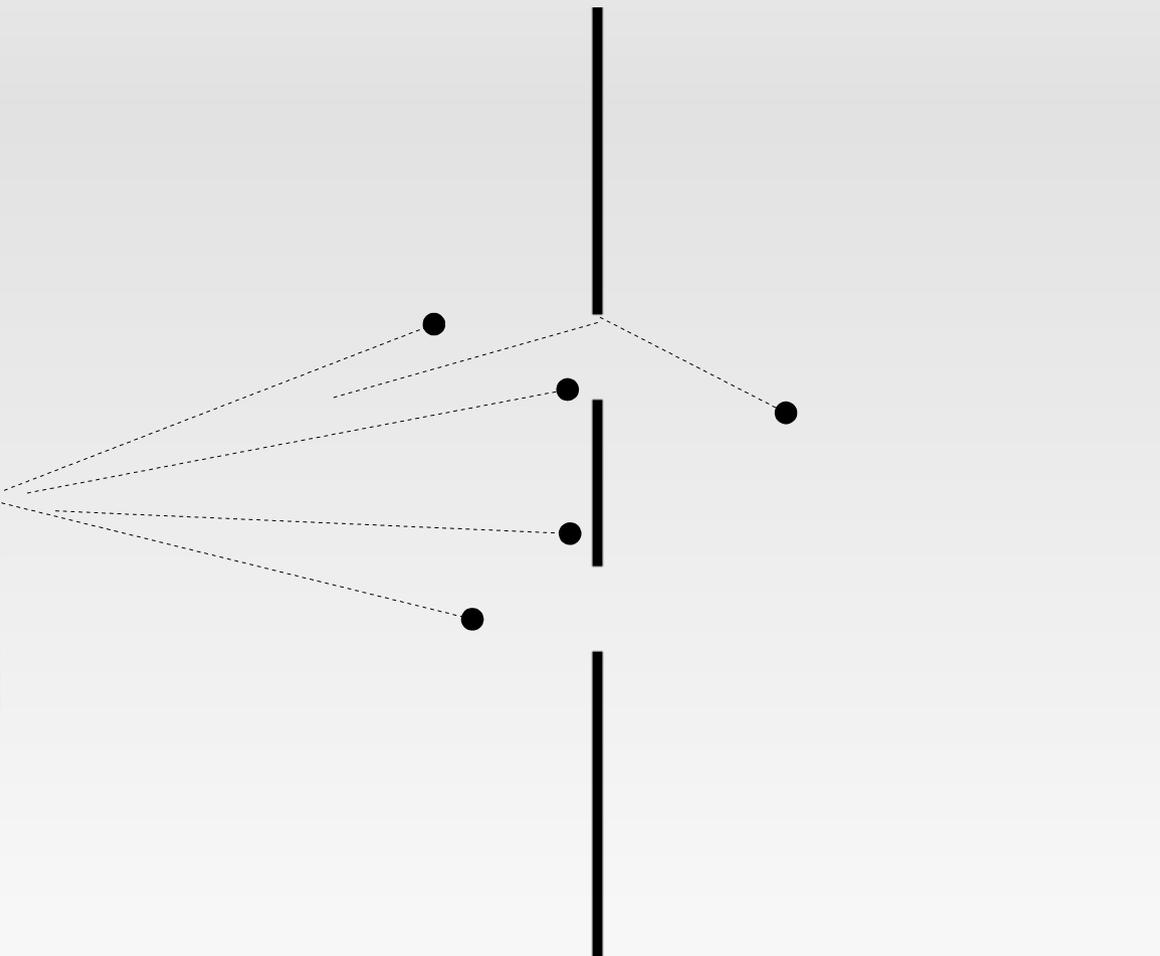
Partícula vs Onda

Experiência da Dupla Fenda



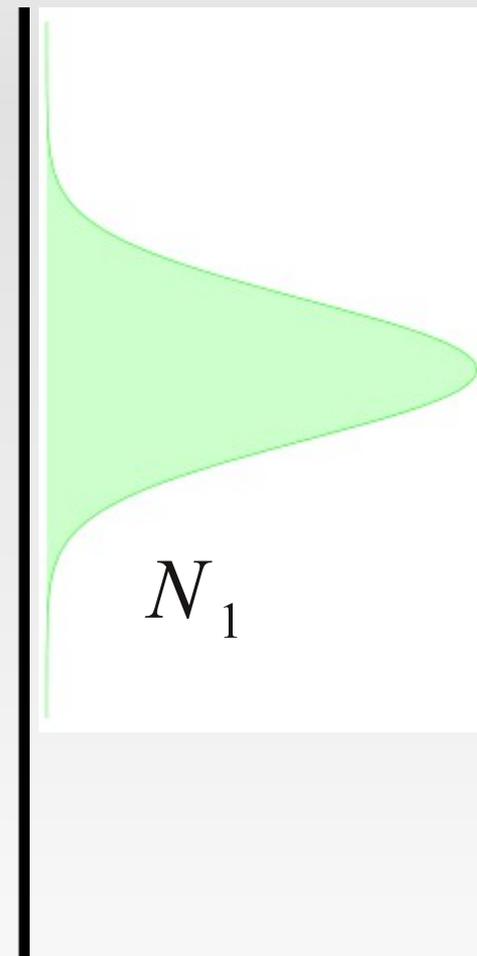
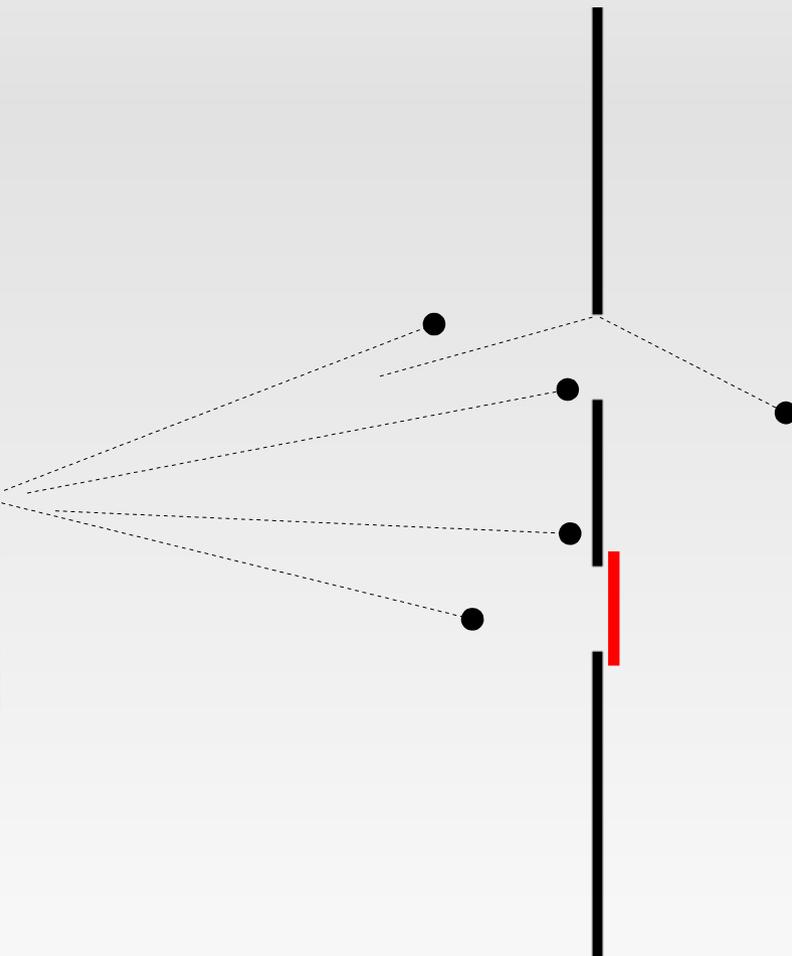
Experiência da Dupla Fenda

Com balas (partículas)



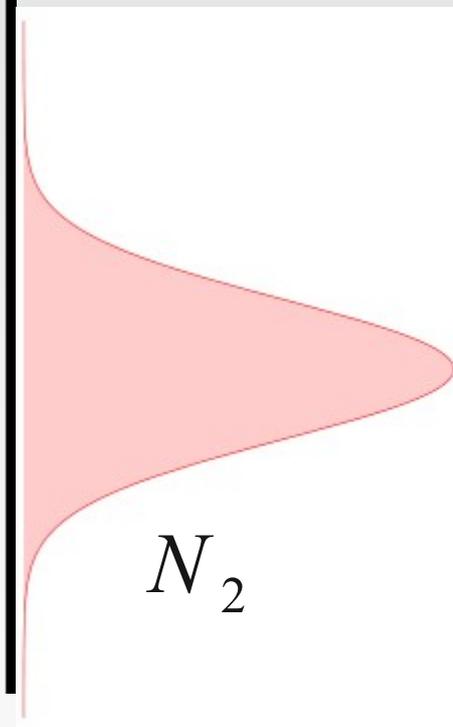
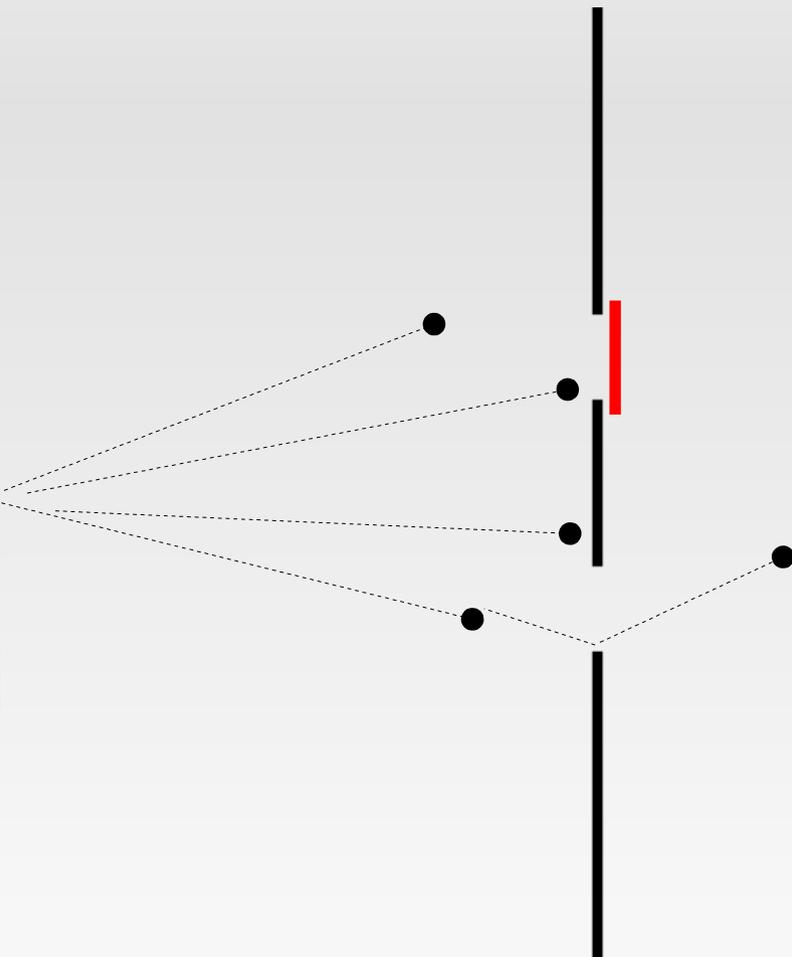
Experiência da Dupla Fenda

Com balas (partículas)



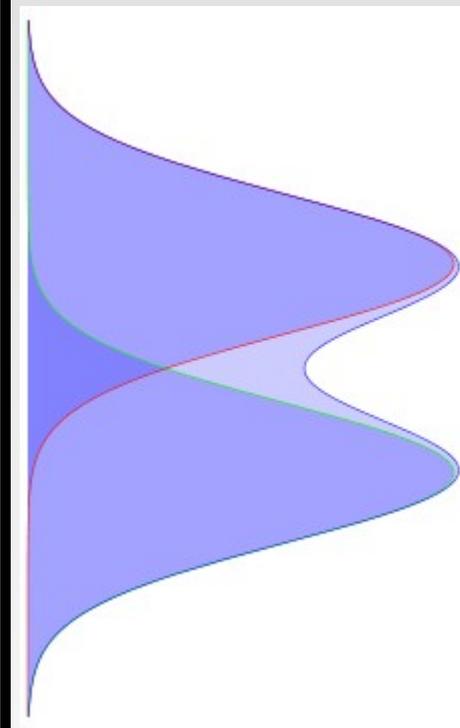
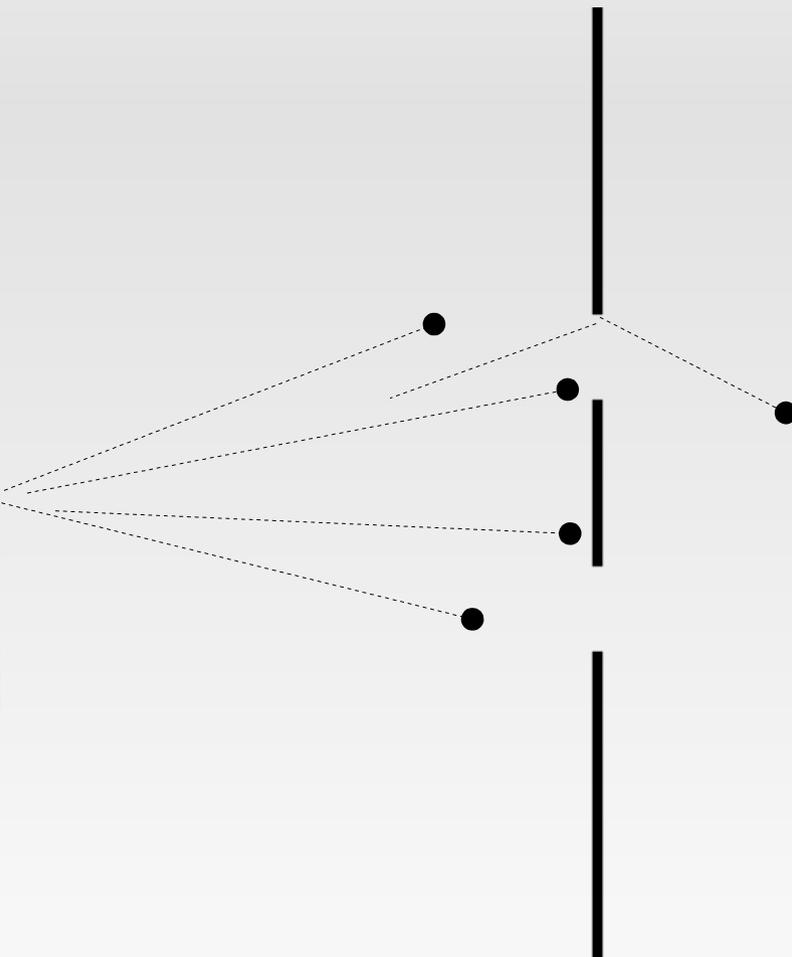
Experiência da Dupla Fenda

Com balas (partículas)



Experiência da Dupla Fenda

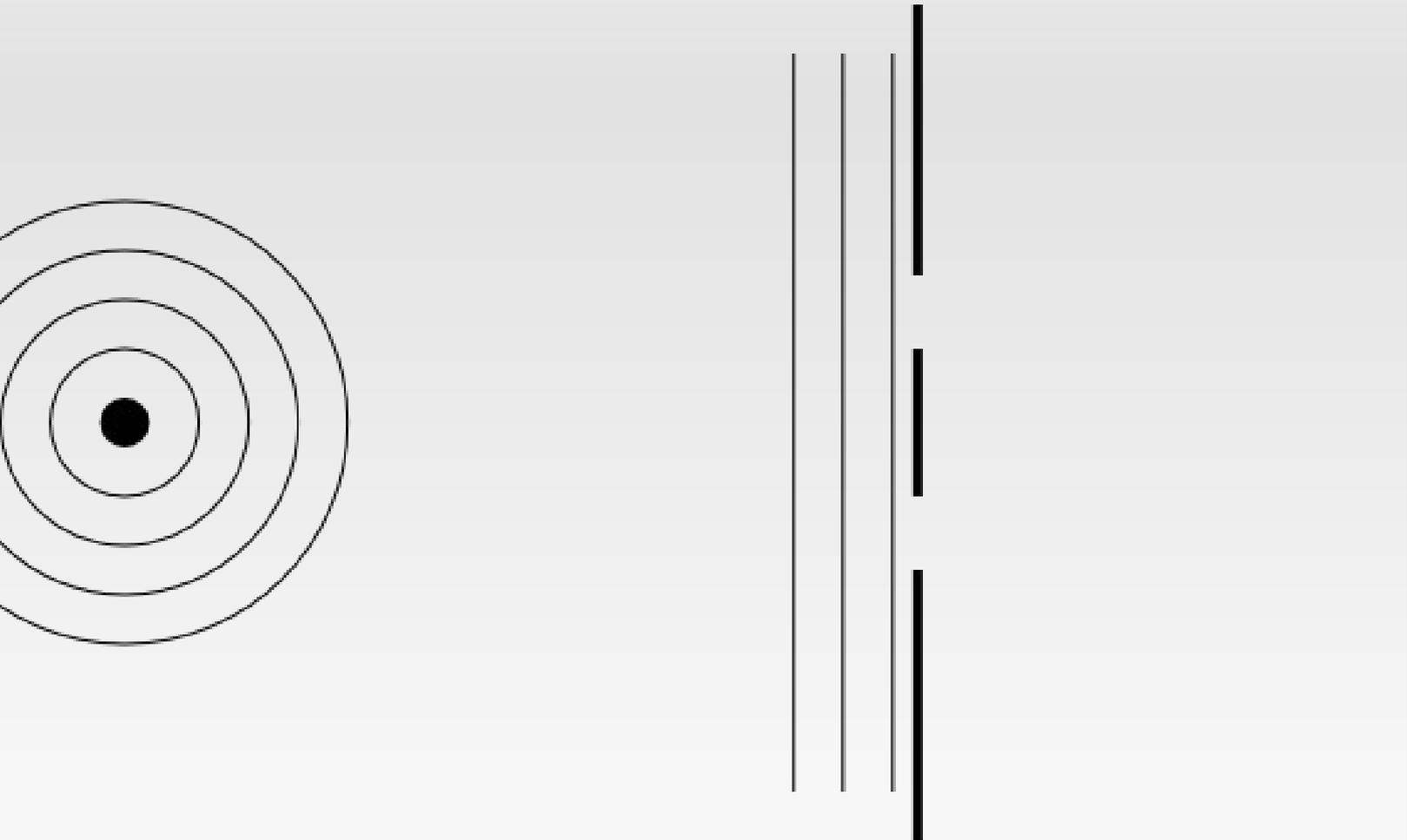
Com balas (partículas)



$$N_{1,2} = N_1 + N_2$$

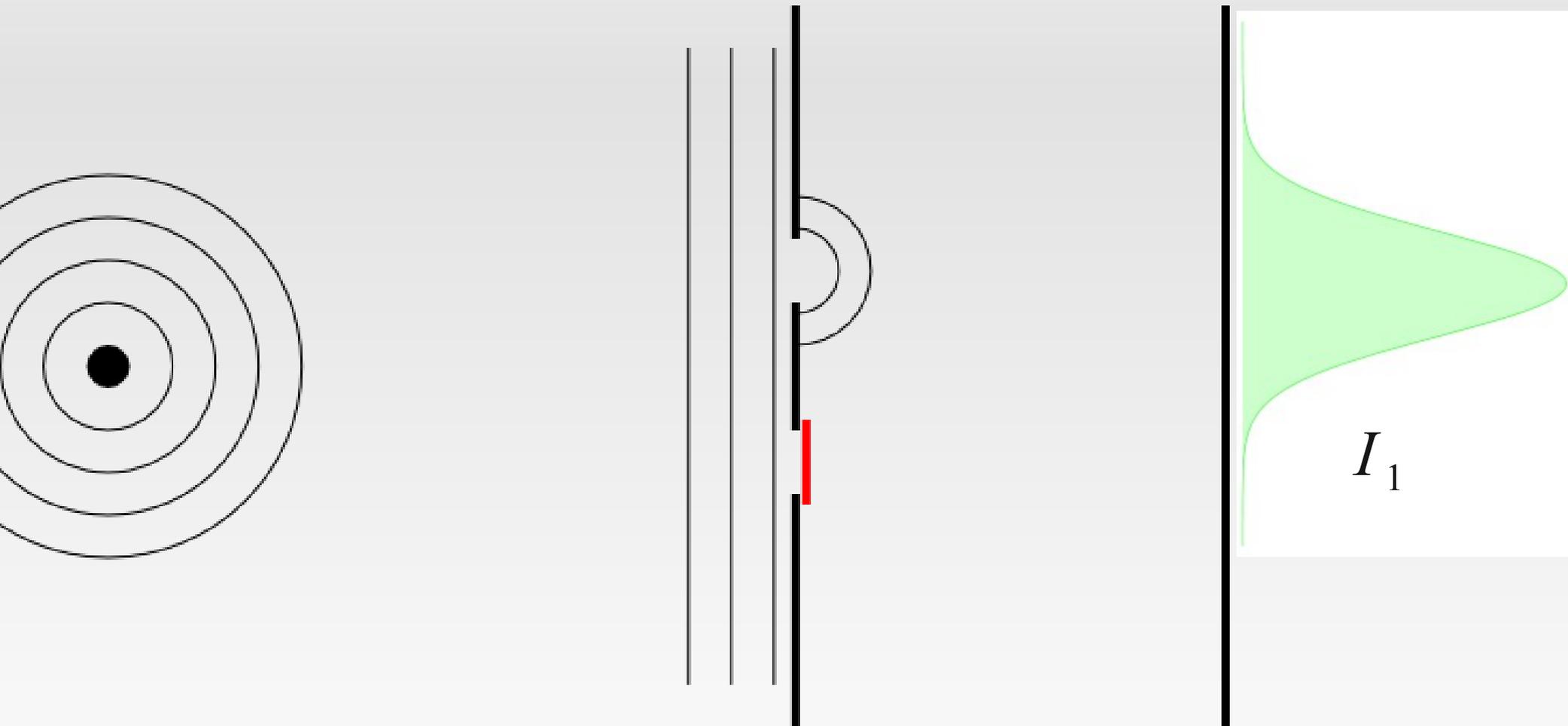
Experiência da Dupla Fenda

Com ondas



Experiência da Dupla Fenda

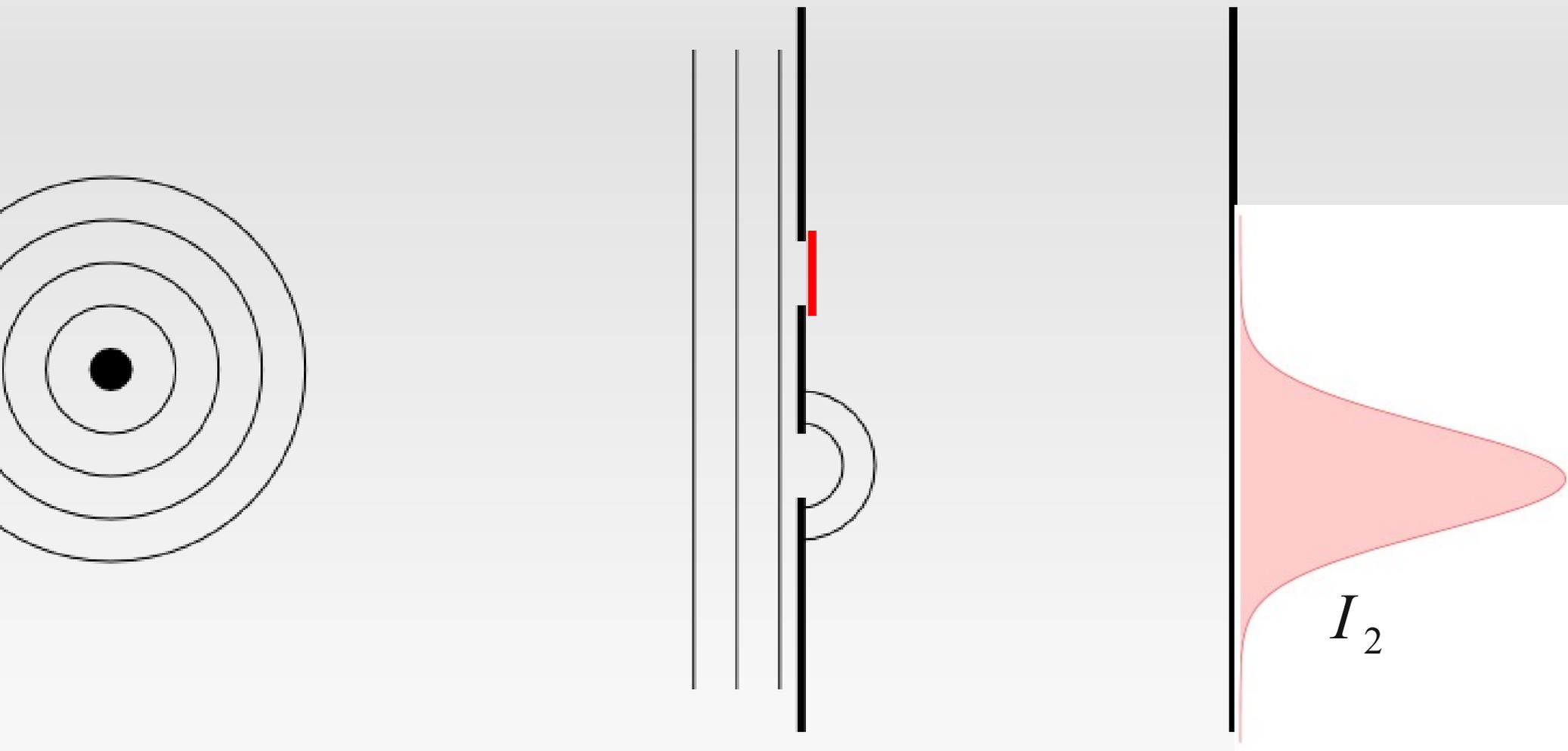
Com ondas



Intensidade é proporcional a Altura²

Experiência da Dupla Fenda

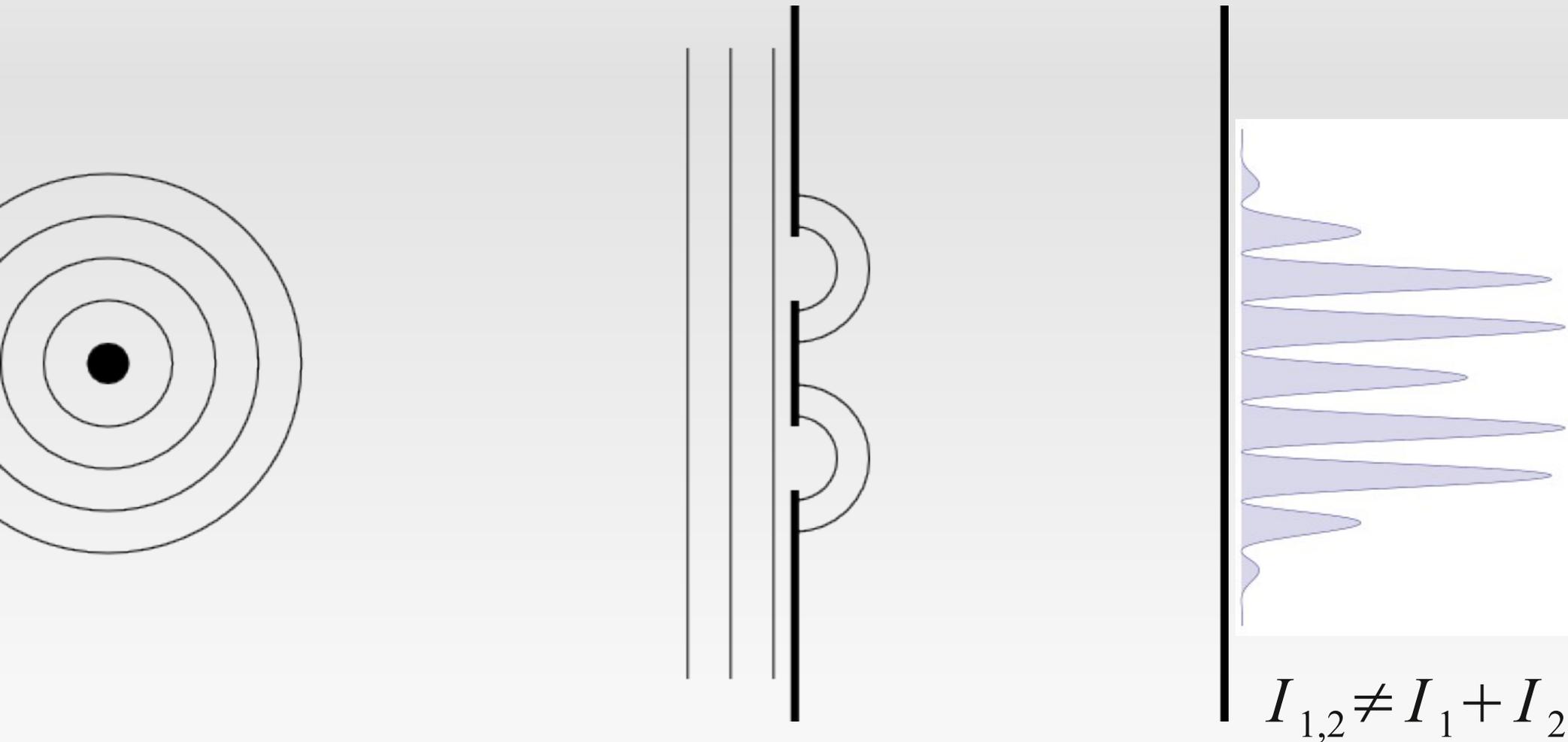
Com ondas



Intensidade é proporcional a Altura²

Experiência da Dupla Fenda

Com ondas

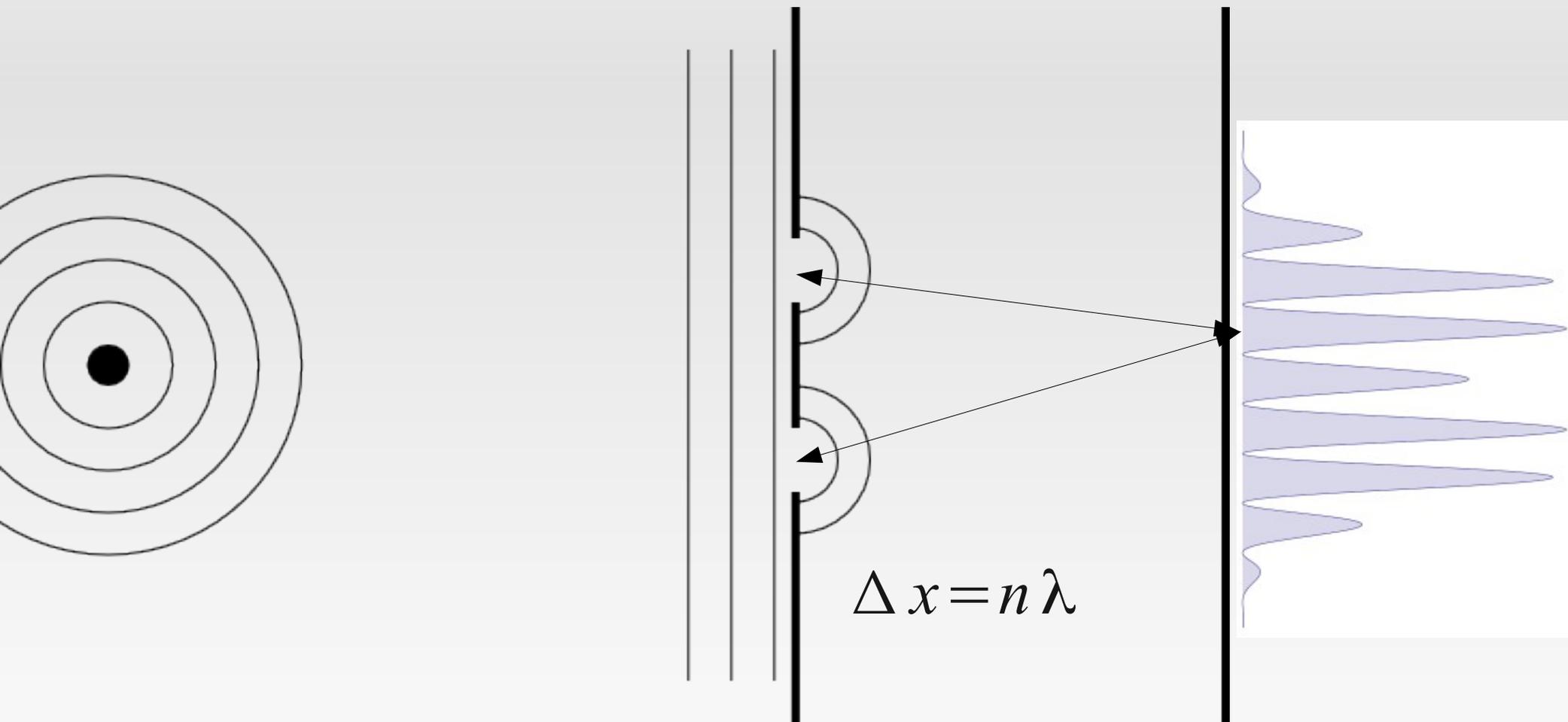


Intensidade é proporcional a Altura²

$$I_{1,2} \neq I_1 + I_2$$

Experiência da Dupla Fenda

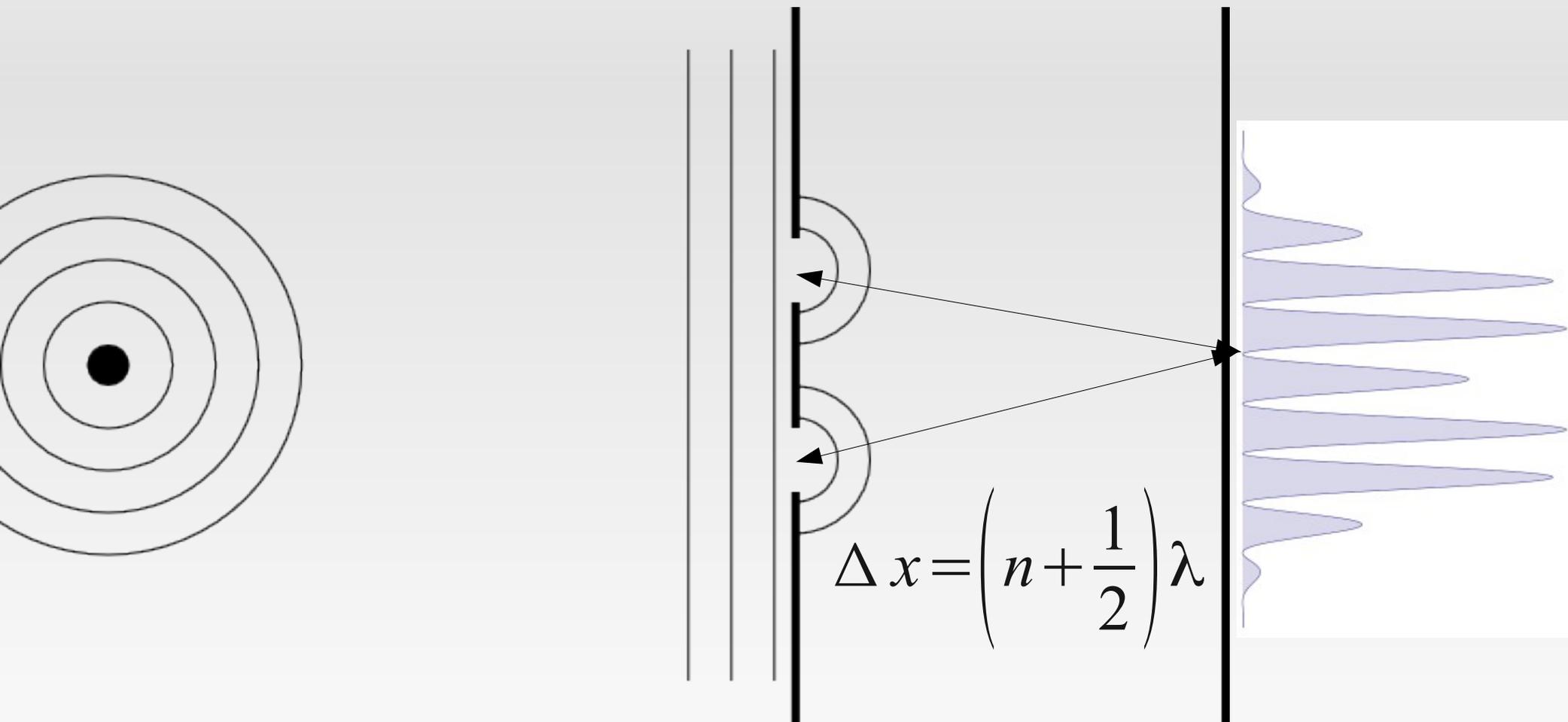
Com ondas



Interferência construtiva

Experiência da Dupla Fenda

Com ondas



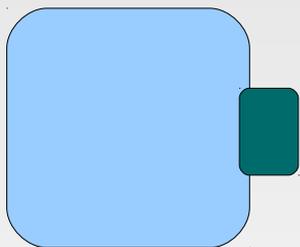
Interferência destrutiva

O que acontece se fizermos a experiência da dupla fenda com electrões?

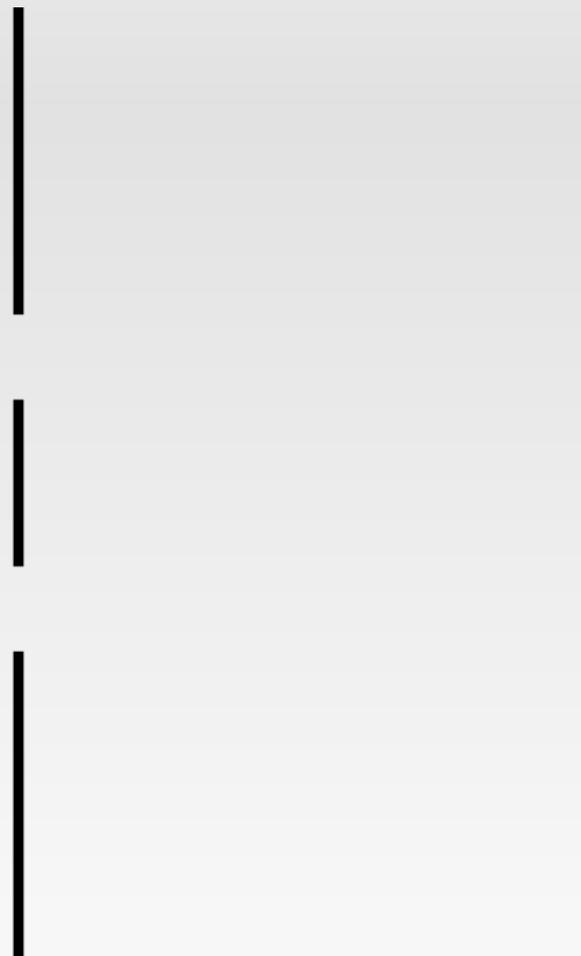
Experiência da Dupla Fenda

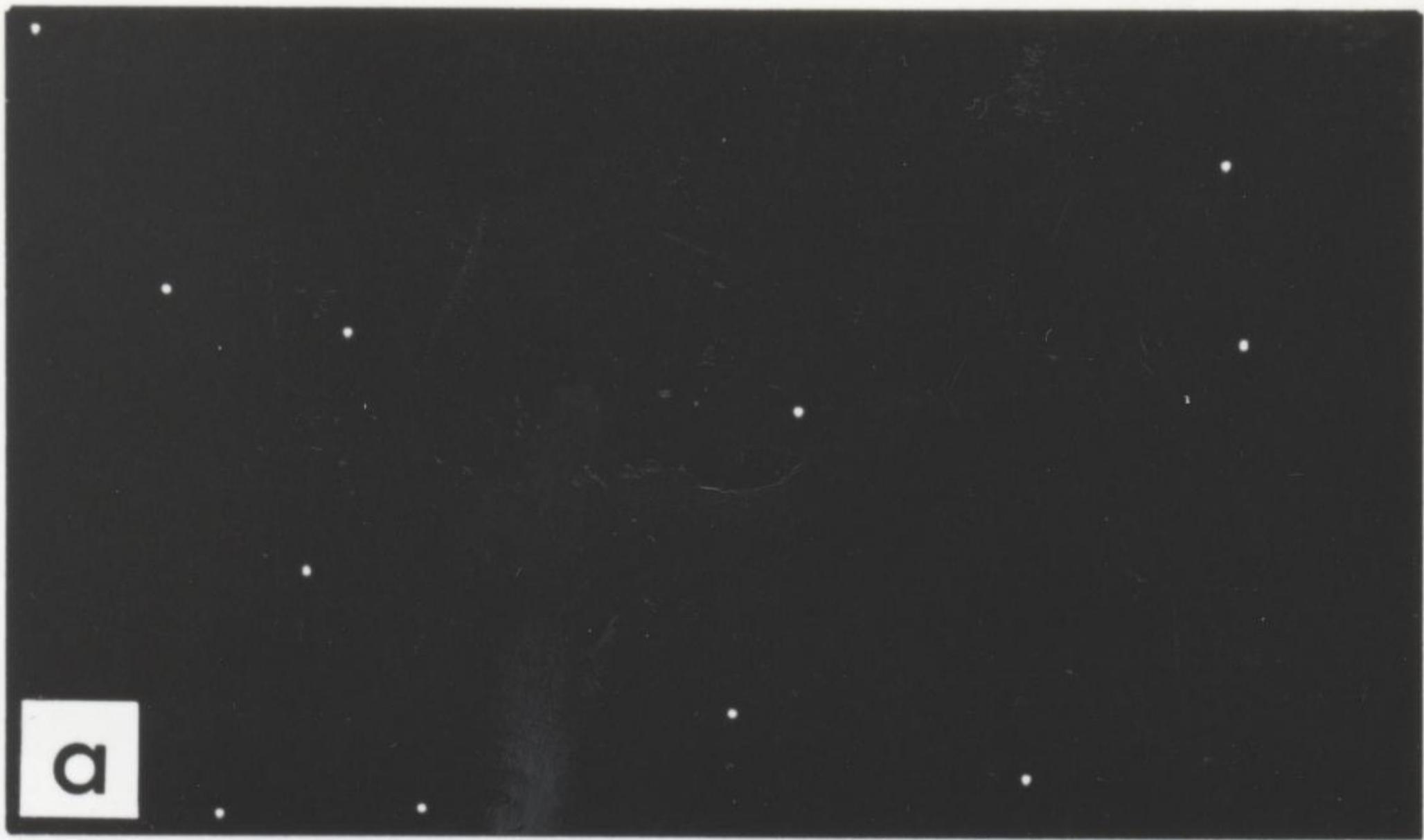
Com electrões

Um de cada vez!

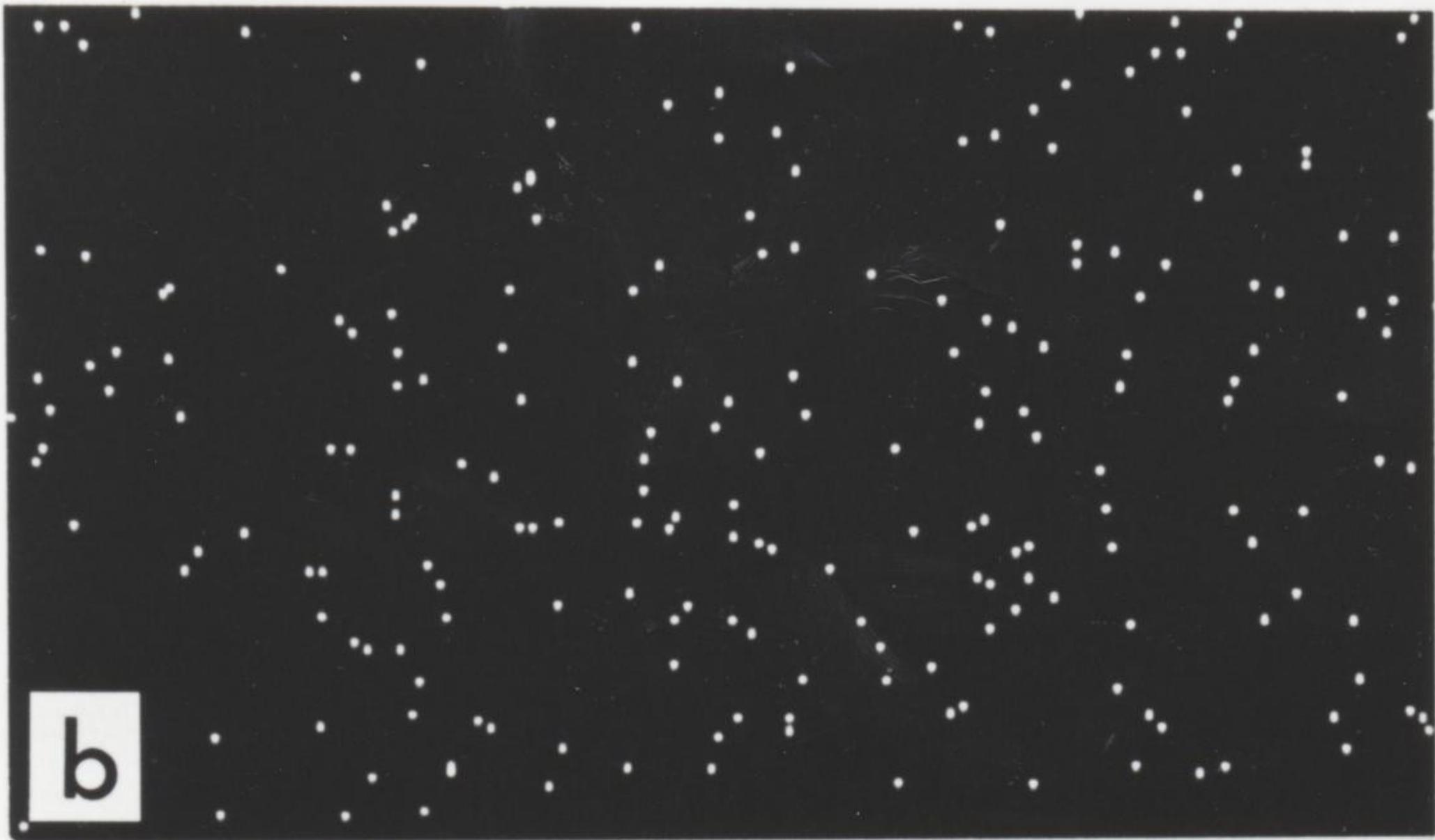


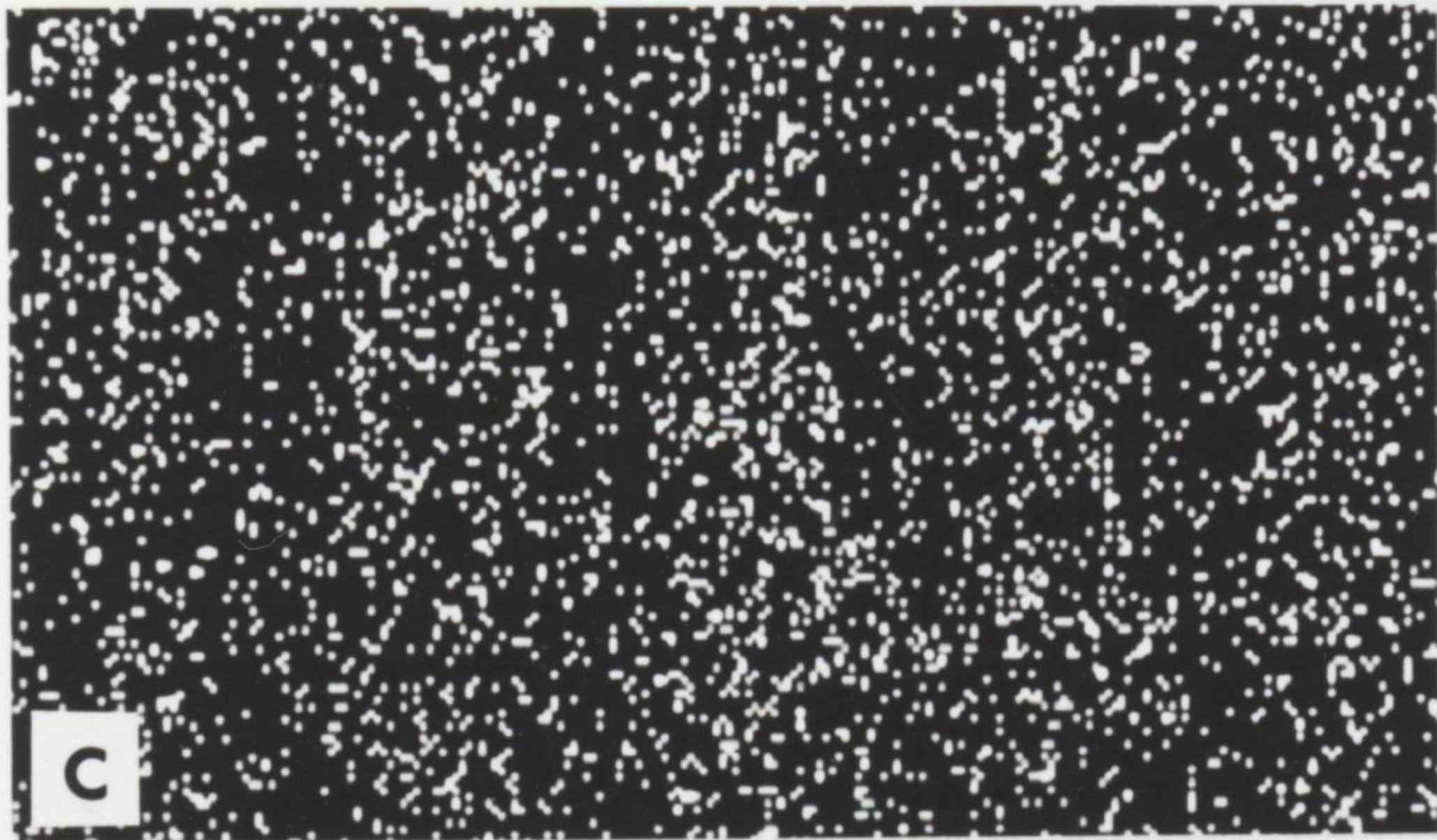
Fonte de electrões

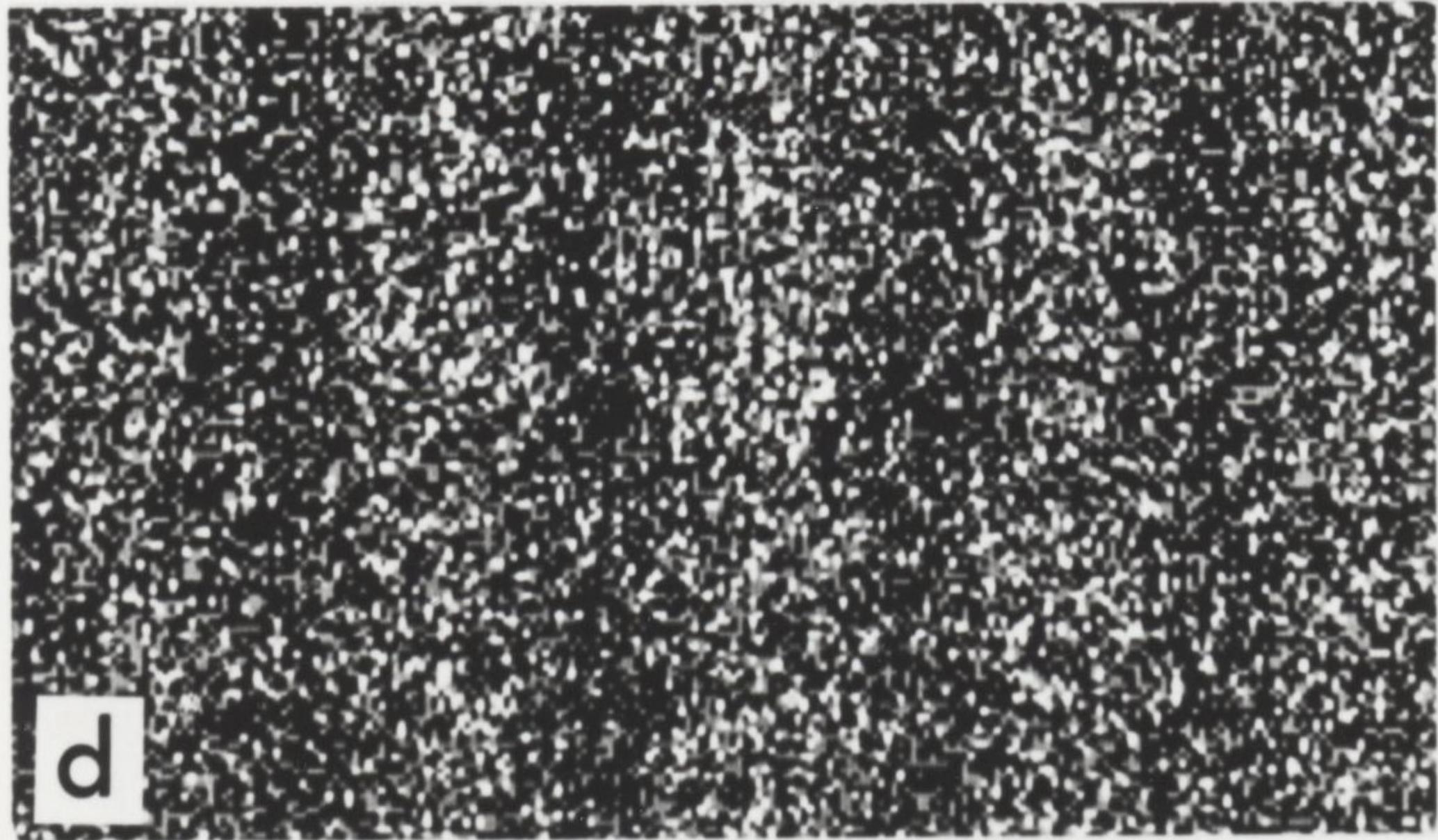


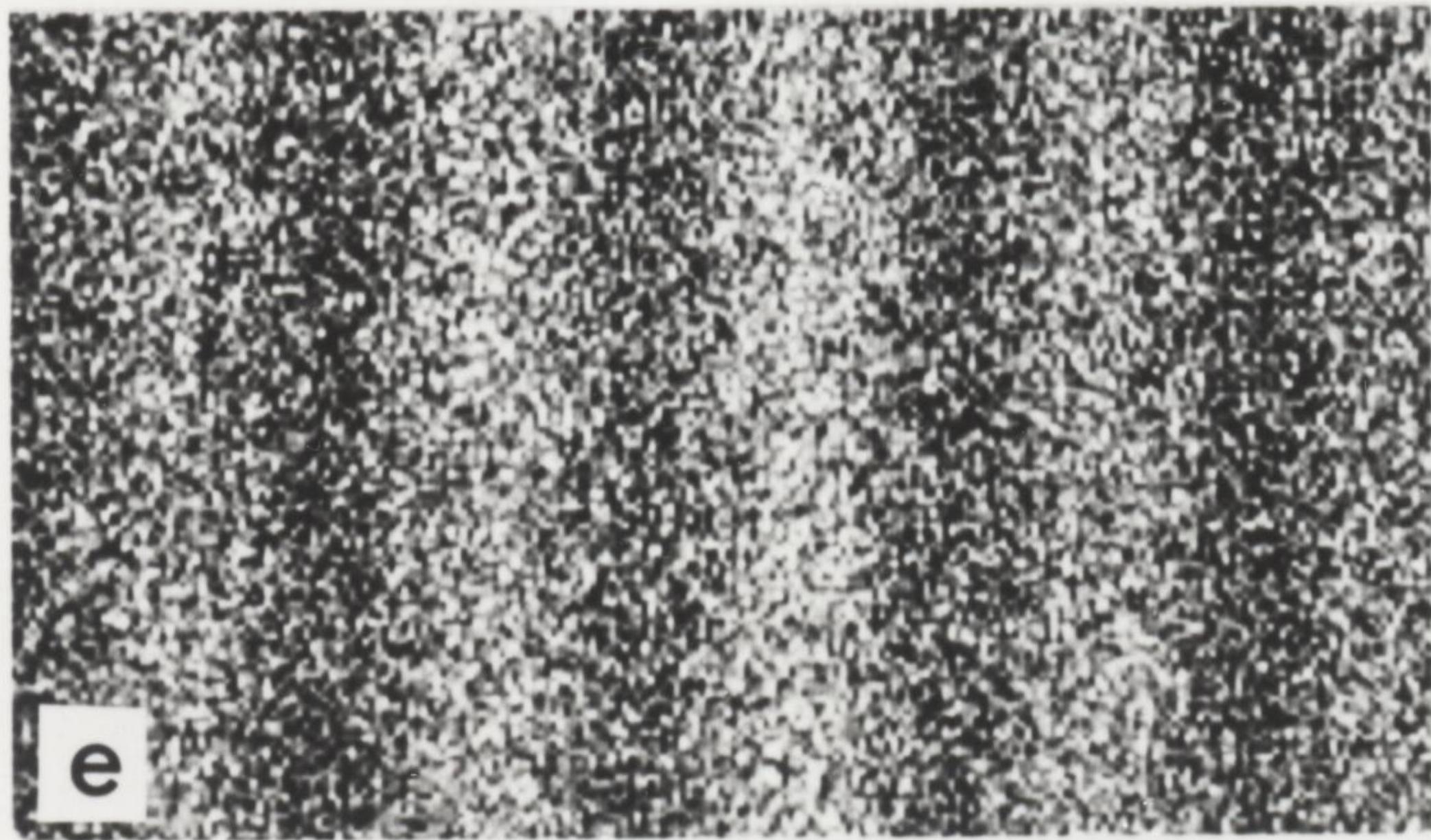


a









Partícula vs Onda

- Electrões chegam em pacotes individuais – Partículas
- Temos um padrão de interferência – Ondas
- Onde o próximo electrão é detectado é independente dos electrões anteriores

Partícula vs Onda

- Electrão interfere consigo próprio
- Impossível dizer por qual fenda passou
- Modificação: Introduzir detectores nas fendas para detectar por qual o electrão passou
 - Padrão de interferência desaparece!
 - Electrão passa só pela fenda onde foi detectado

Colapso

Partícula vs Onda

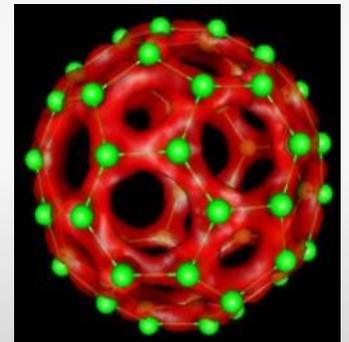
Más notícias:

- **Electrões** não se comportam como **partículas** nem como **ondas**!

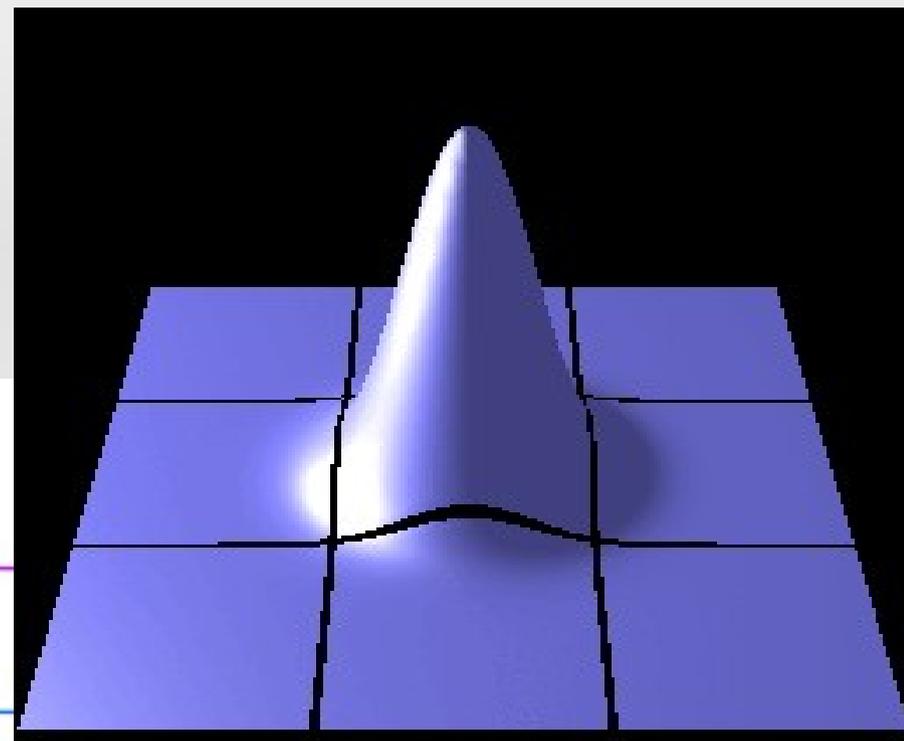
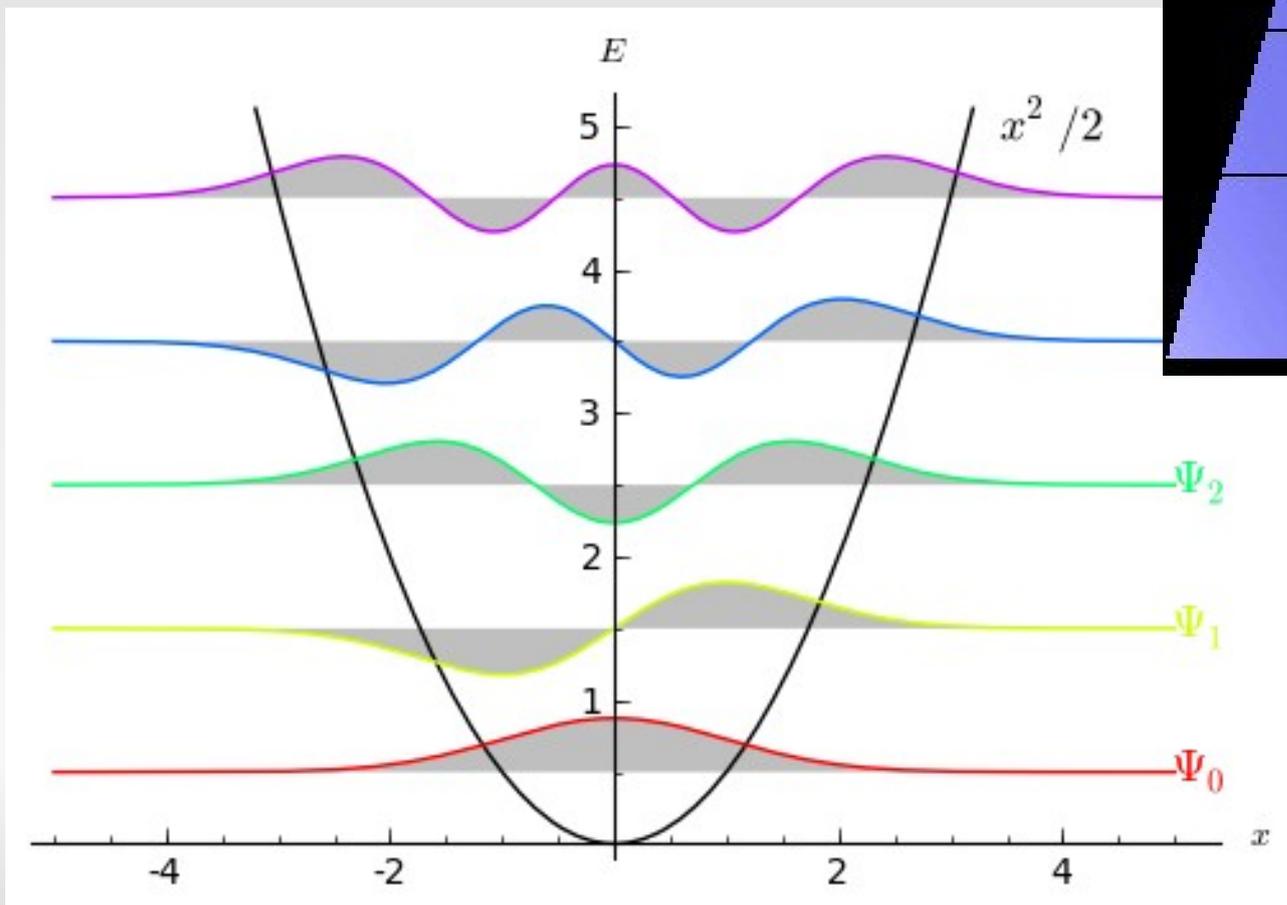
Dualidade Onda - Partícula

Boas notícias:

- **Electrões** comportam-se como **fotões**, **neutrões**, **buckyballs** (C_{60}), ...



As Regras do Jogo



As Regras do Jogo

- Dualidade Onda-Partícula
- O que ondula no electrão??

$\psi(x)$, Função de Onda

- Função de onda evolui de acordo com **Equação de Schrödinger**

$|\psi(x)|^2 =$ Probabilidade de electrão ser detectado na posição x

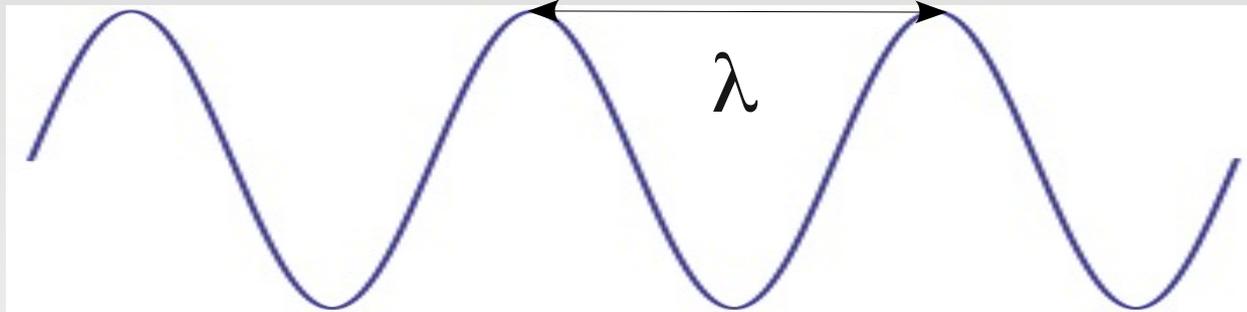
As Regras do Jogo

- Em Mecânica Quântica só podemos calcular a probabilidade de obter um certo resultado numa medição
- Desistimos de tentar prever o que acontece entre medições
(e achamos que tal é impossível...)
- Quando fazemos uma medição, o electrão fica no estado em que obtemos na medição

Colapso da Função de Onda

As Regras do Jogo

- Qual é o comprimento de onda de um electrão?



- Em 1924, Louis de Broglie propõe:

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

Momento linear

$$p = m v$$

- Em 1927, Davisson e Germer confirmam: electrões a incidir em níquel cristalino



As Regras do Jogo

- Electrão tem associada onda $\psi(x)$
- A frequência e comprimento de onda são dados por:

$$E = h \nu$$

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

Relação de Planck-Einstein

Relação de de Broglie

Princípio da Incerteza

- Facto matemático:
 - Funções (*porreiras*) podem ser escritas como uma soma de senos e cossenos
- Quanto mais localizada uma função no espaço for, mais senos e cossenos temos de somar!

Princípio de Incerteza de Fourier

$$\Delta x \cdot \Delta k \geq \frac{1}{2}$$

$$\left(k = \frac{2\pi}{\lambda} \right)$$

Princípio da Incerteza

- Recordando a relação de de Broglie:

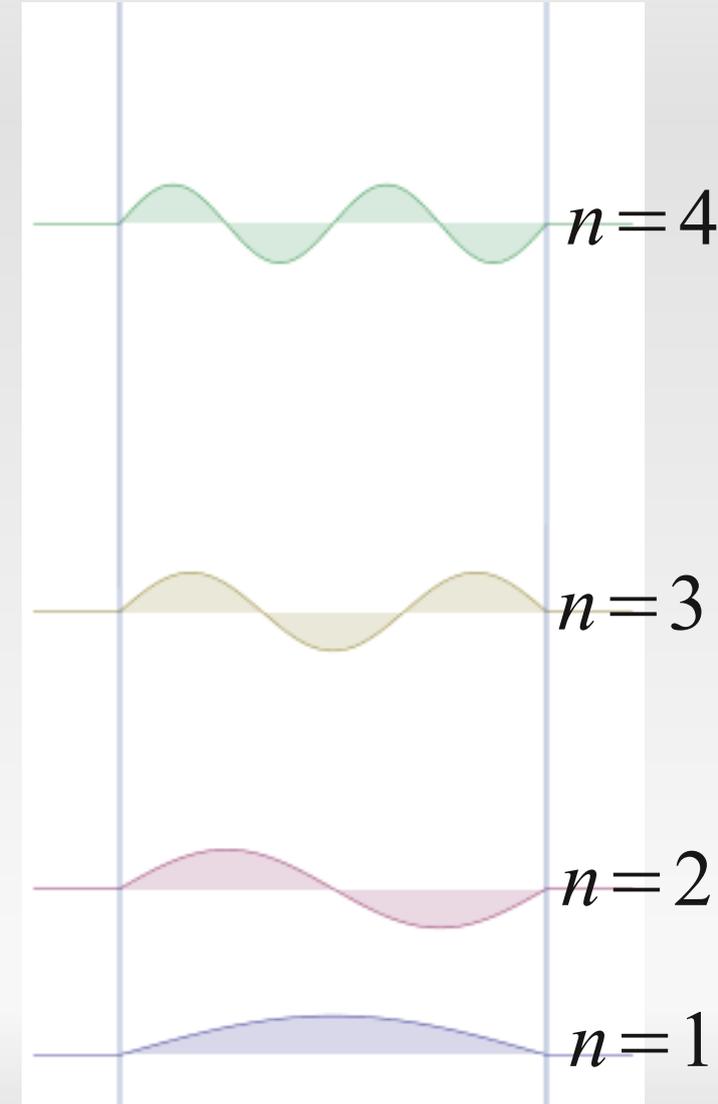
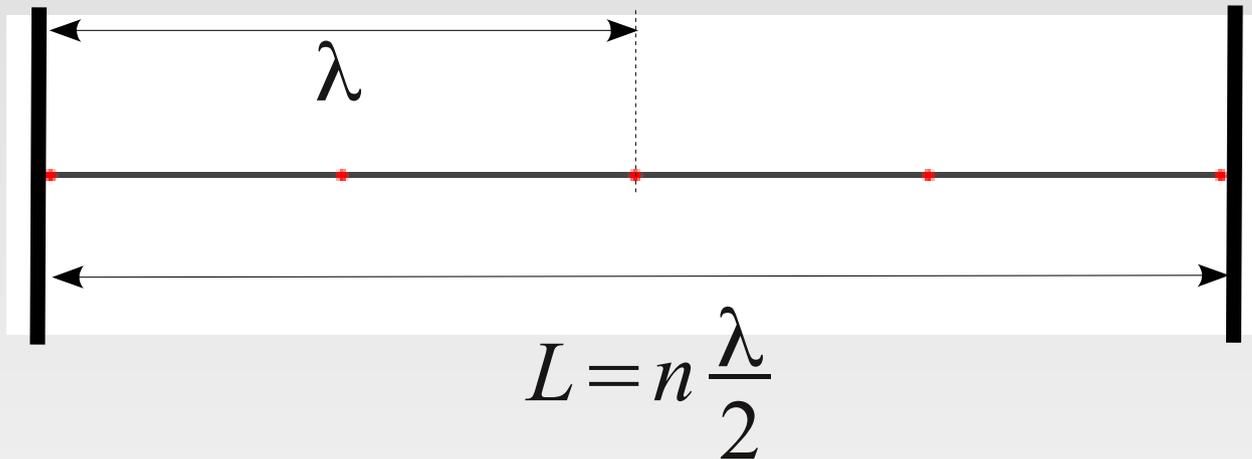
Princípio de Incerteza de Heisenberg

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{4\pi}$$

- Limite fundamental às medições que podemos fazer
- Melhorar os aparelhos de medida não resolve isto!

Partícula numa caixa

Ondas estacionárias:

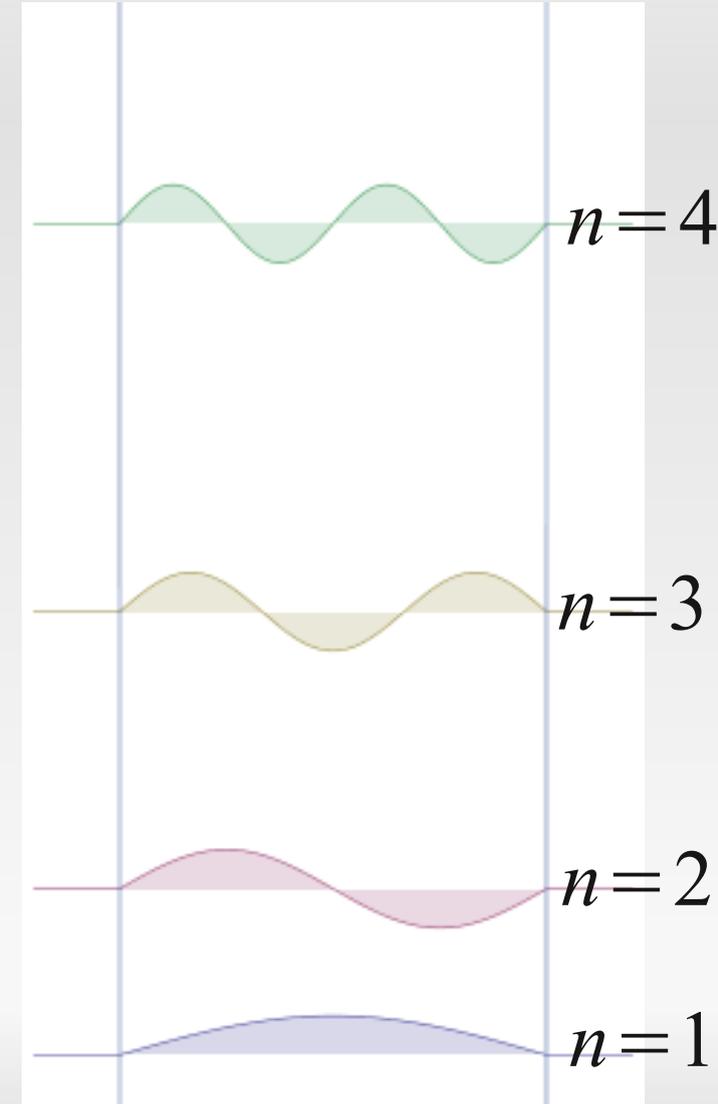
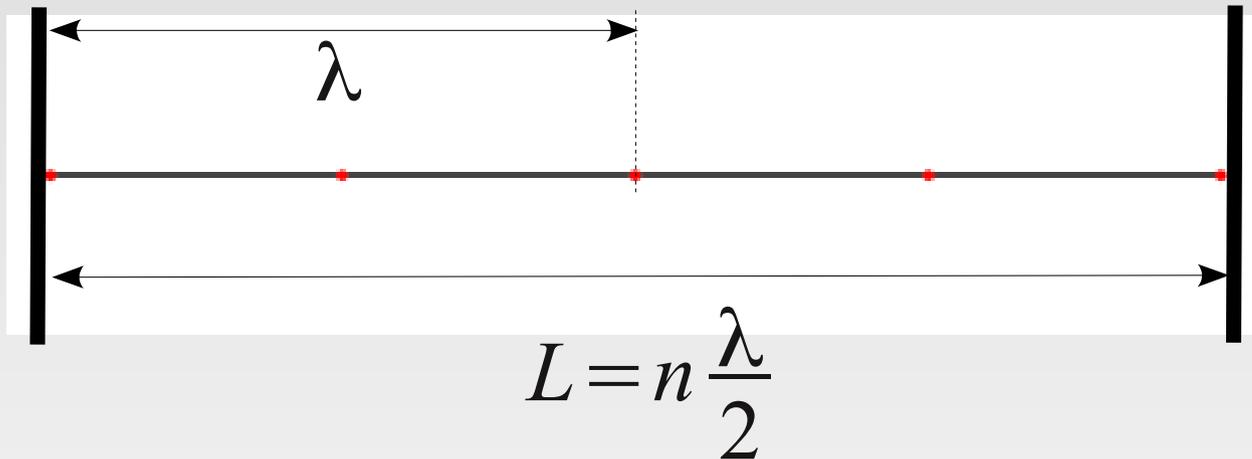


Quantificação de energia

$$E_n = \frac{h^2}{8mL^2} n^2, \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L} n x\right)$$

Partícula numa caixa

Ondas estacionárias:

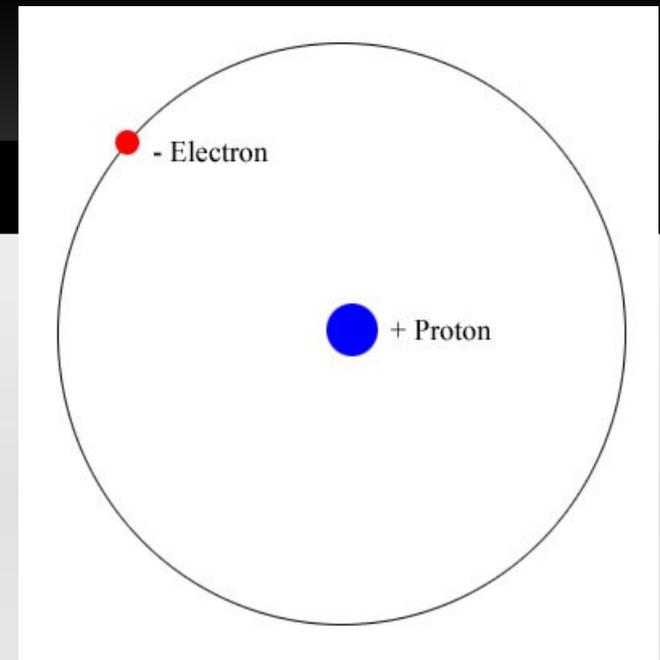


Quantificação de energia

$$E_n = \frac{h^2}{8mL^2} n^2, \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L} n x\right)$$

Número quântico

Átomo de hidrogénio



- Movimento circular

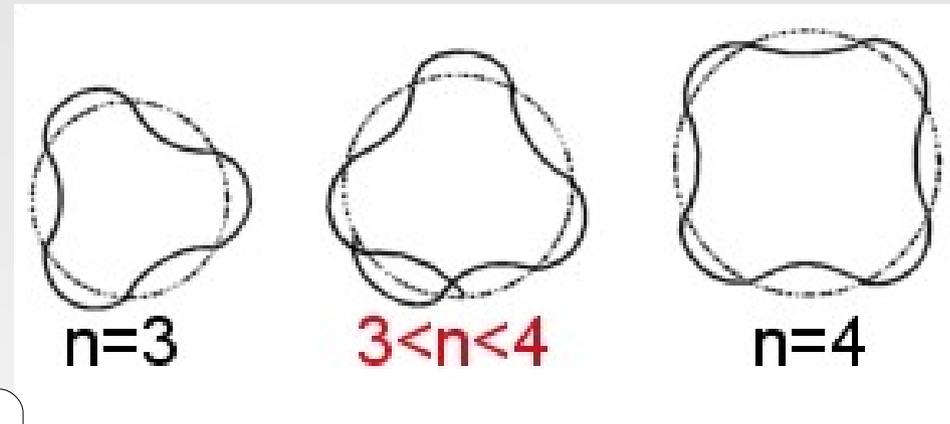
$$F_{centrífta} = F_{elétrica} \Rightarrow m \frac{v^2}{R} = k \frac{e^2}{R^2}$$

- Onda estacionária

$$2\pi R = n\lambda$$

- Relação de de Broglie

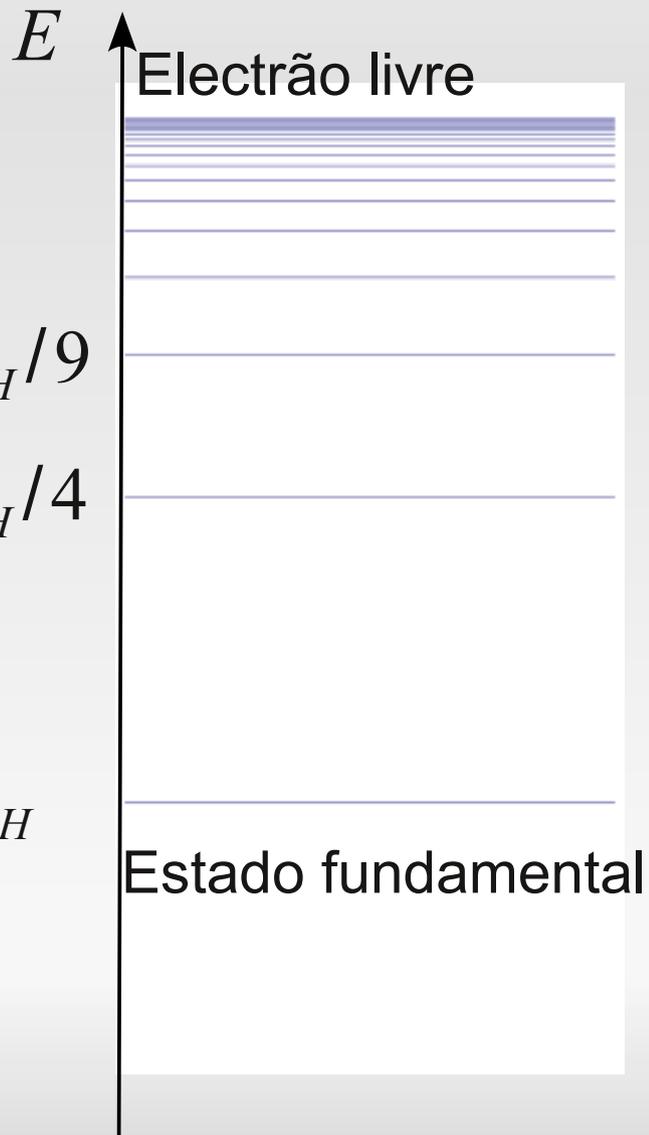
$$mv = h/\lambda$$



Quantificação de Energia

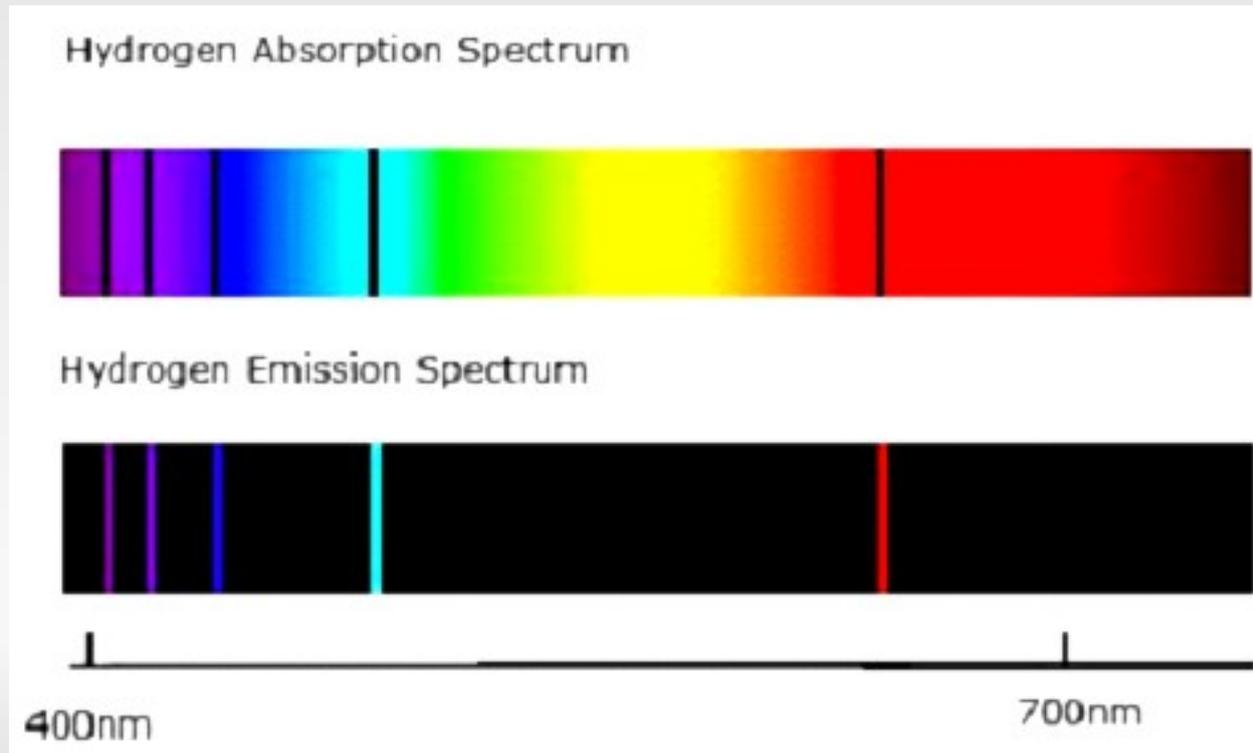
$$E_n = \frac{1}{2} m v^2 - k \frac{e^2}{R} = - \frac{R_H}{n^2}, \quad R_H = \frac{2\pi^2 k^2 e^4 m}{h^2} \approx 13,6 eV$$

Átomo de hidrogénio



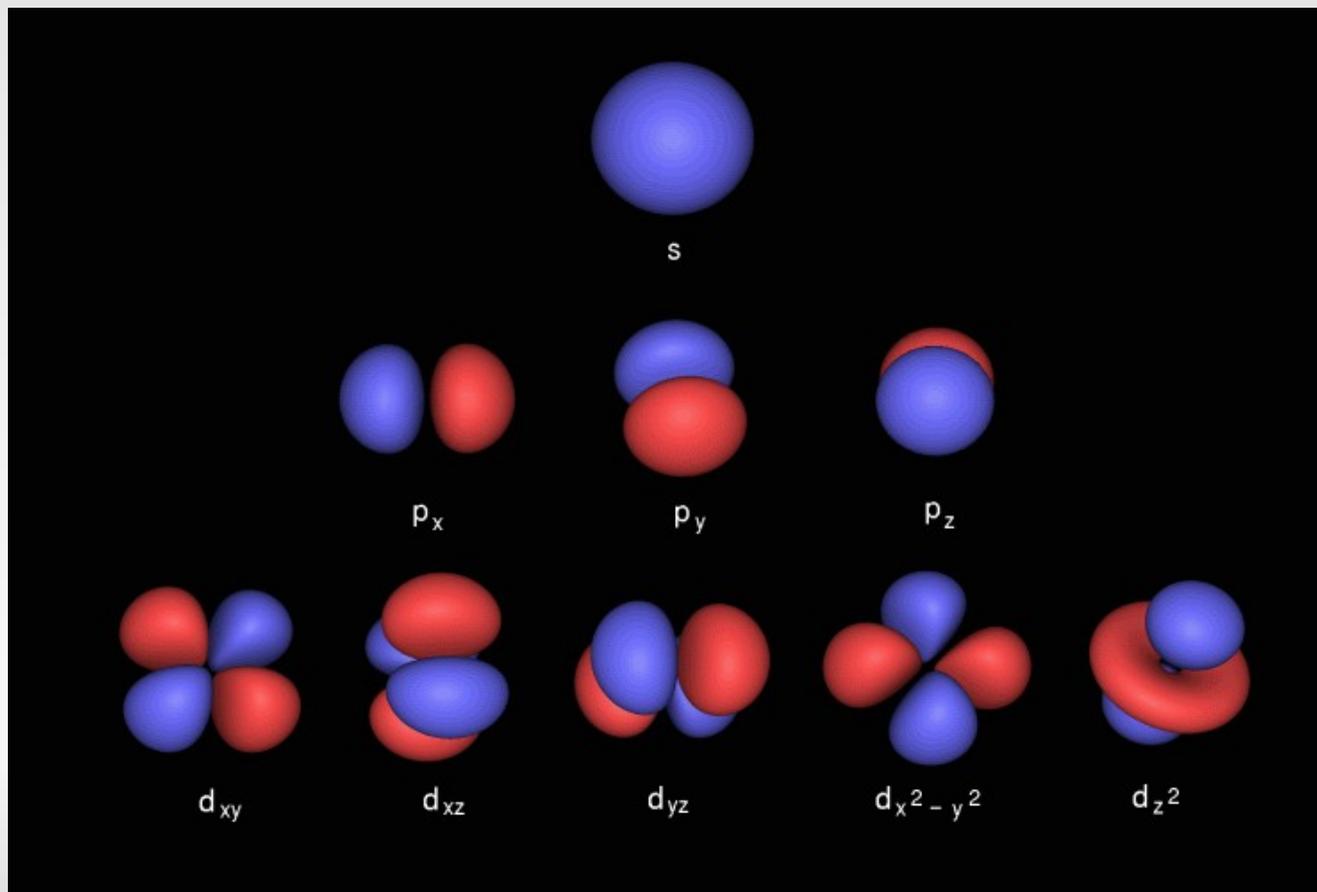
Linhas espectrais:

$$h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \Delta E = R_H \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$



Átomo de hidrogênio

- Solução completa → Equação de Schrödinger
- Números quânticos: n, l, m, s $\psi(\vec{r}) = R_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \phi)$



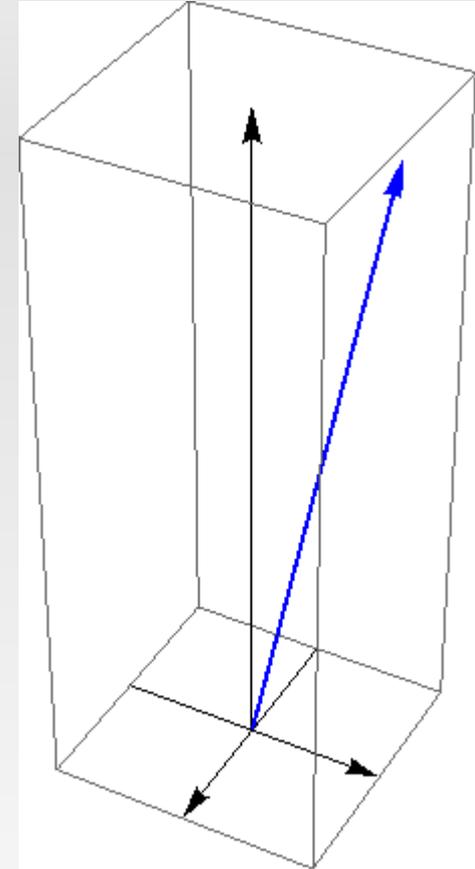
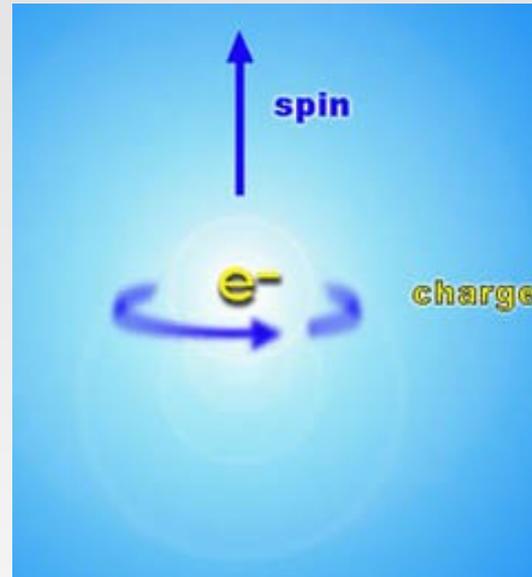
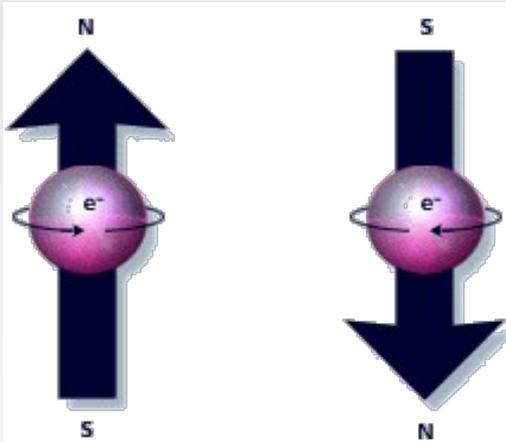
$l=0$

$l=1$

$l=2$

Spin

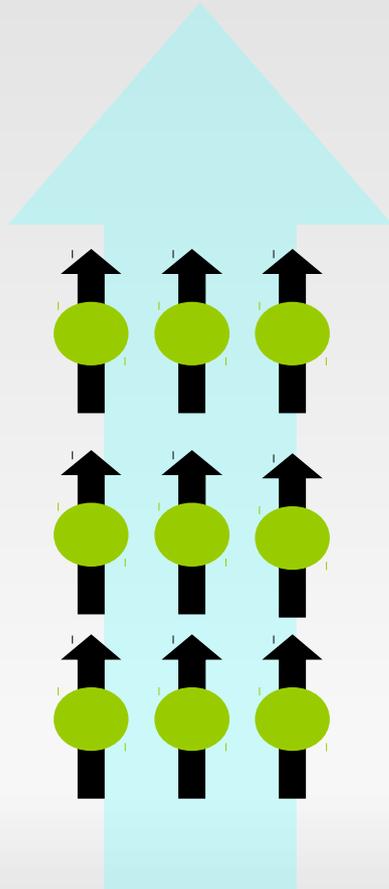
- Número quântico s ??
- Spin do electrão \rightarrow Momento angular intrínseco (“rotação”)



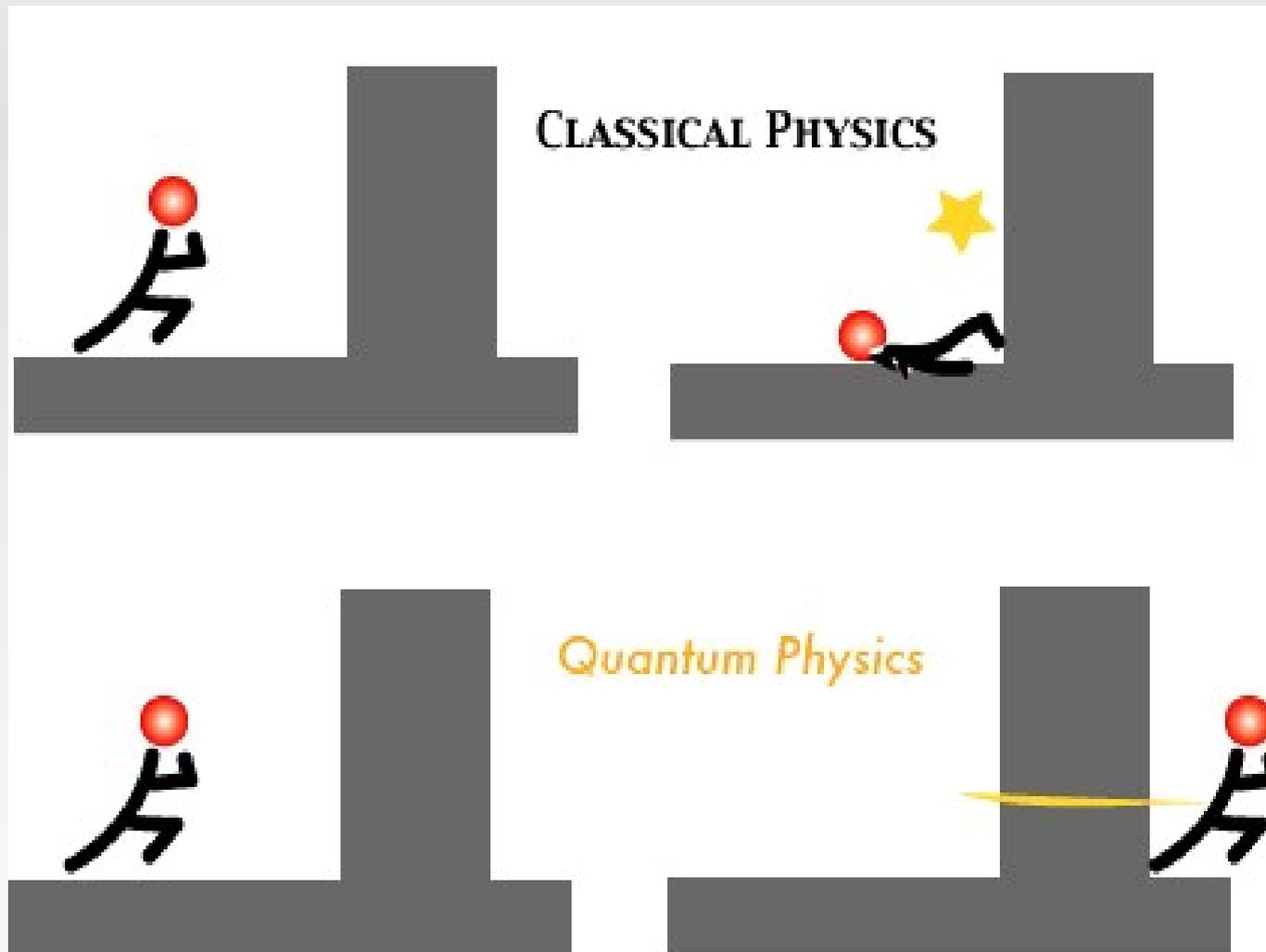
- Cada electrão actua como um pequeno íman!

Spin

- Alinhamento de spins electrónicos → Ferromagnetismo!



Efeito de túnel

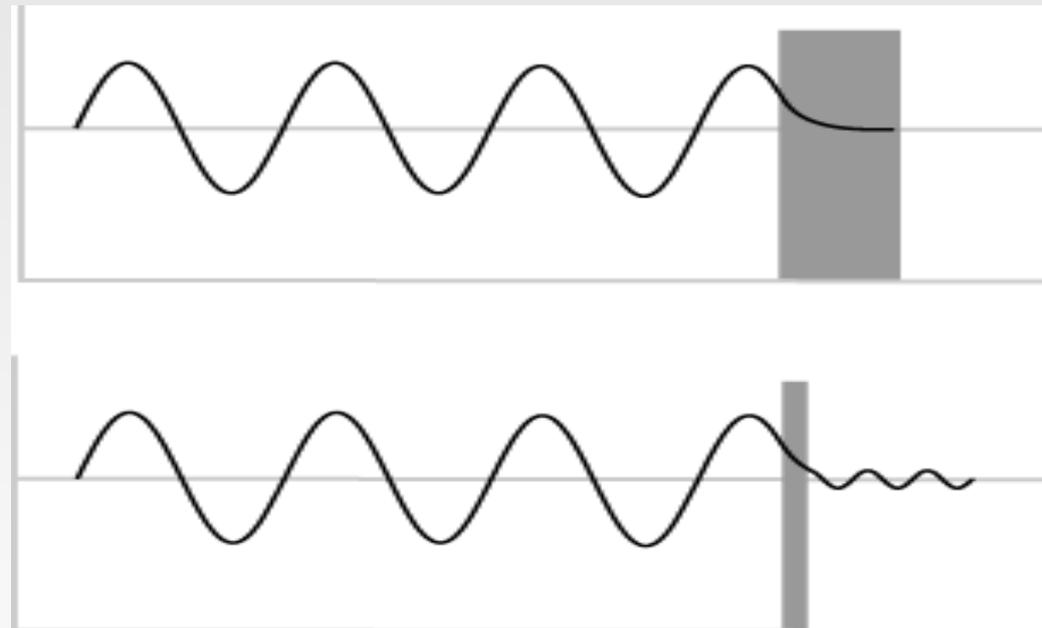


Efeito de túnel

- Partícula clássica: $E = E_c + E_p$, $E_c \geq 0 \Rightarrow E \geq E_p$
- Ondas: Conseguem atravessar barreiras (de material diferente)
- Mecânica quântica:

$E > E_p$ Função de onda oscila

$E < E_p$ Função de onda decai



Há uma probabilidade de partícula atravessar barreira!

Efeitos quânticos no dia-a-dia?

- Constante de Planck é muito pequena!

$$h = 6,6 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

- Comprimento de onda de uma pessoa:
 - 1 m/s
 - 70 kg

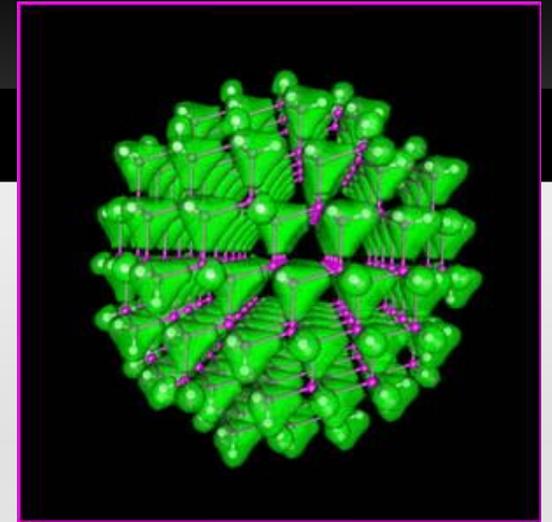
$$\lambda = \frac{h}{m v} = \frac{6,6 \times 10^{-34}}{70 \times 1} \sim 10^{-35} \text{ m}$$

Tecnologia Quântica

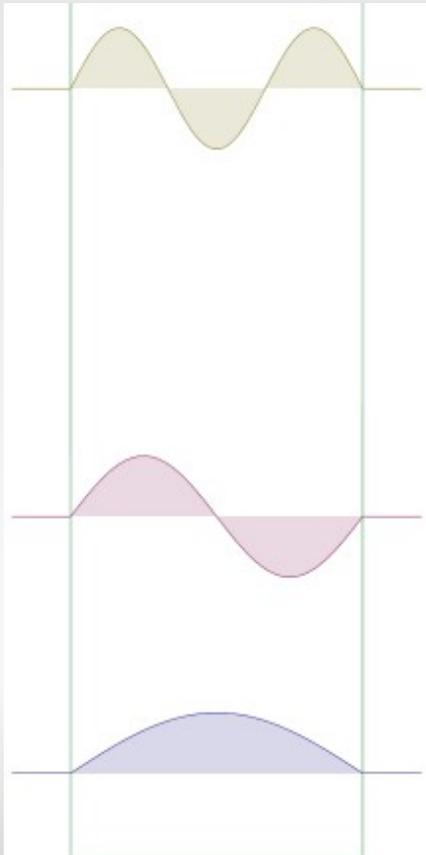
- Quantum dots
- Laser
- Microscópio electrónico de varrimento
- Microscópio de efeito de túnel
- Metais, Isoladores & Semicondutores
- Supercondutividade
- Computação quântica

Quantum dots

Estruturas fabricadas com algumas centenas - milhares de átomos
5 - 50 nm



Confinamento 3D de electrão  Níveis de energia quantificados



$$E \propto \frac{n^2}{L^2}$$

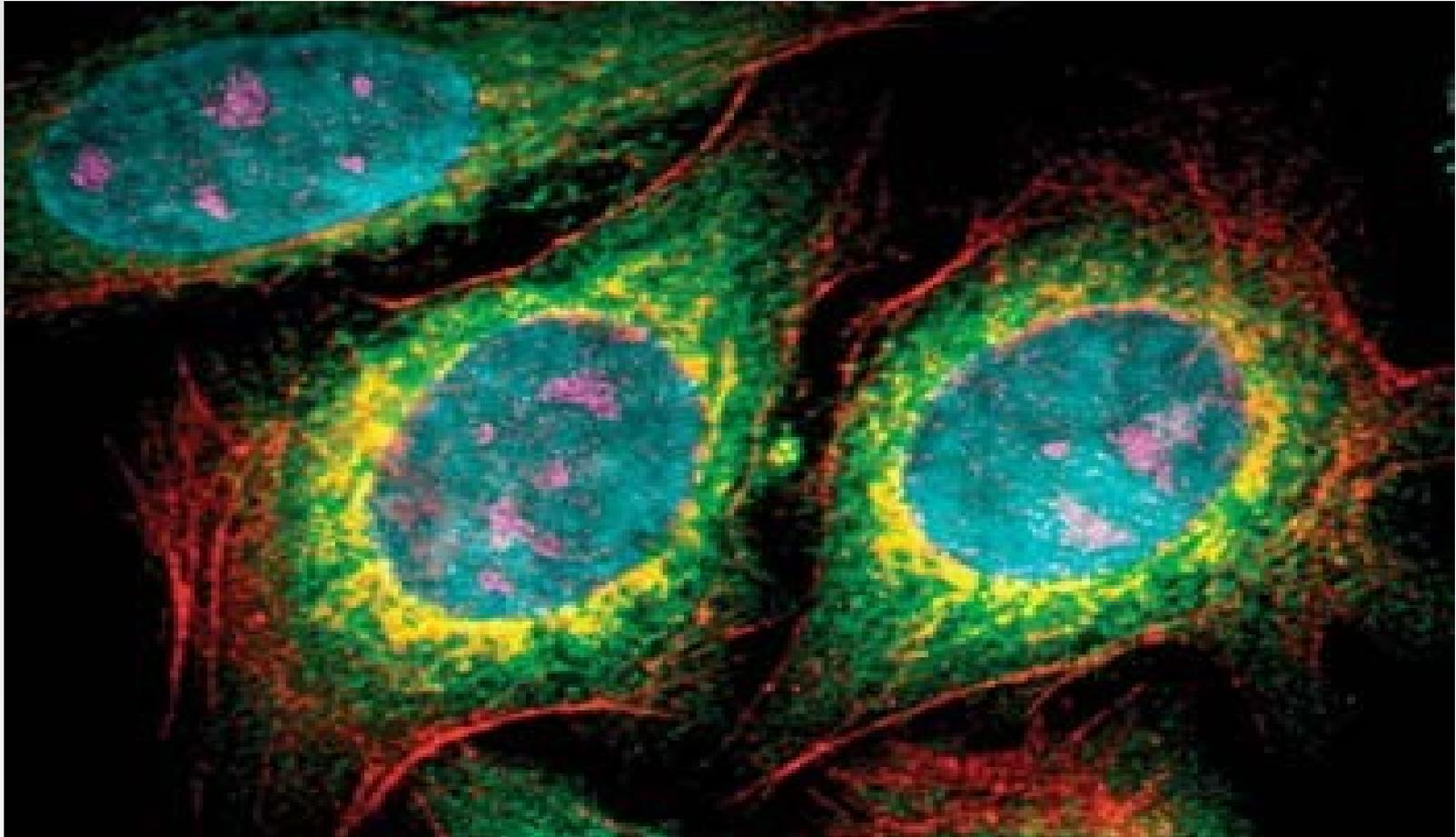


Quantum dots

Aplicações

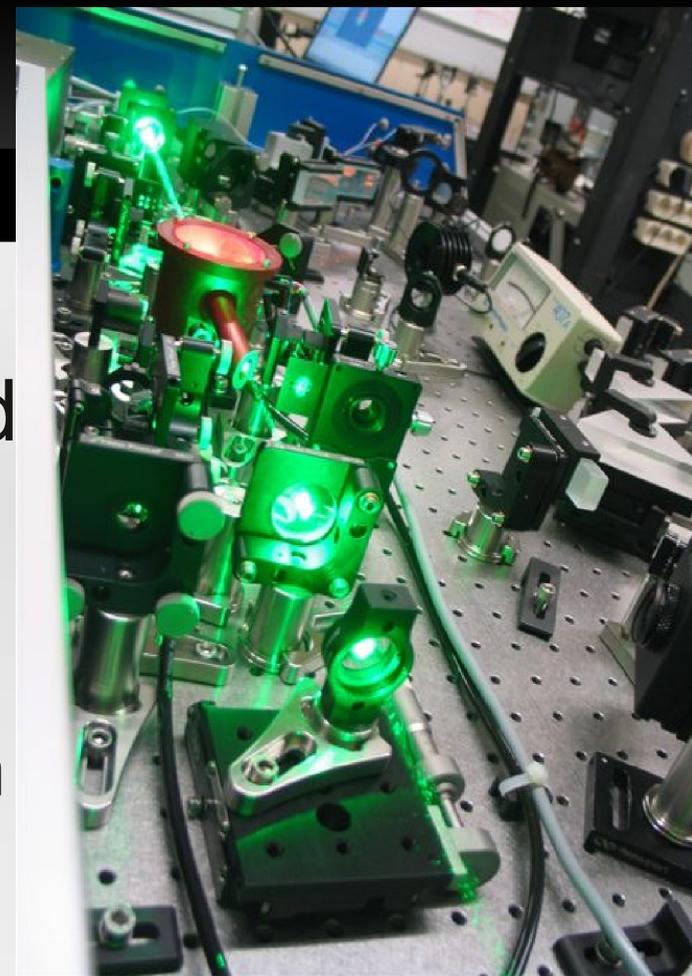
- Computação quântica
- Células fotovoltaicas
- LED's
- Imagiologia em biologia e medicina

Quantum dots



Laser

- Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation
- 1960, primeiro laser funcional
 - De rubi, por Theodore H. Maiman
- Laser permite obter:
 - Coerência
 - Brilho
 - Direcionalidade
 - Monocromaticidade (uma frequência)
 - Impulsos de curta duração



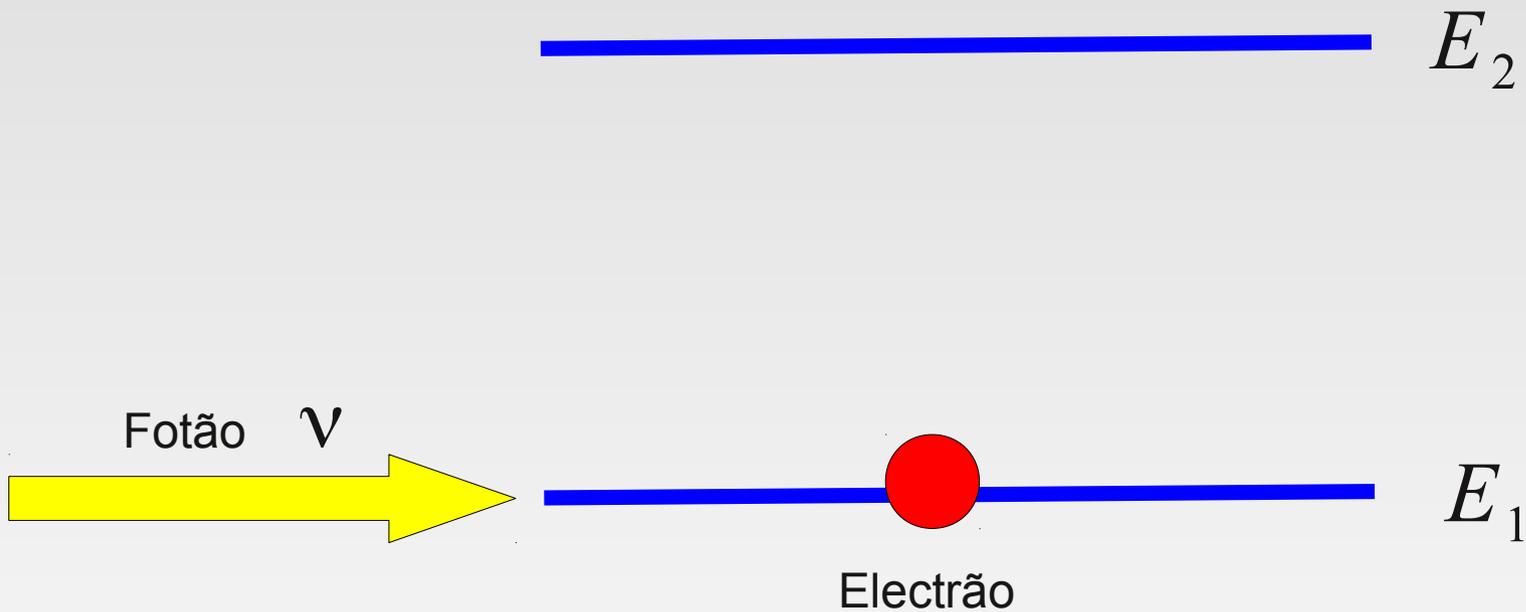
Laser

Interacção luz-matéria:

- Absorção
- Emissão espontânea
- Emissão estimulada

Laser

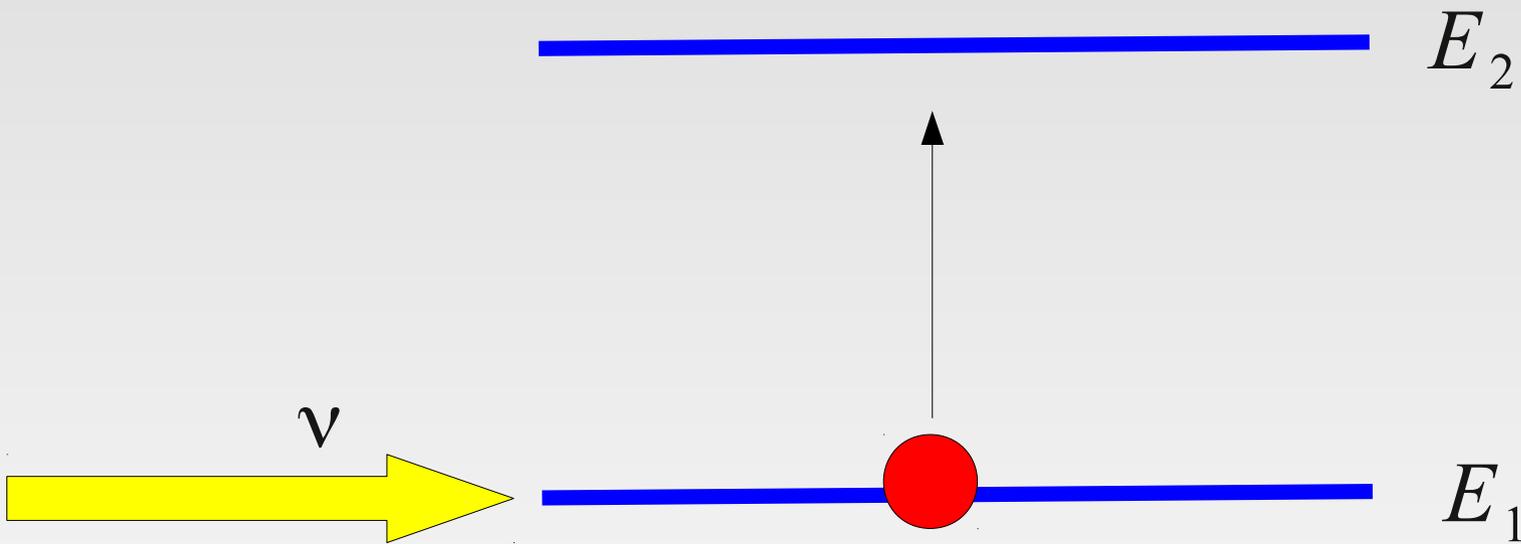
Absorção



$$h\nu = \Delta E = E_2 - E_1$$

Laser

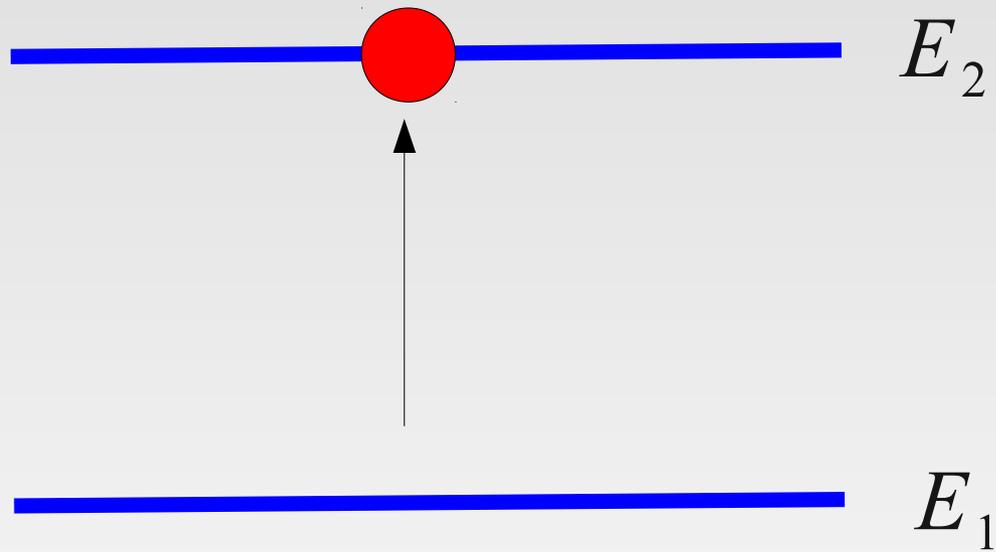
Absorção



$$h\nu = \Delta E = E_2 - E_1$$

Laser

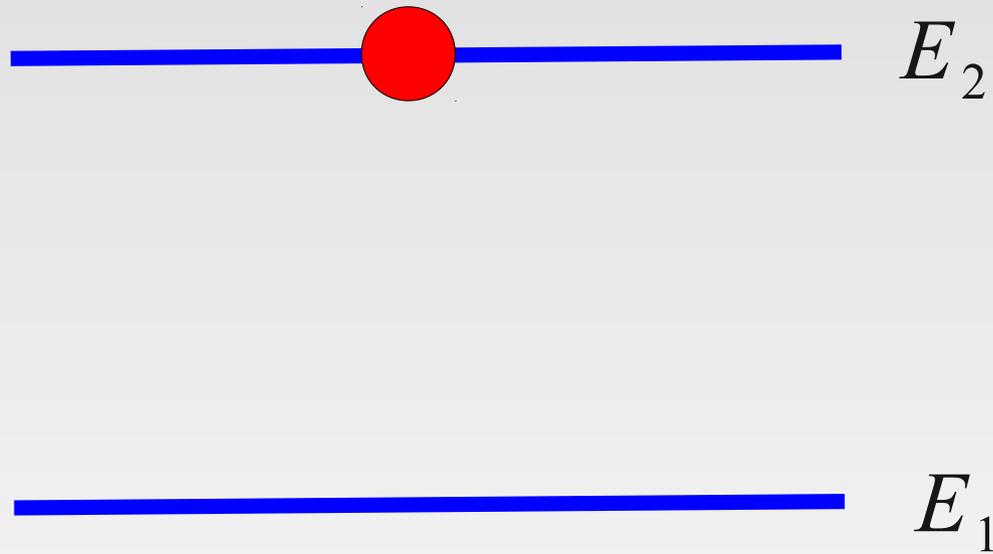
Absorção



$$h\nu = \Delta E = E_2 - E_1$$

Laser

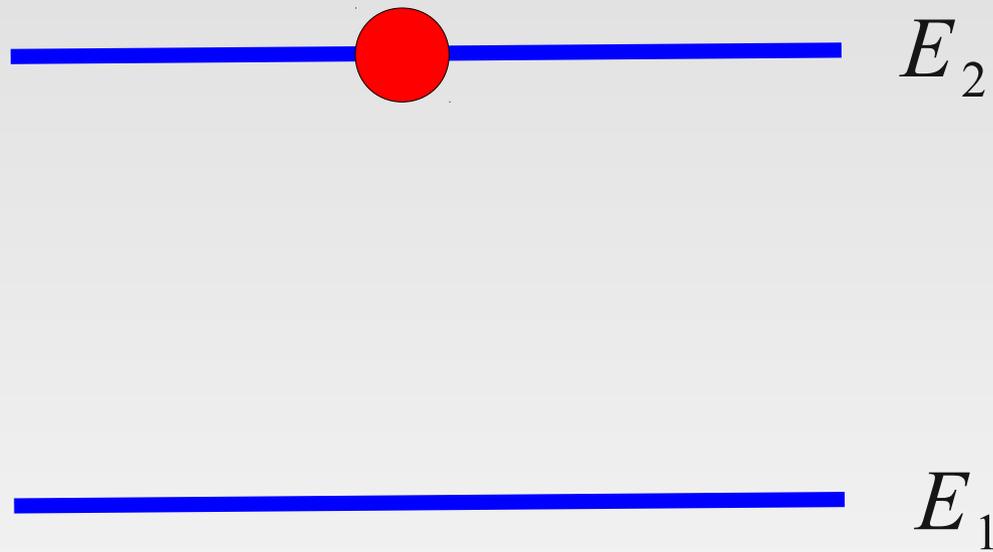
Absorção



$$h\nu = \Delta E = E_2 - E_1$$

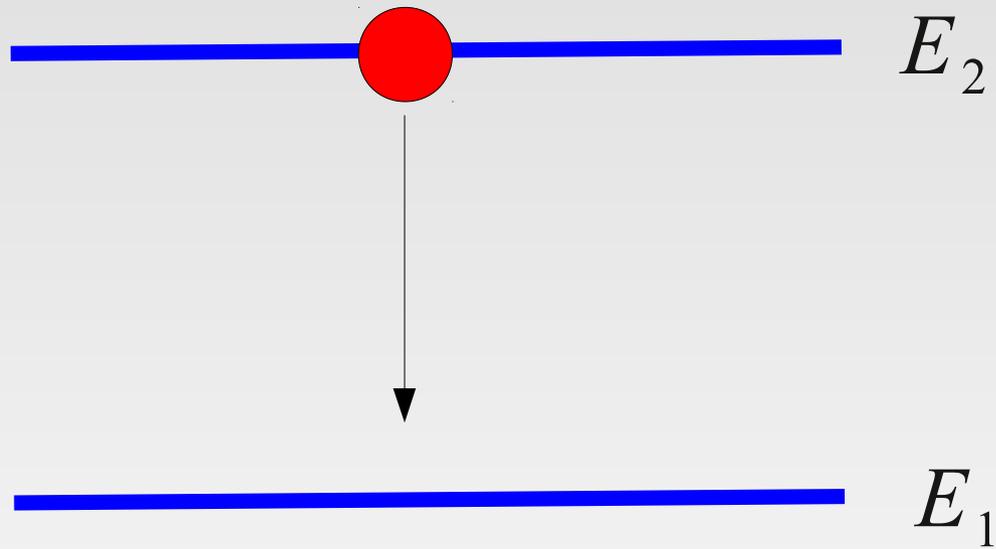
Laser

Emissão espontânea



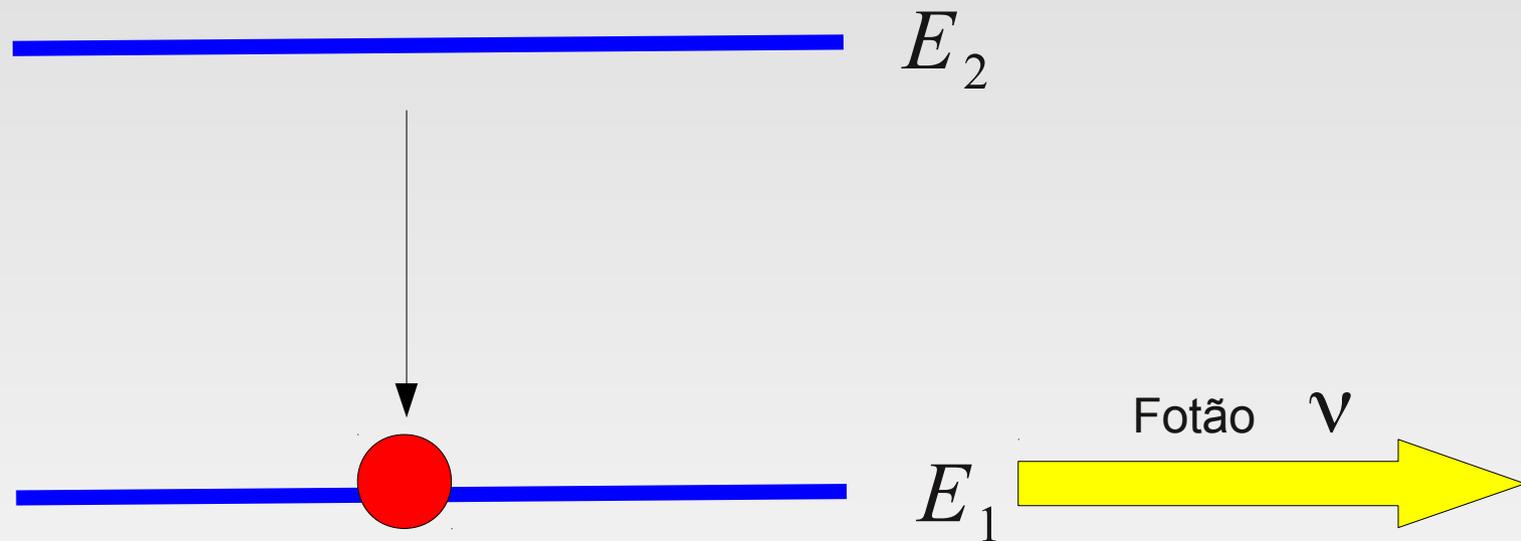
Laser

Emissão espontânea



Laser

Emissão espontânea

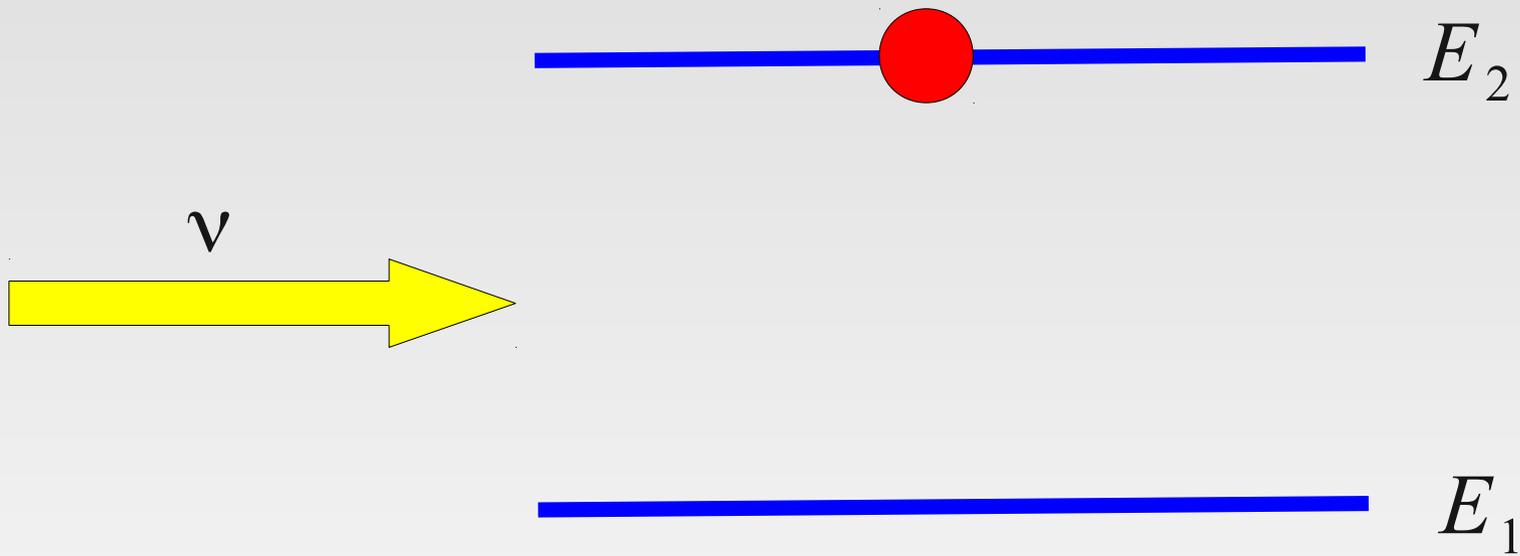


$$h\nu = \Delta E = E_2 - E_1$$

Fotão é emitido em direcção aleatória

Laser

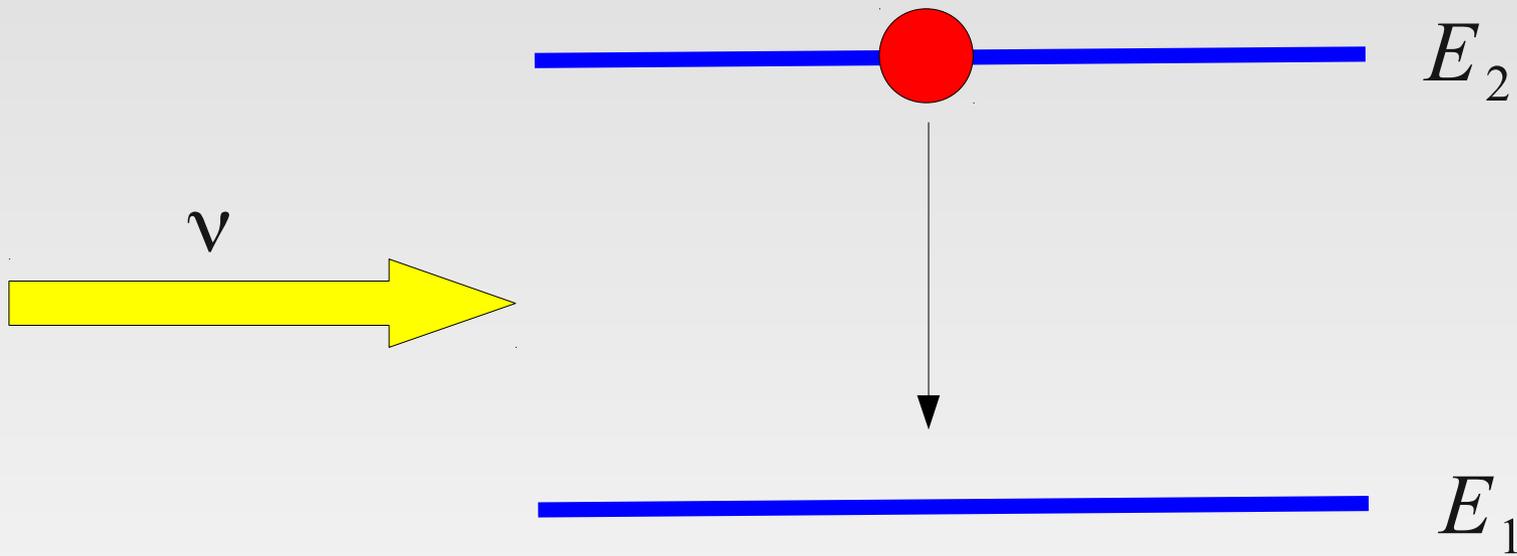
Emissão estimulada



$$h\nu = \Delta E = E_2 - E_1$$

Laser

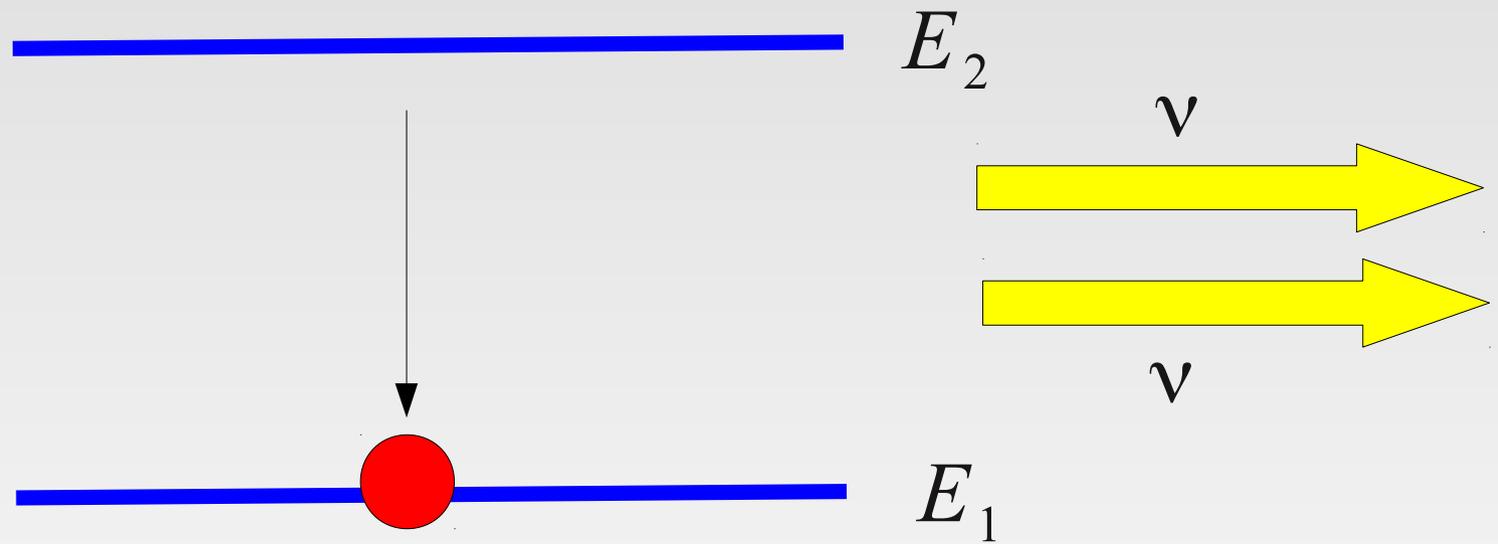
Emissão estimulada



$$h\nu = \Delta E = E_2 - E_1$$

Laser

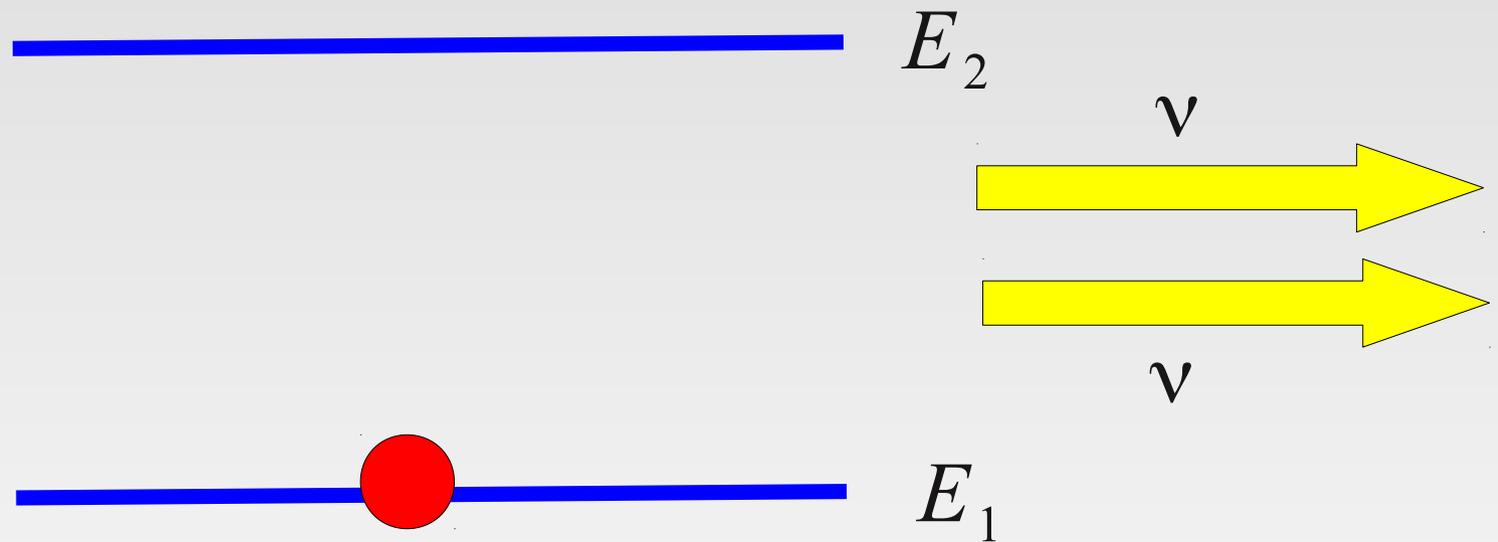
Emissão estimulada



$$h\nu = \Delta E = E_2 - E_1$$

Laser

Emissão estimulada

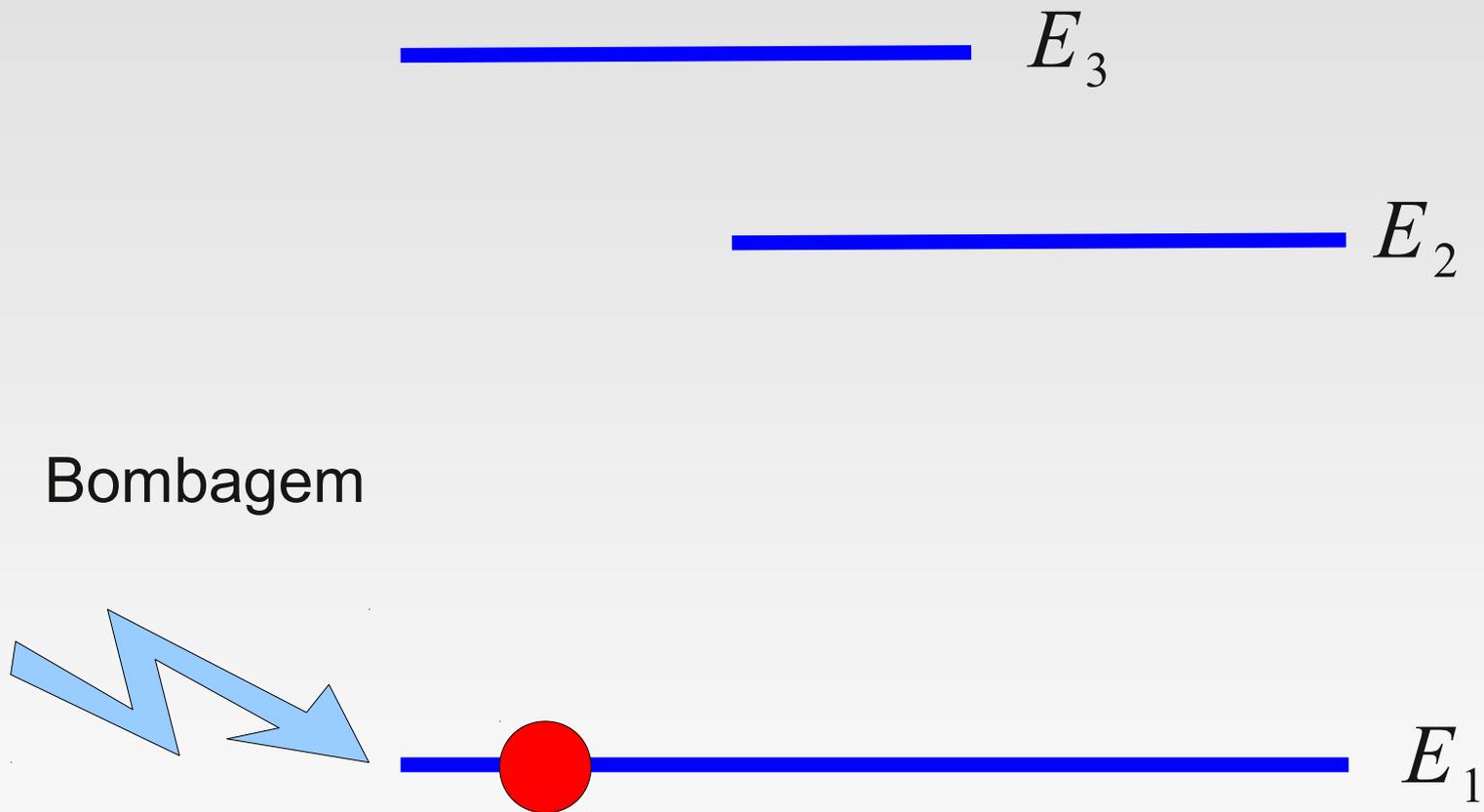


$$h\nu = \Delta E = E_2 - E_1$$

Fotão é emitido com a mesma frequência e na mesma direcção que o fotão incidente!

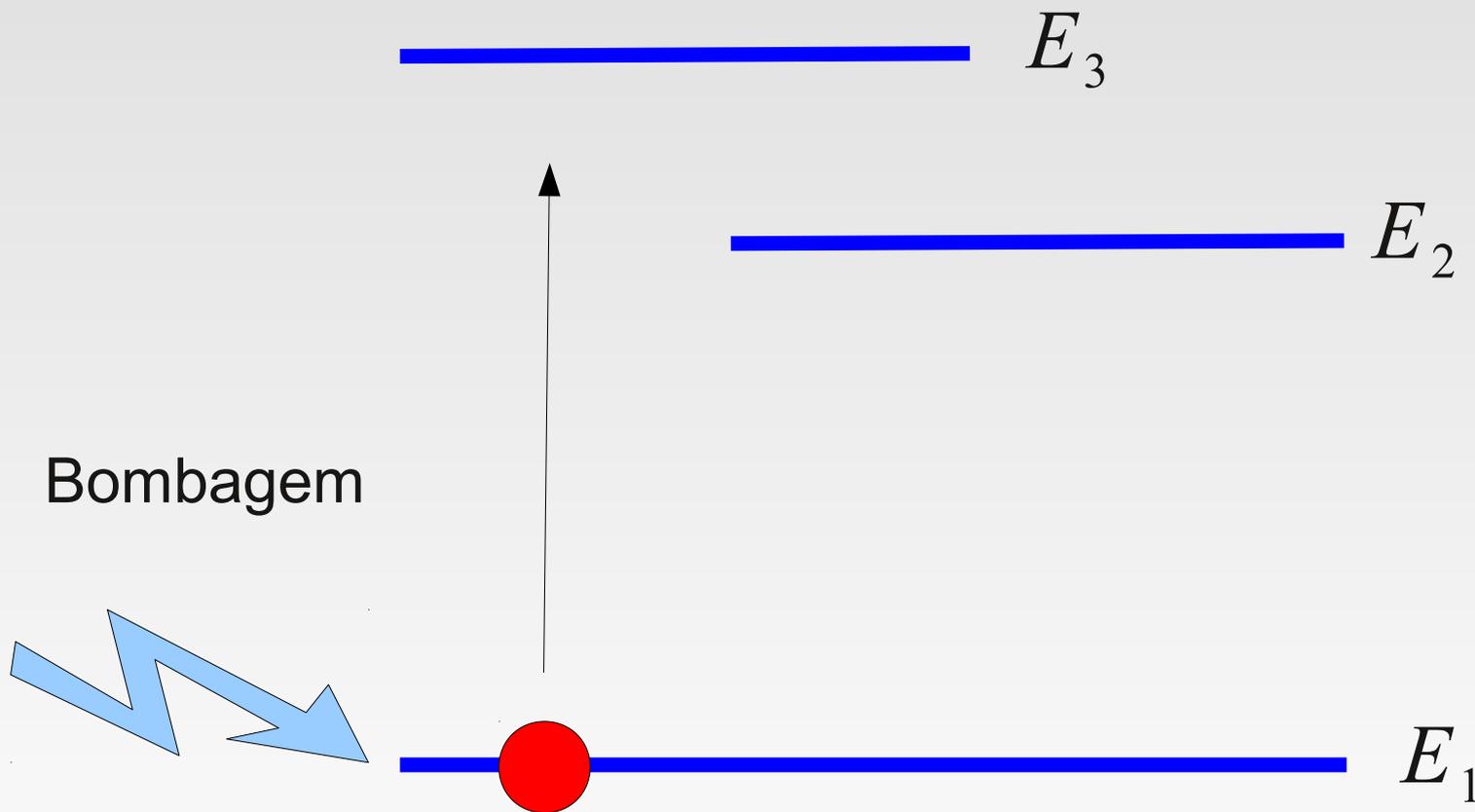
Laser

Mecanismo (laser de 3 níveis)



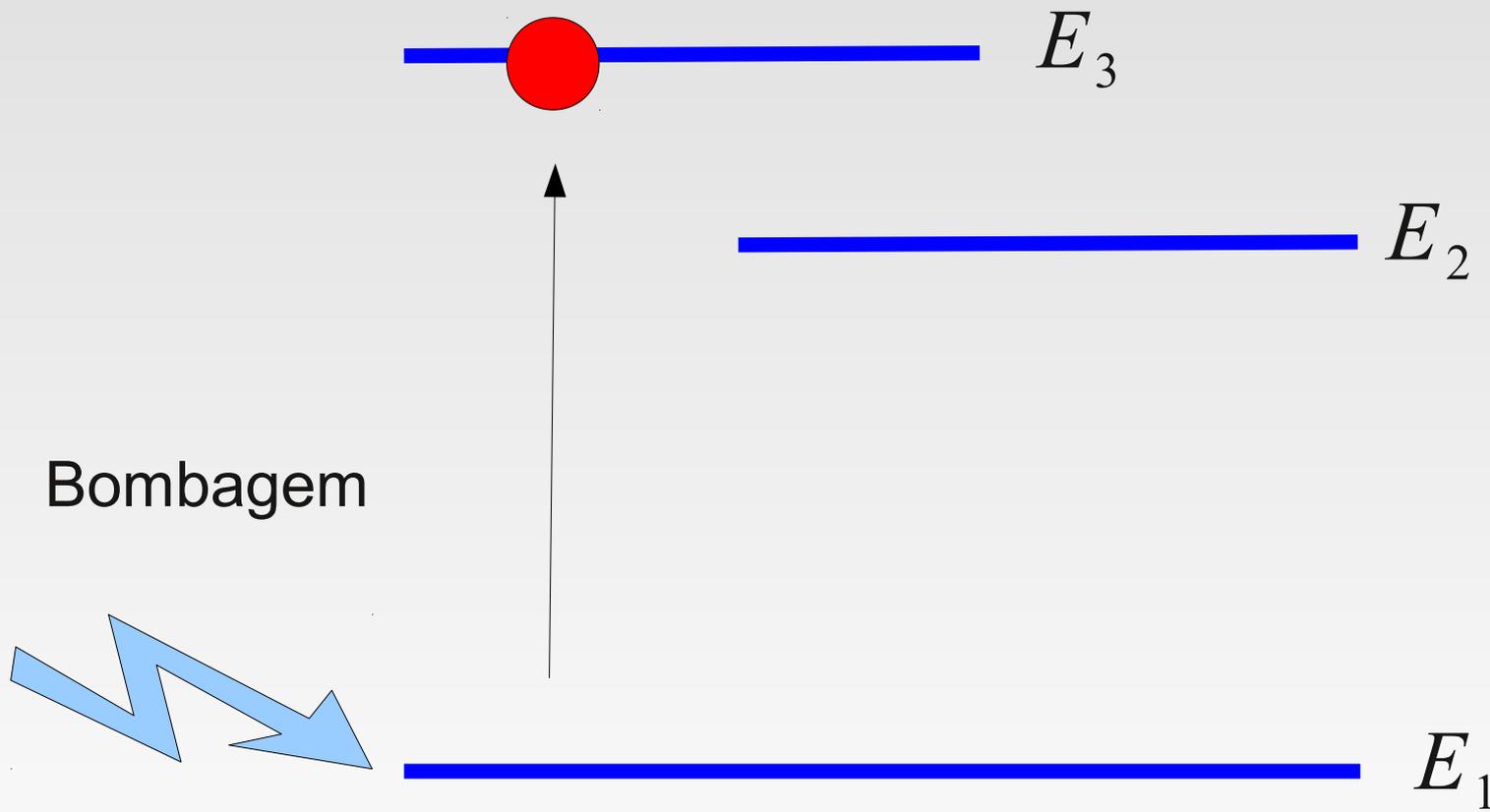
Laser

Mecanismo (laser de 3 níveis)



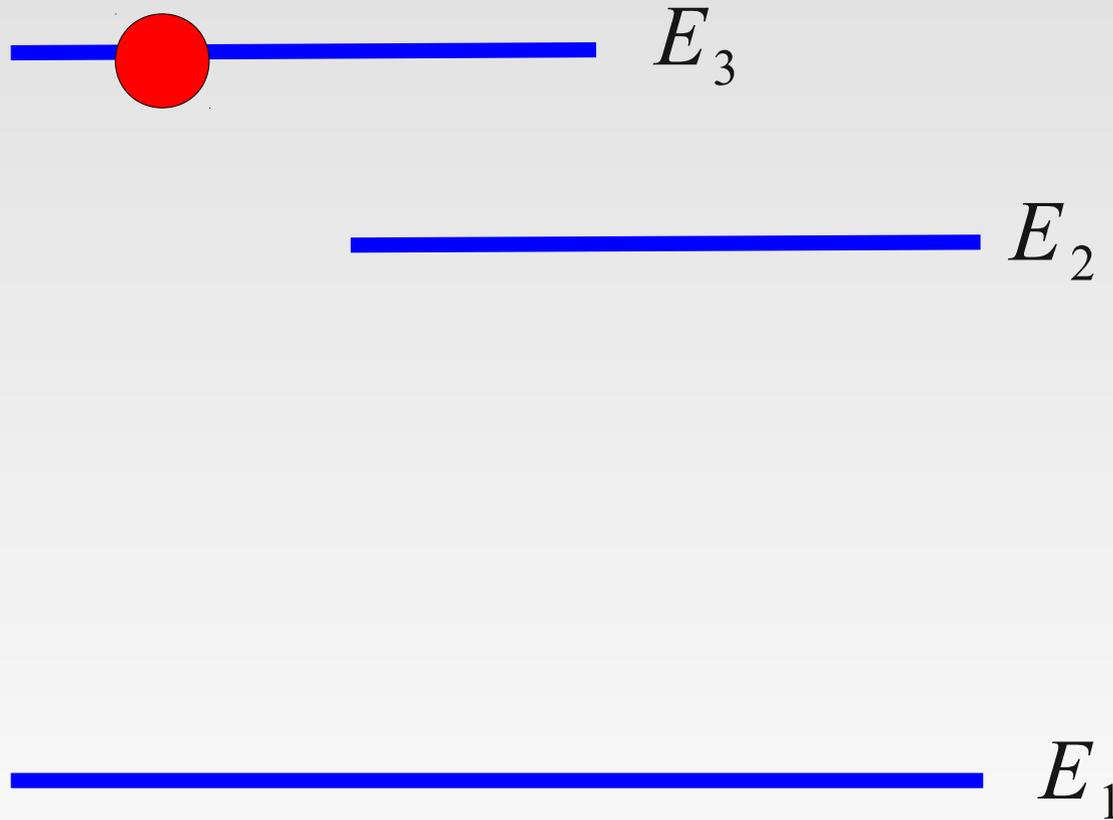
Laser

Mecanismo (laser de 3 níveis)



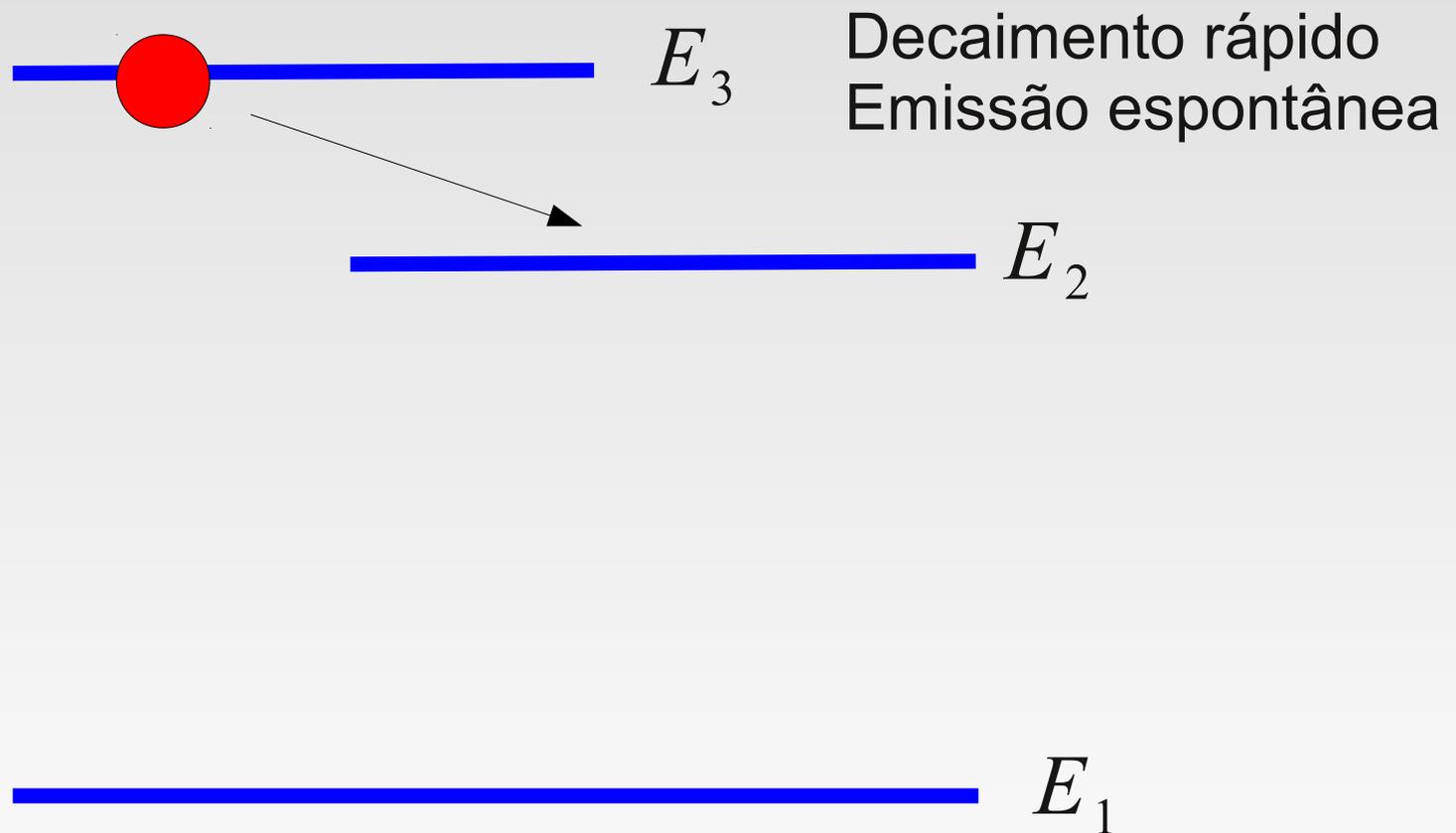
Laser

Mecanismo (laser de 3 níveis)



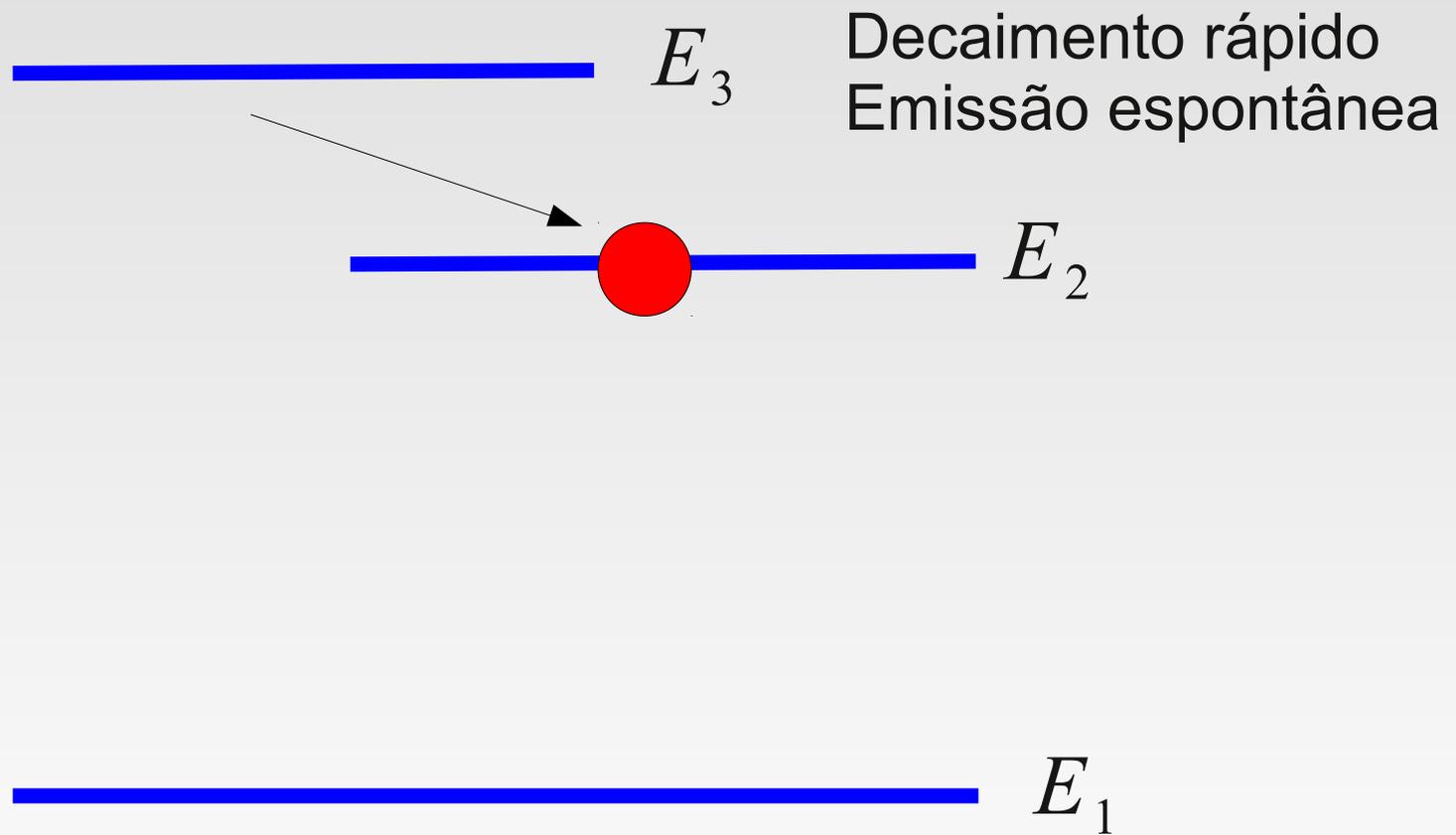
Laser

Mecanismo (laser de 3 níveis)



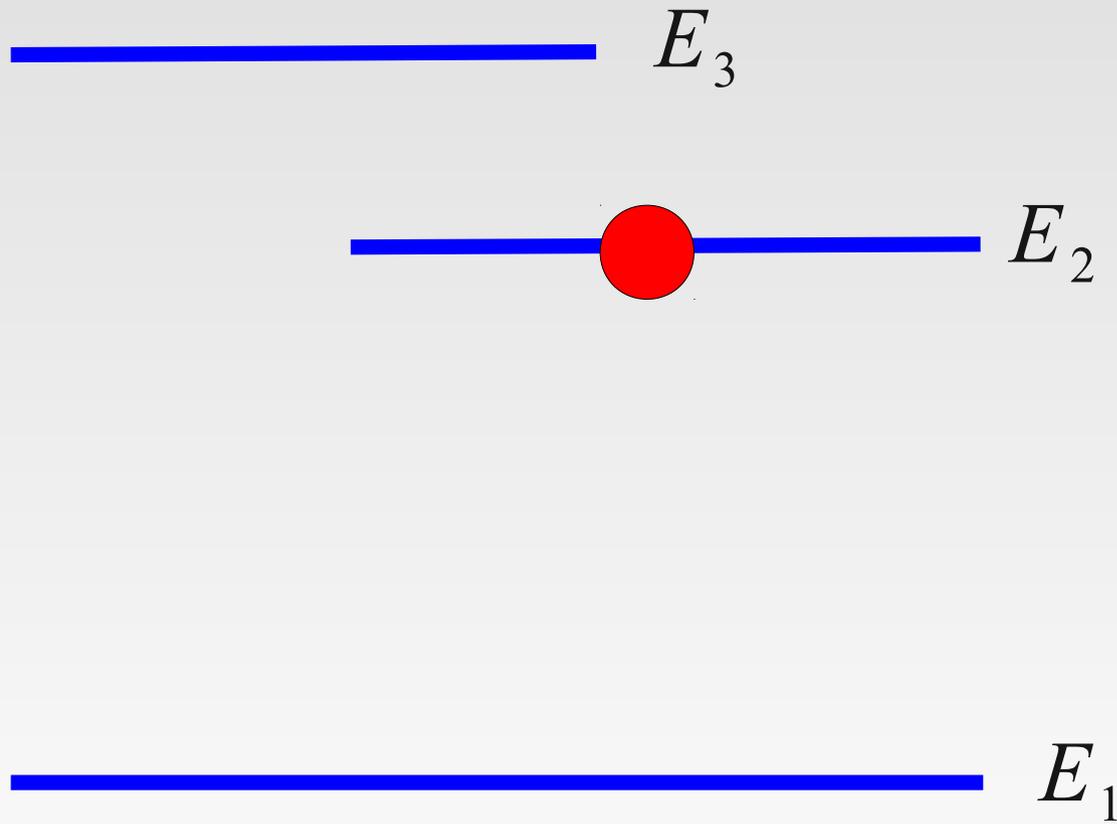
Laser

Mecanismo (laser de 3 níveis)



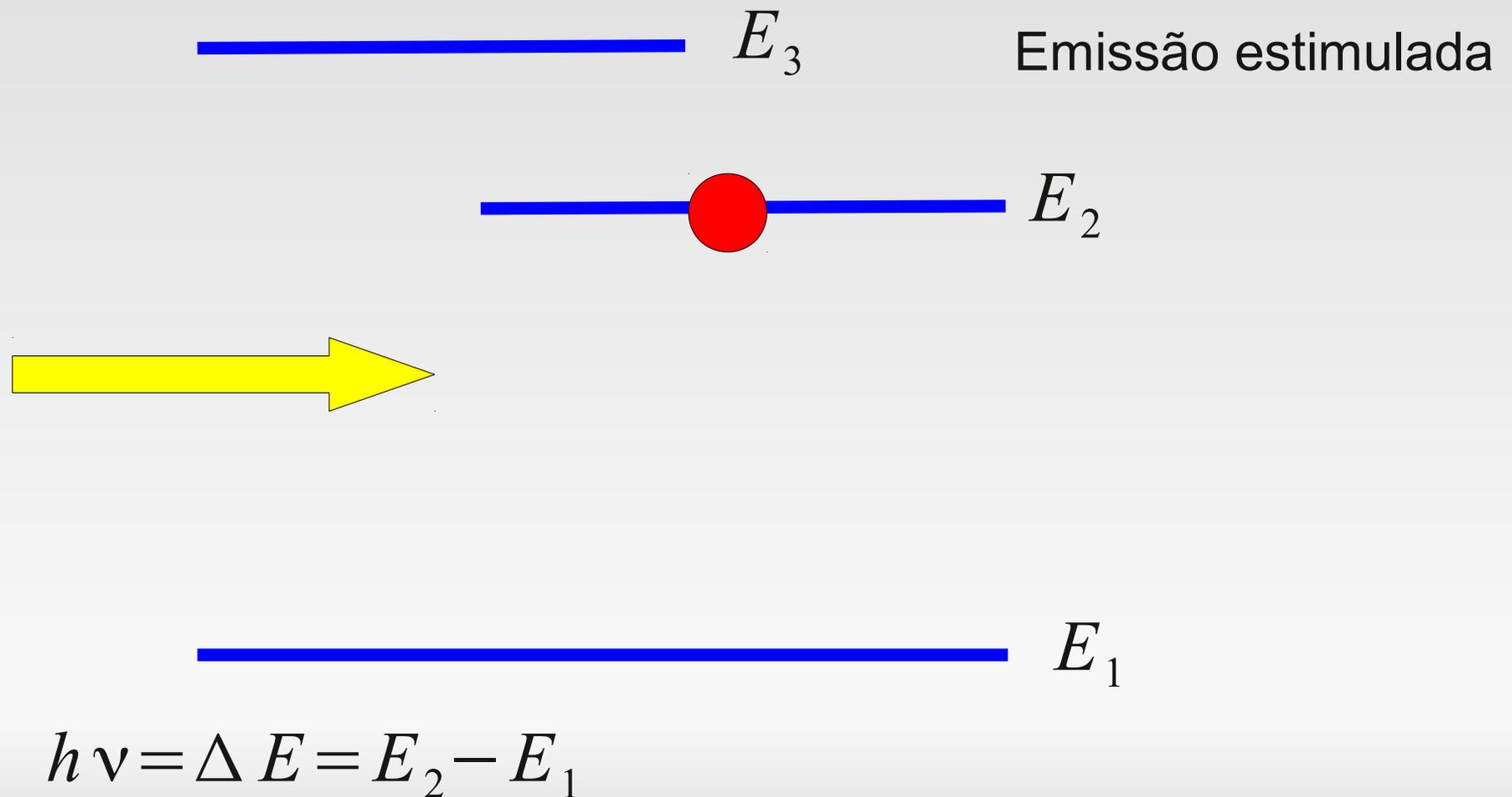
Laser

Mecanismo (laser de 3 níveis)



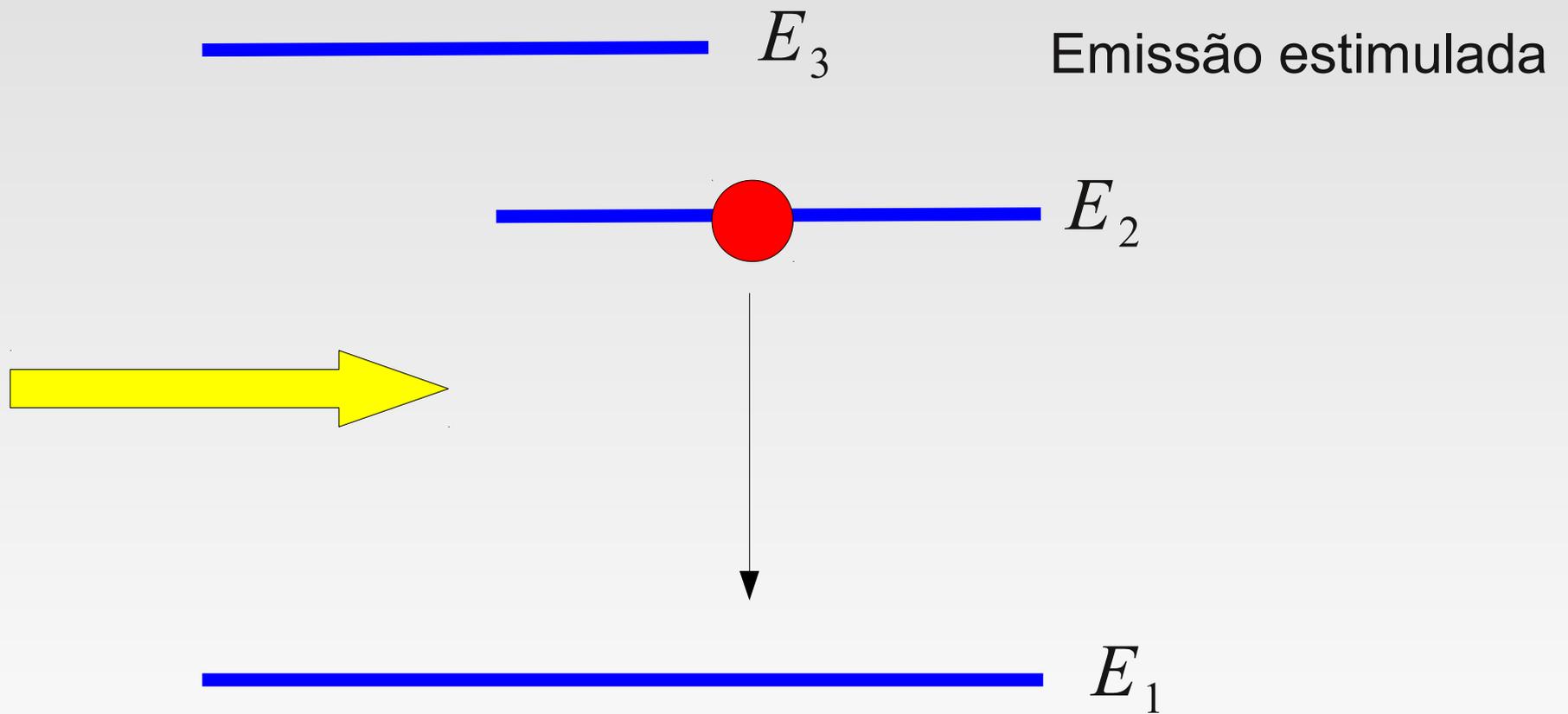
Laser

Mecanismo (laser de 3 níveis)



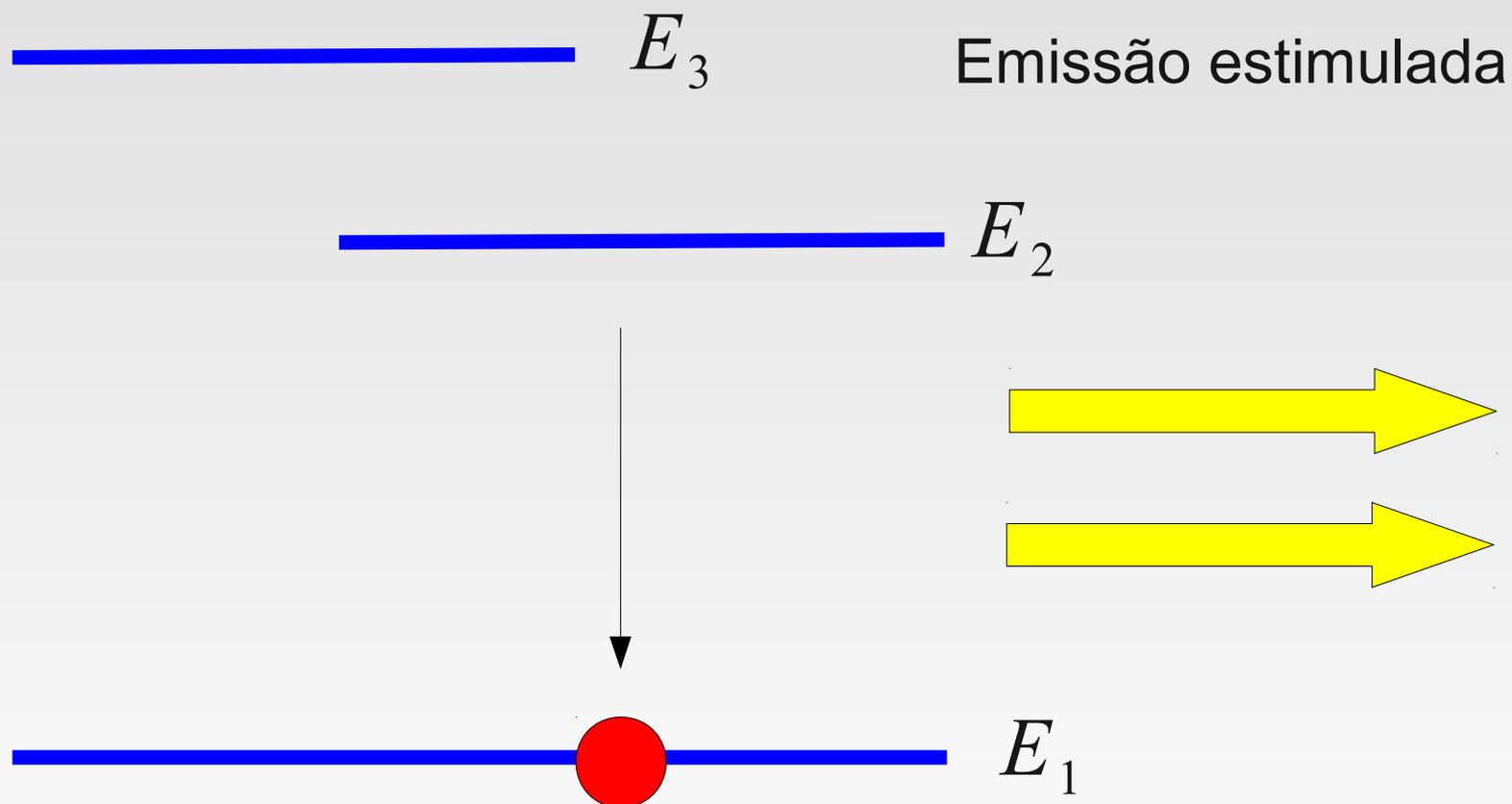
Laser

Mecanismo (laser de 3 níveis)



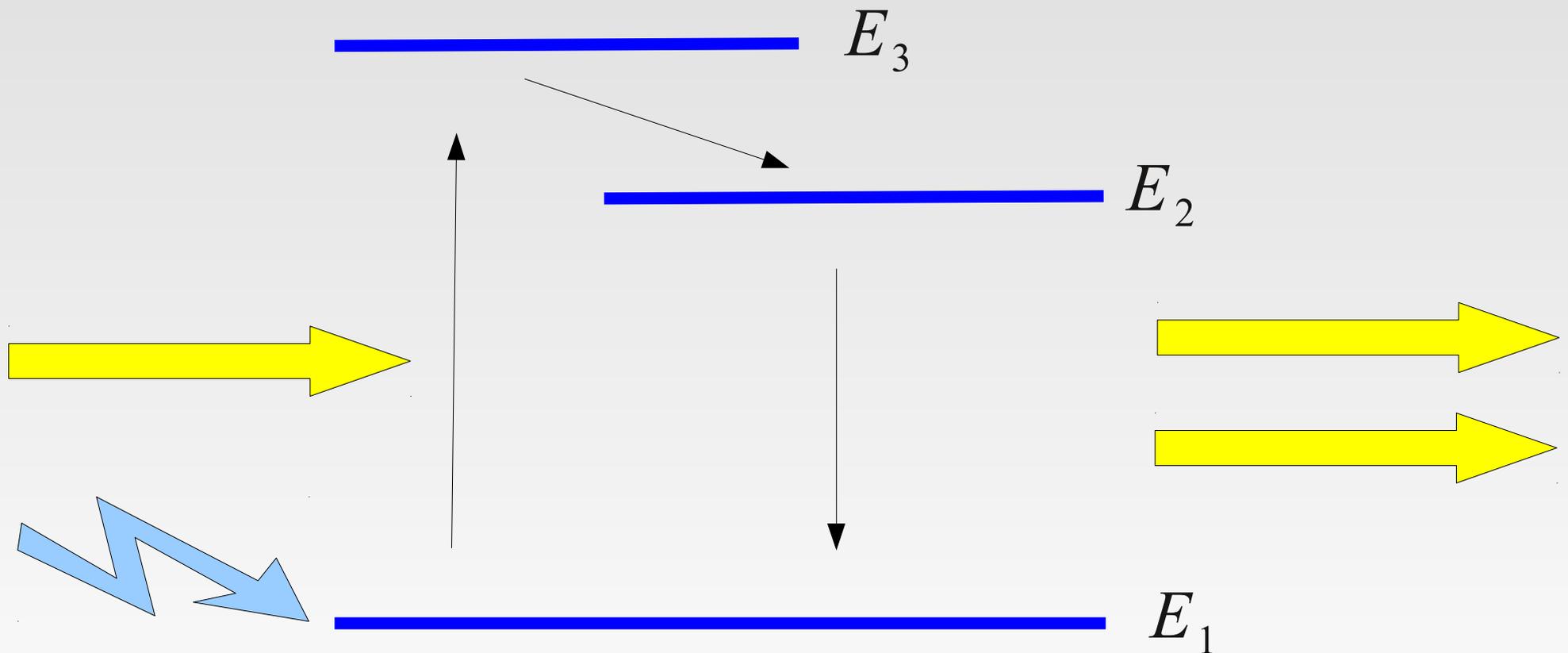
Laser

Mecanismo (laser de 3 níveis)



Laser

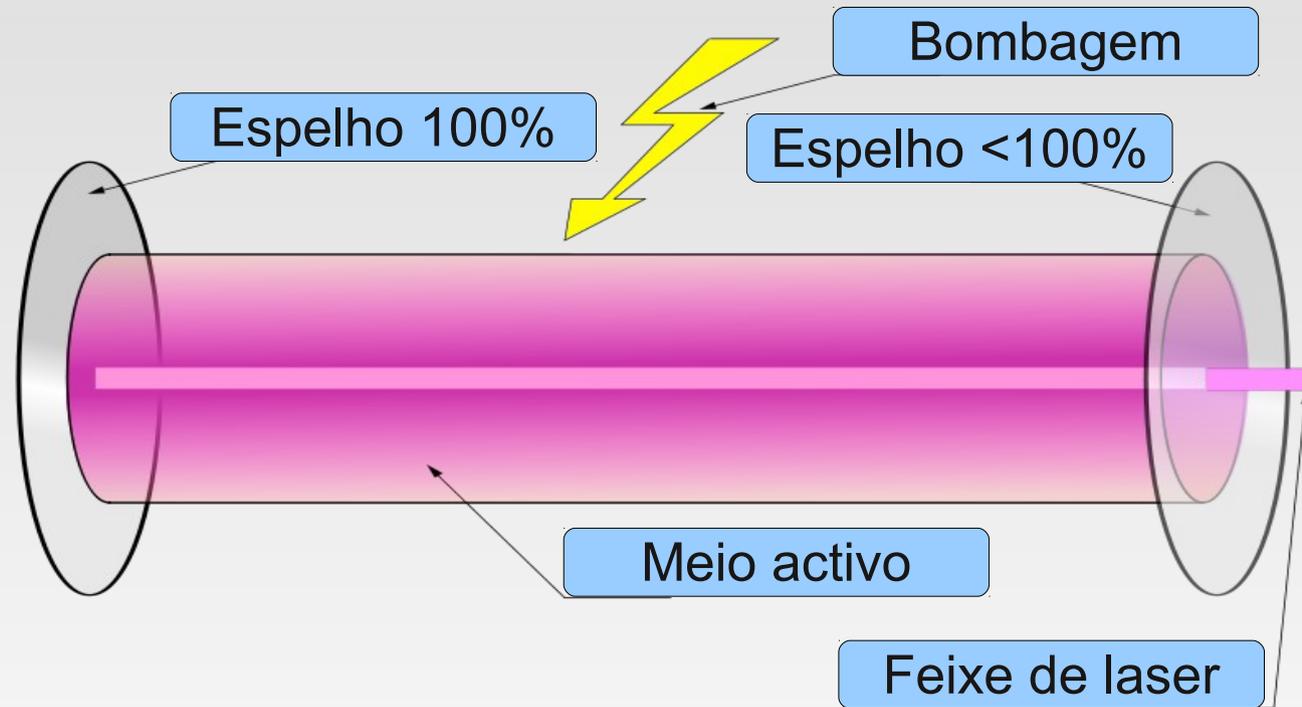
Mecanismo (laser de 3 níveis)



Reacção em cadeia!

Laser

Cavidade



Laser

Aplicações

- Corte
- Soldadura
- Medicina
- Sensores
- Comunicação óptica
- ...

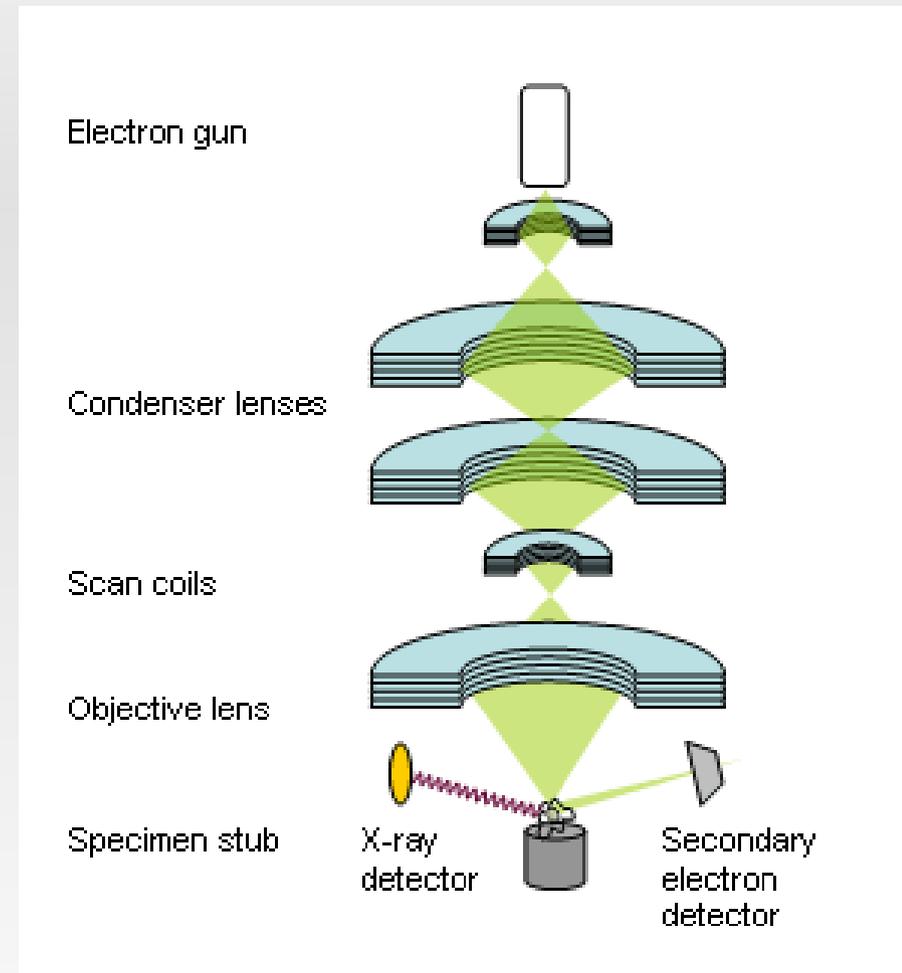


Microscópio electrónico de varrimento

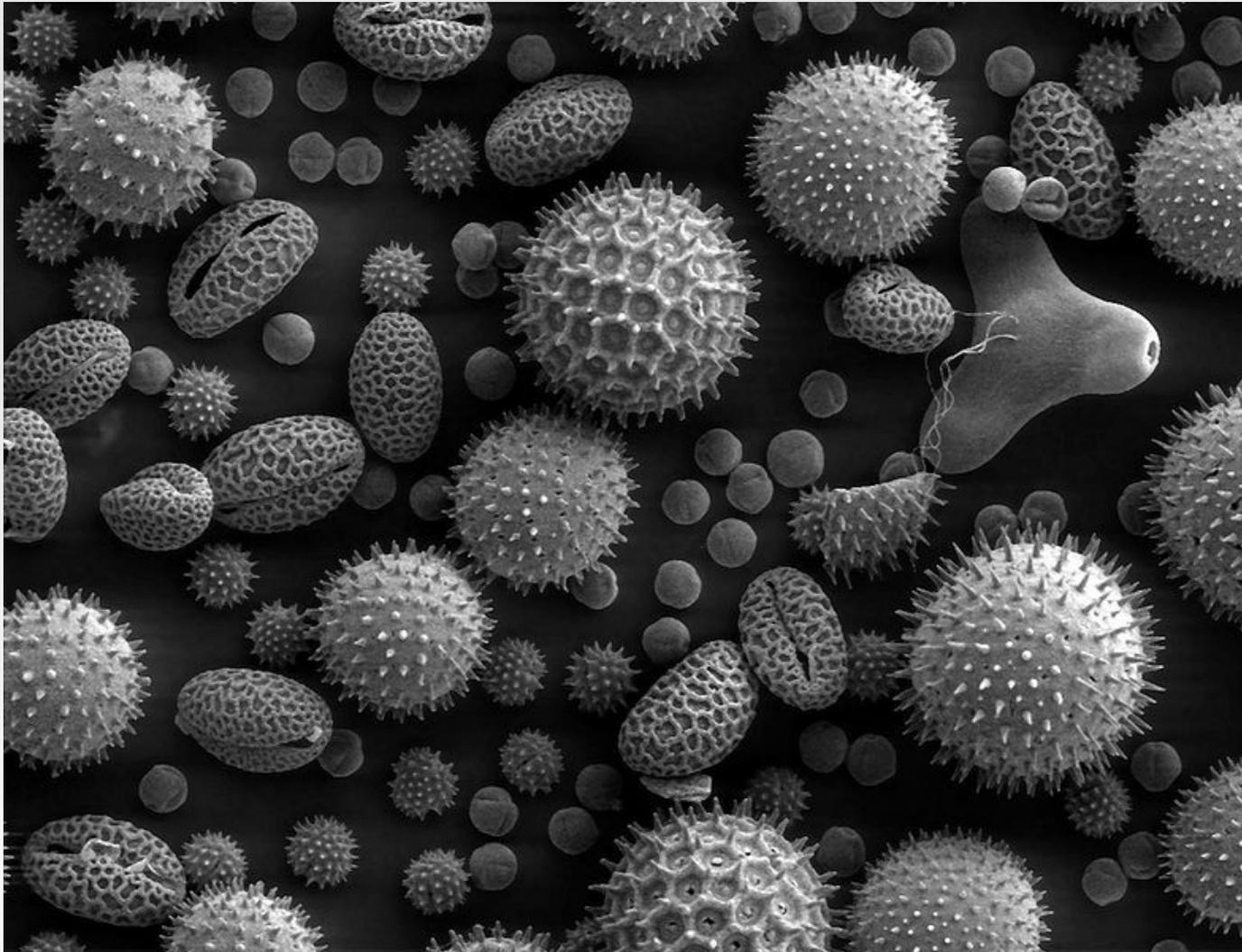
- Usa electrões em vez de fotões
- Energia dos electrões:
0,5 a 40 keV (~10 keV)

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2 m E}} \sim 10^{-11} m = 0.01 nm$$

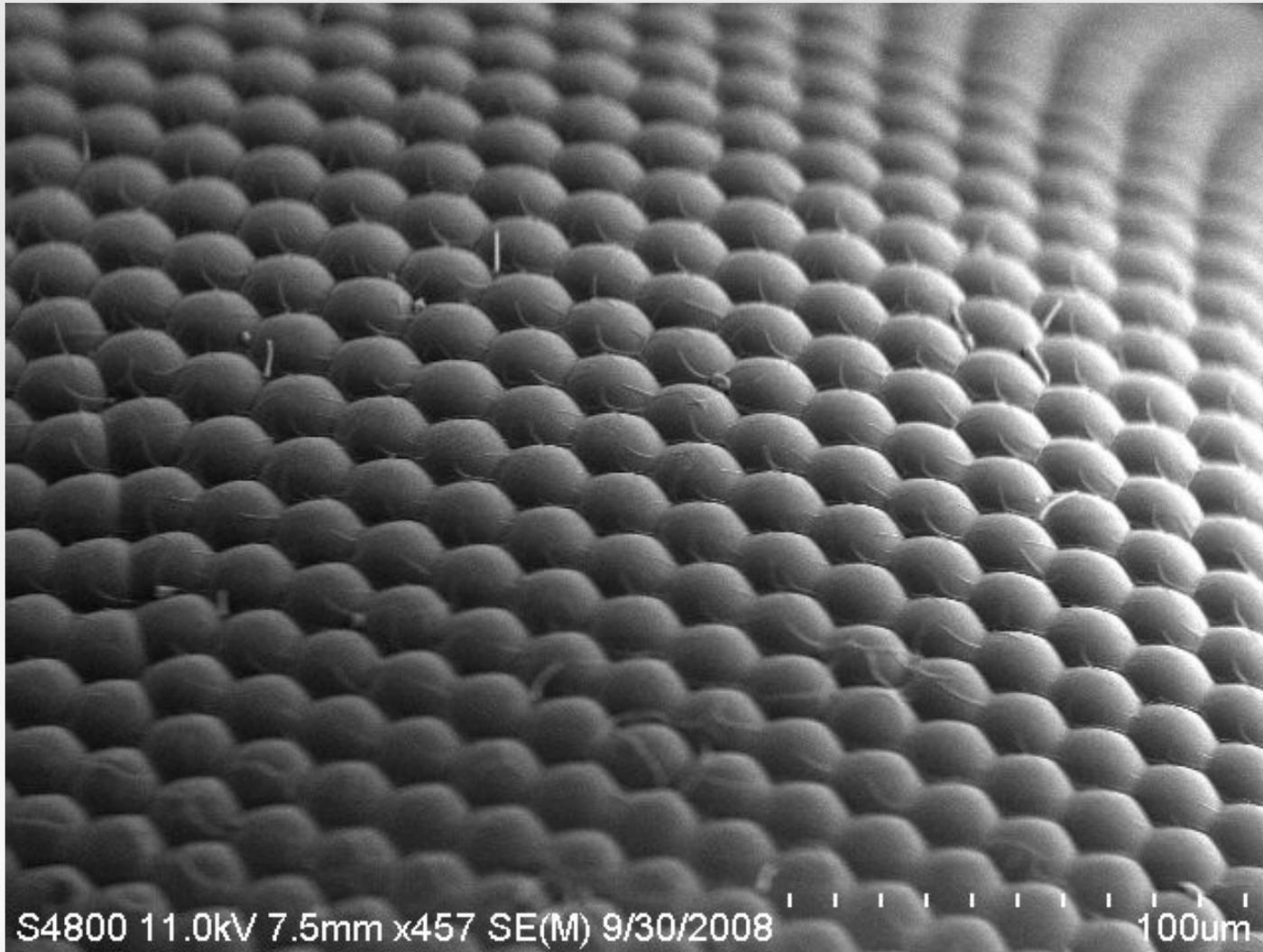
- Resolução de 1 a 20 nm
- Ampliação de 10 a 500 000 vezes



Microscópio electrónico de varrimento

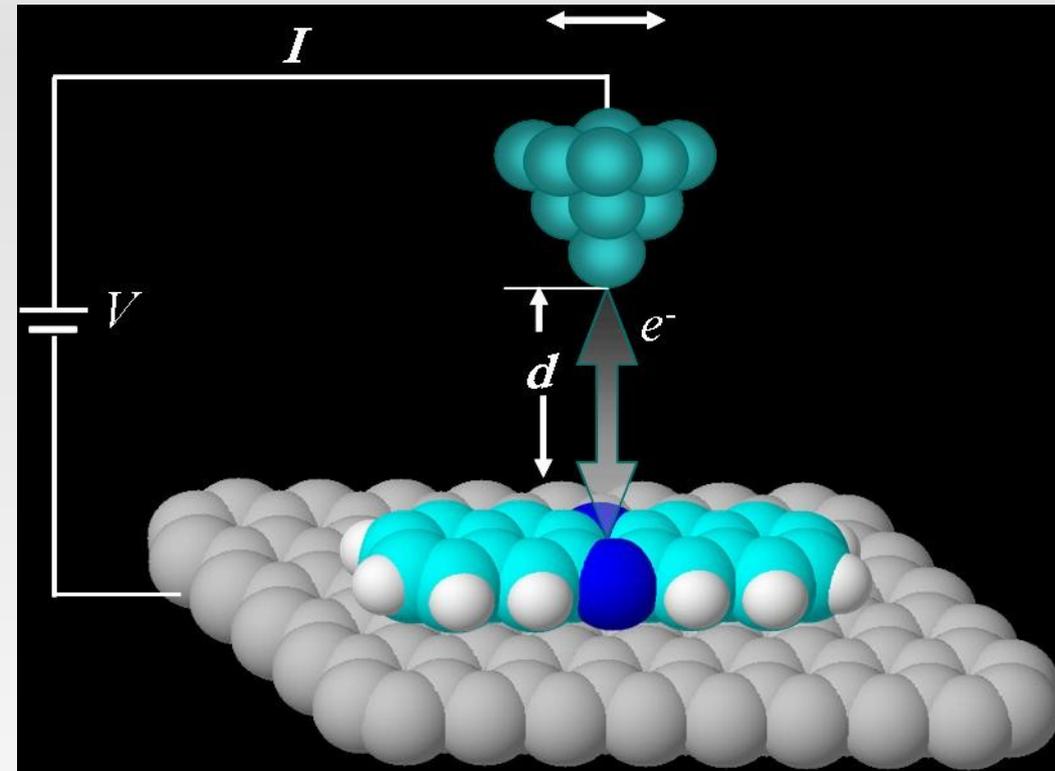
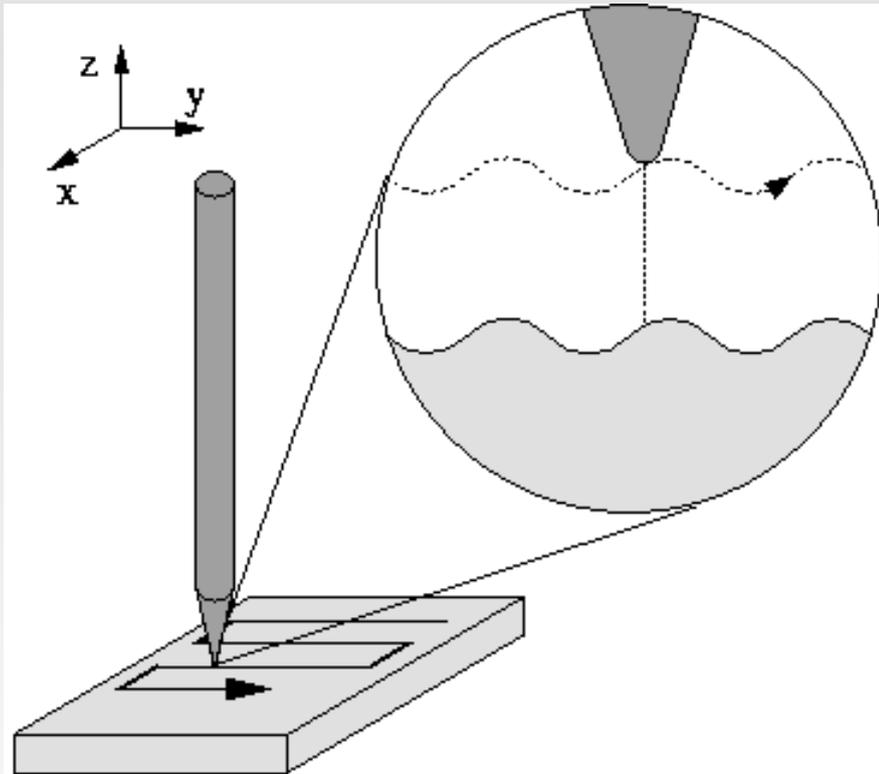


Microscópio electrónico de varrimento



Microscópio de efeito de túnel

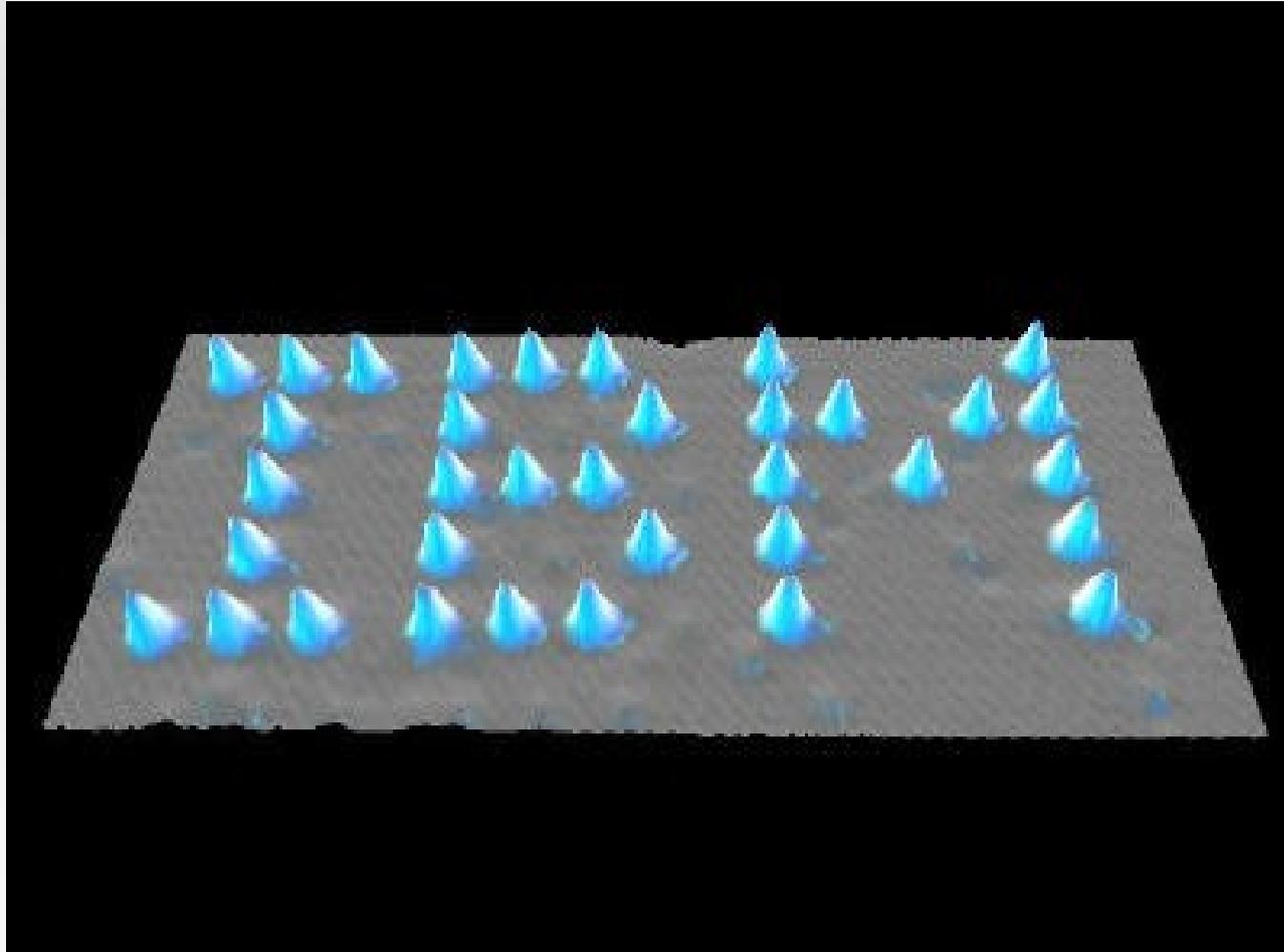
Inventado em 1981 por Gerd Binnig & Heinrich Rohrer
(prémio Nobel 1986)



- Varrimento da ponta
- Altura constante \rightarrow densidade de carga
- Corrente constante \rightarrow altura

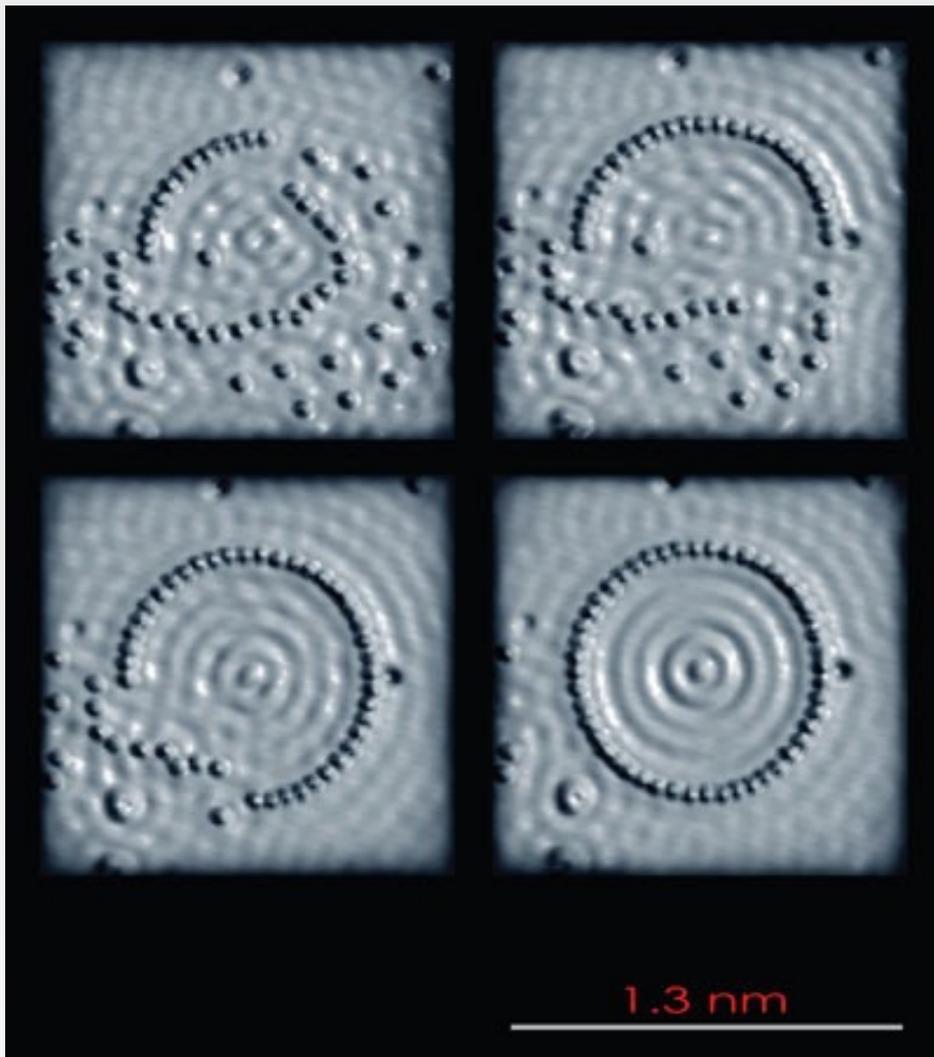
Microscópio de efeito de túnel

Também pode ser usada para manipular átomos individuais

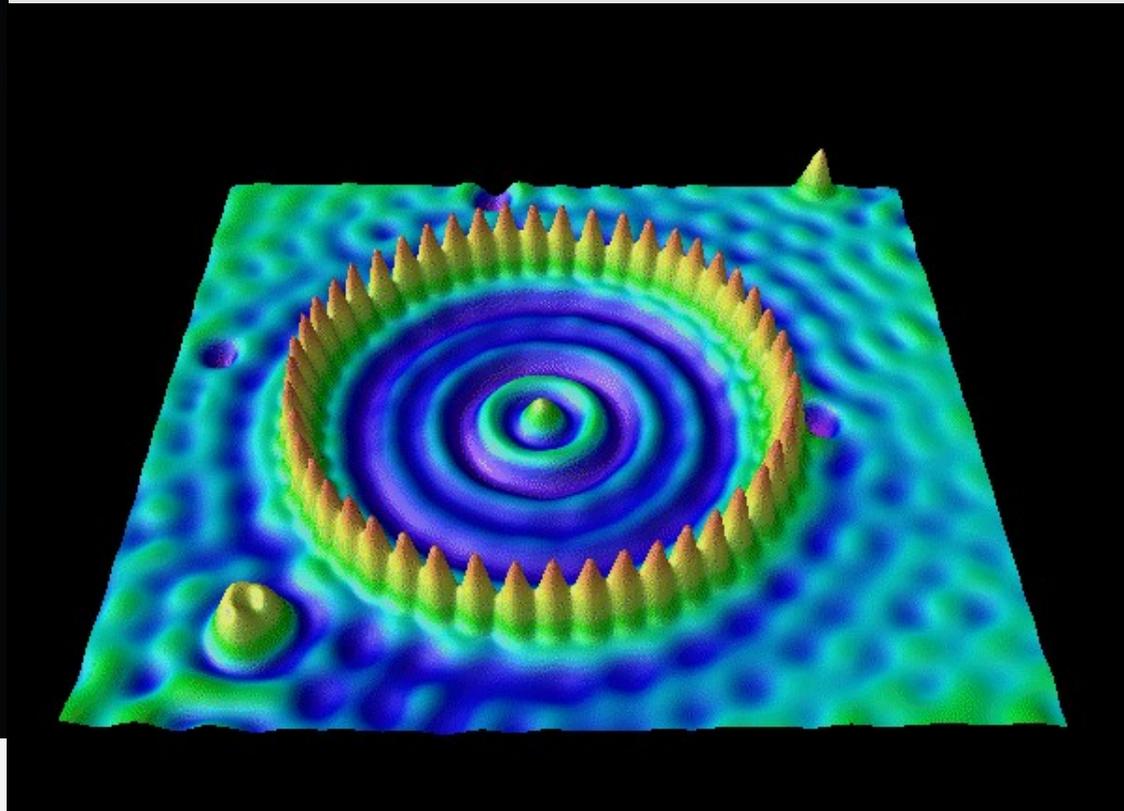


35 átomos de Xénon sobre Níquel

Microscópio de efeito de túnel



Átomos de Ferro sobre Cobre



Interlúdio: Fermiões & Bosões

Facto da Natureza:

Há dois tipos de partículas:

- ***Fermiões***

Só pode existir uma partícula num dado estado (orbital + spin) – Princípio de exclusão de Pauli

Ex: electrão

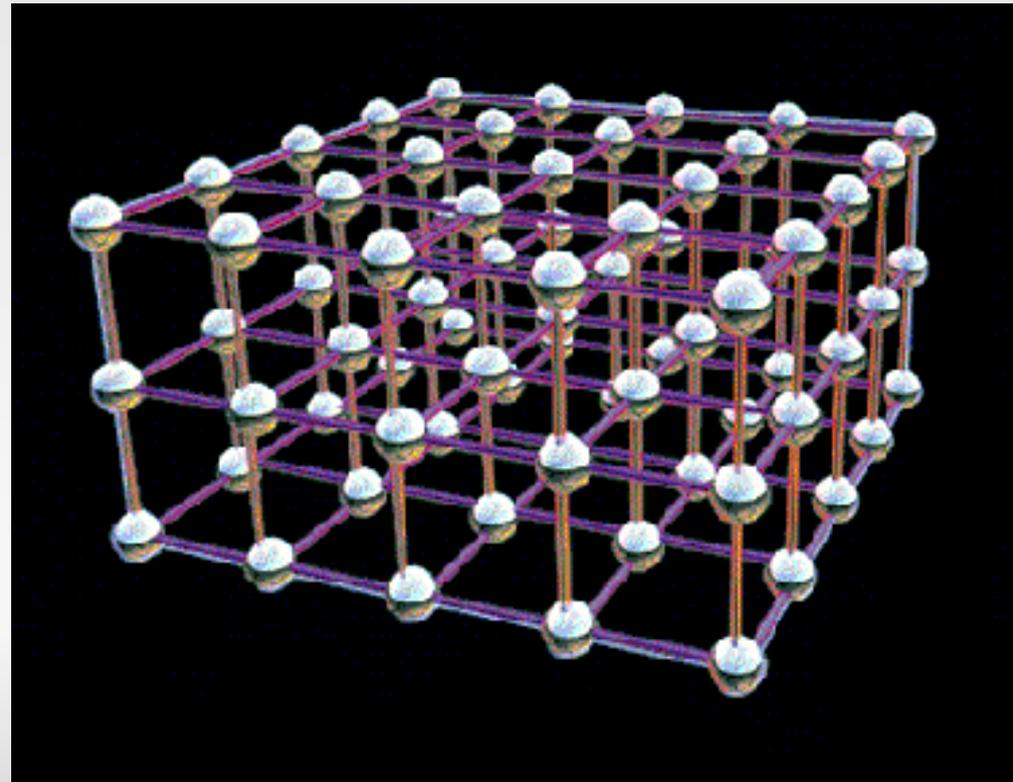
- ***Bosões***

Podem existir várias partículas no mesmo estado

Ex: fóton

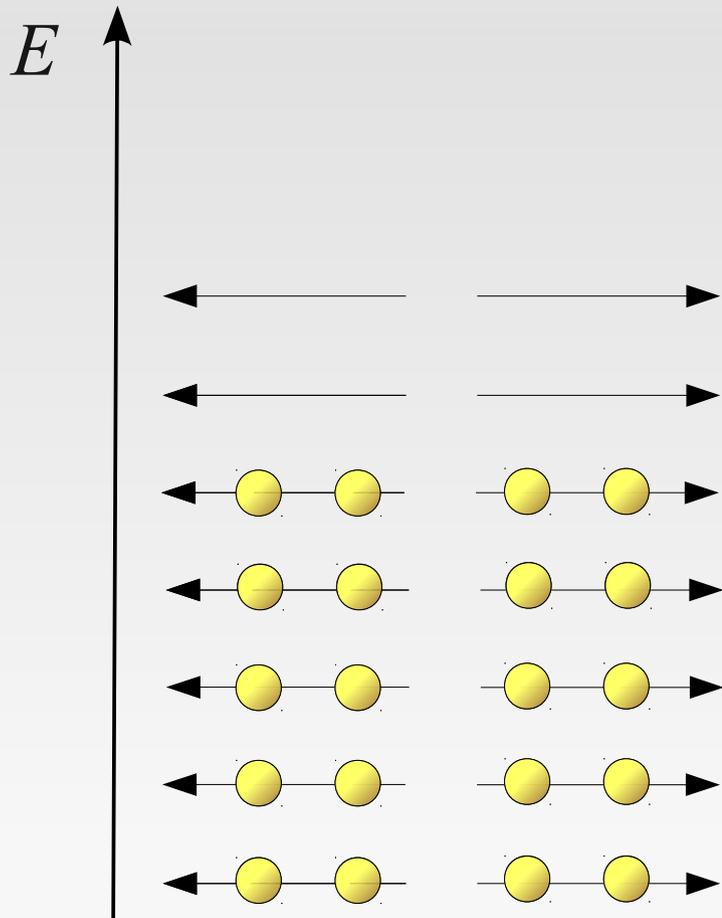
Metais, Isoladores & Semicondutores

- Num cristal, electrões de valência são partilhados por todos os átomos
- Cristal perfeito (periódico): função de onda do electrão espalha-se por todo o cristal
- Energia do electrão quase não é afectada pelo cristal

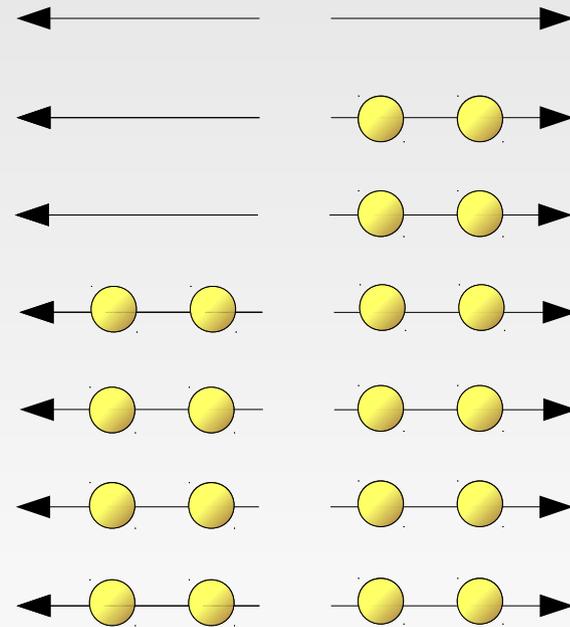


Metais, Isoladores & Semicondutores

Em equilíbrio

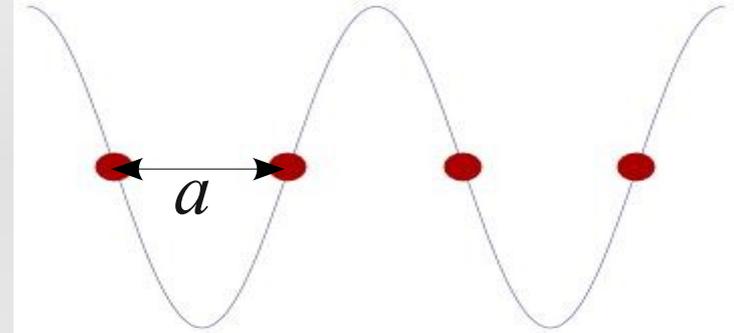
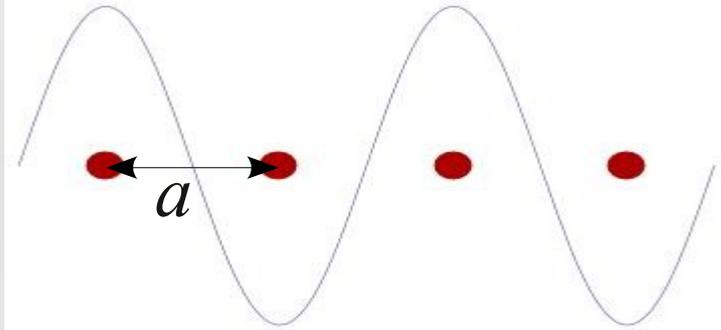


Aplicando diferença de potencial

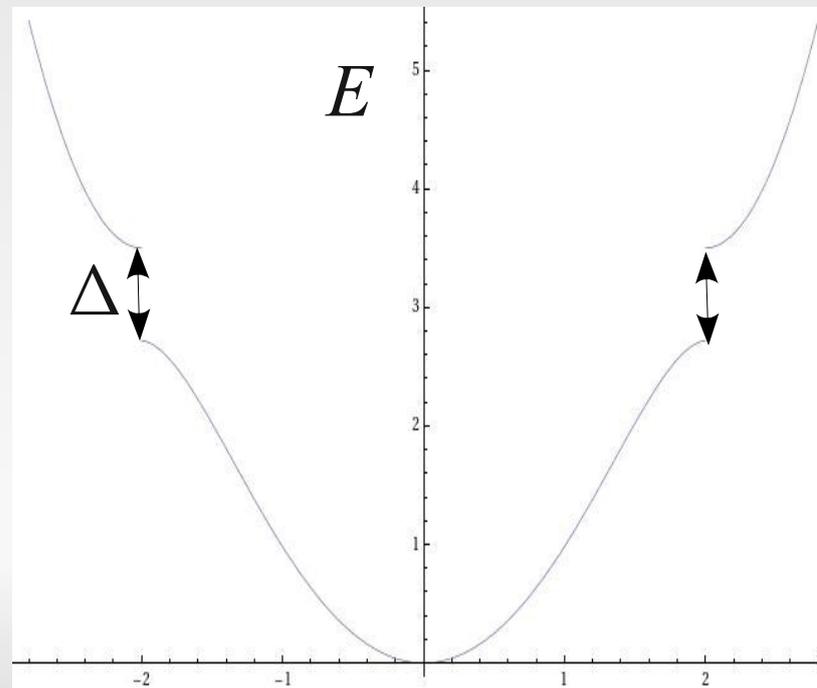


Metais, Isoladores & Semicondutores

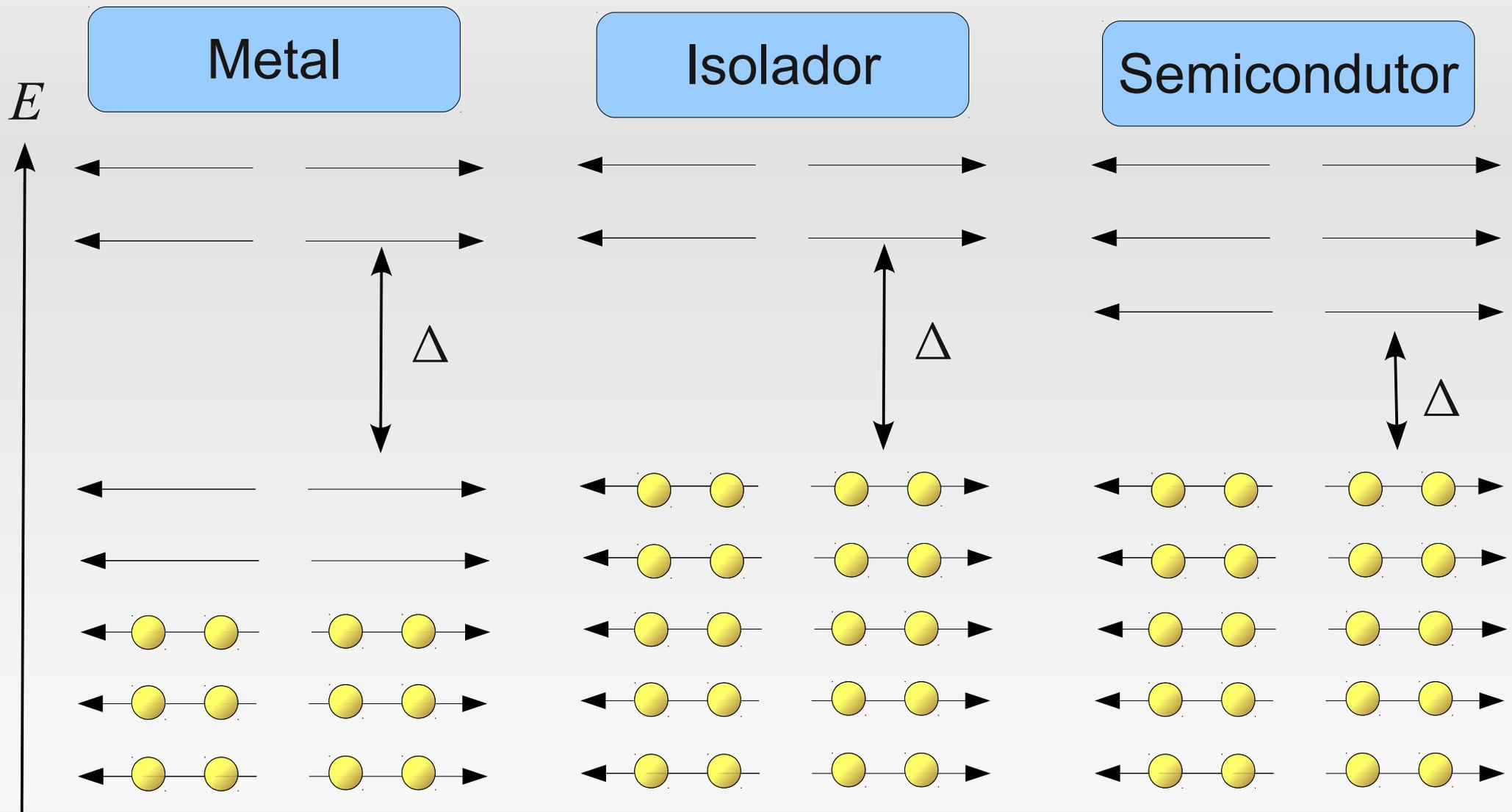
- Efeito do cristal é importante quando $\lambda = 2a$



- Surge hiato de energia



Metais, Isoladores & Semicondutores



Metais, Isoladores & Semicondutores

Metal

Resistência tem origem em choques com:

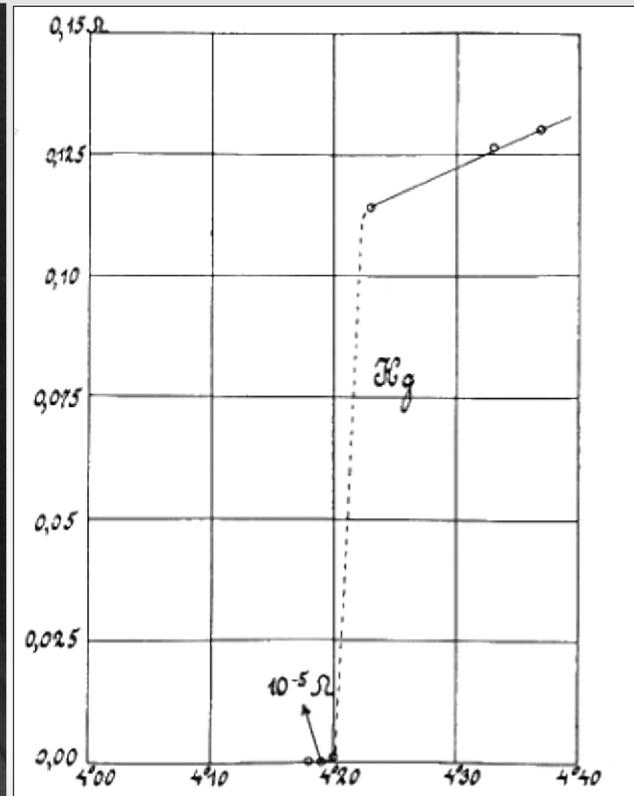
- Impurezas
- Vibrações térmicas da rede cristalina

Semicondutor

- Energia térmica é suficiente para promover electrões para banda de condução
- Dopar com outros átomos → aumenta condutividade
- Esta na base da electrónica moderna: **junções p-n, transístor**

Supercondutividade

- Descoberta em 1911, por Kammerlingh Onnes
- Resistividade de mercúrio vai a zero aos 4,2 K

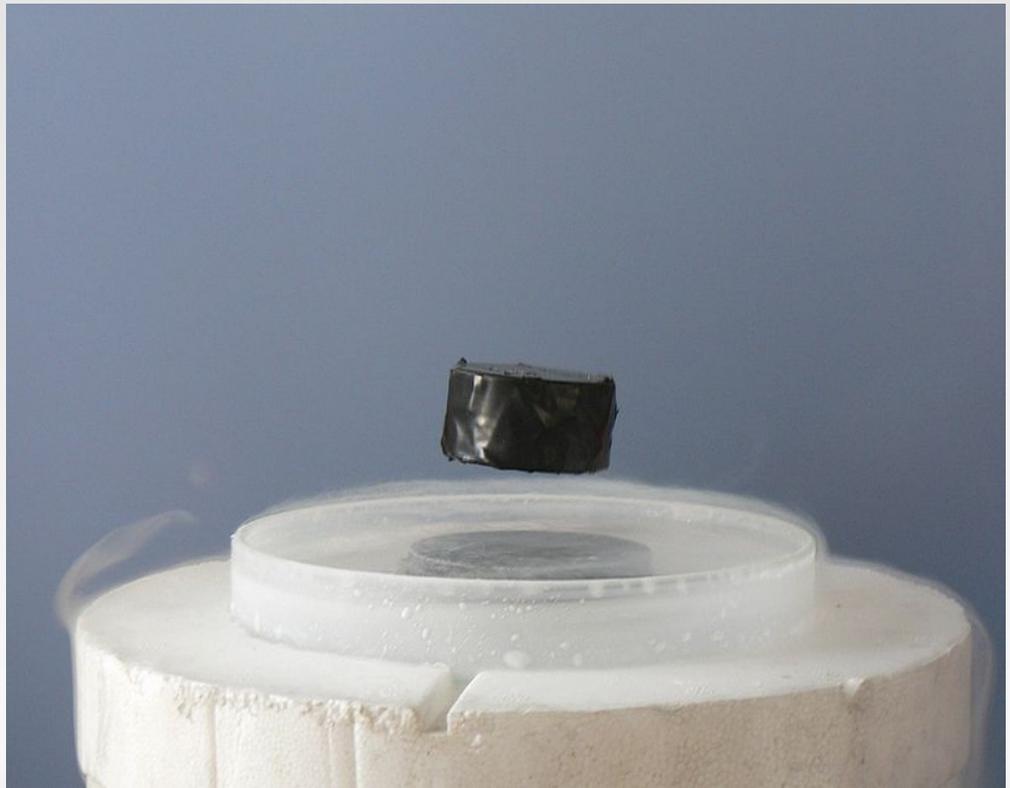
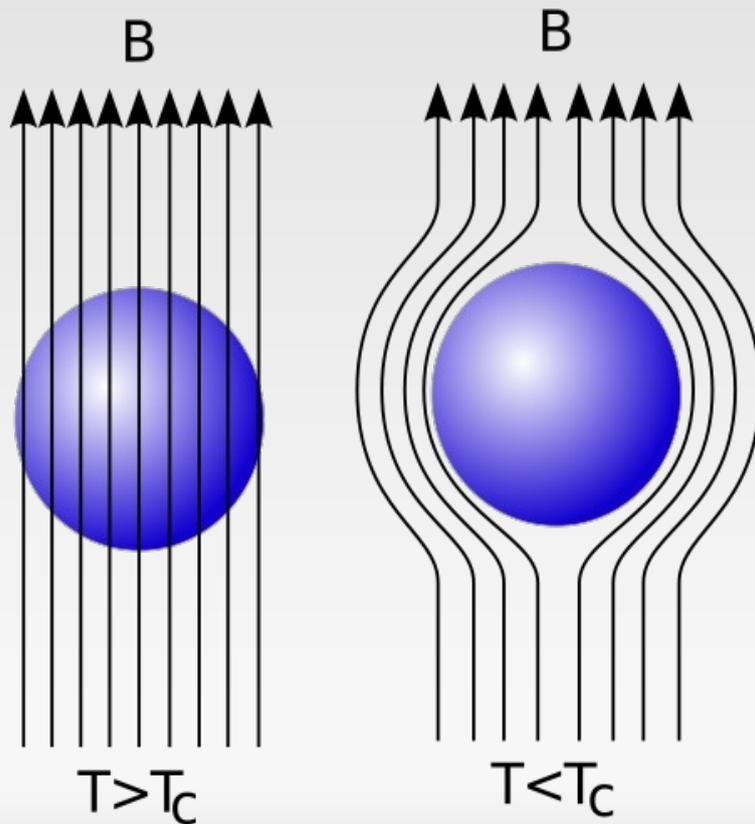


Supercondutividade

- Condutores perfeitos: conseguem manter uma corrente, mesmo sem voltagem aplicada
- Tempo de vida da corrente:
 - Evidência experimental: 100 000 anos
 - Previsões teóricas: superior à idade do universo

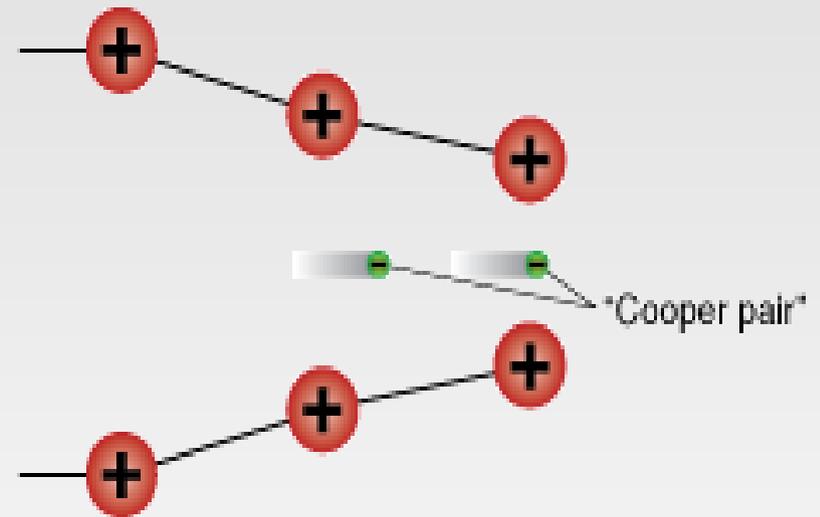
Supercondutividade

- Efeito de Meissner: expulsão de campo magnético

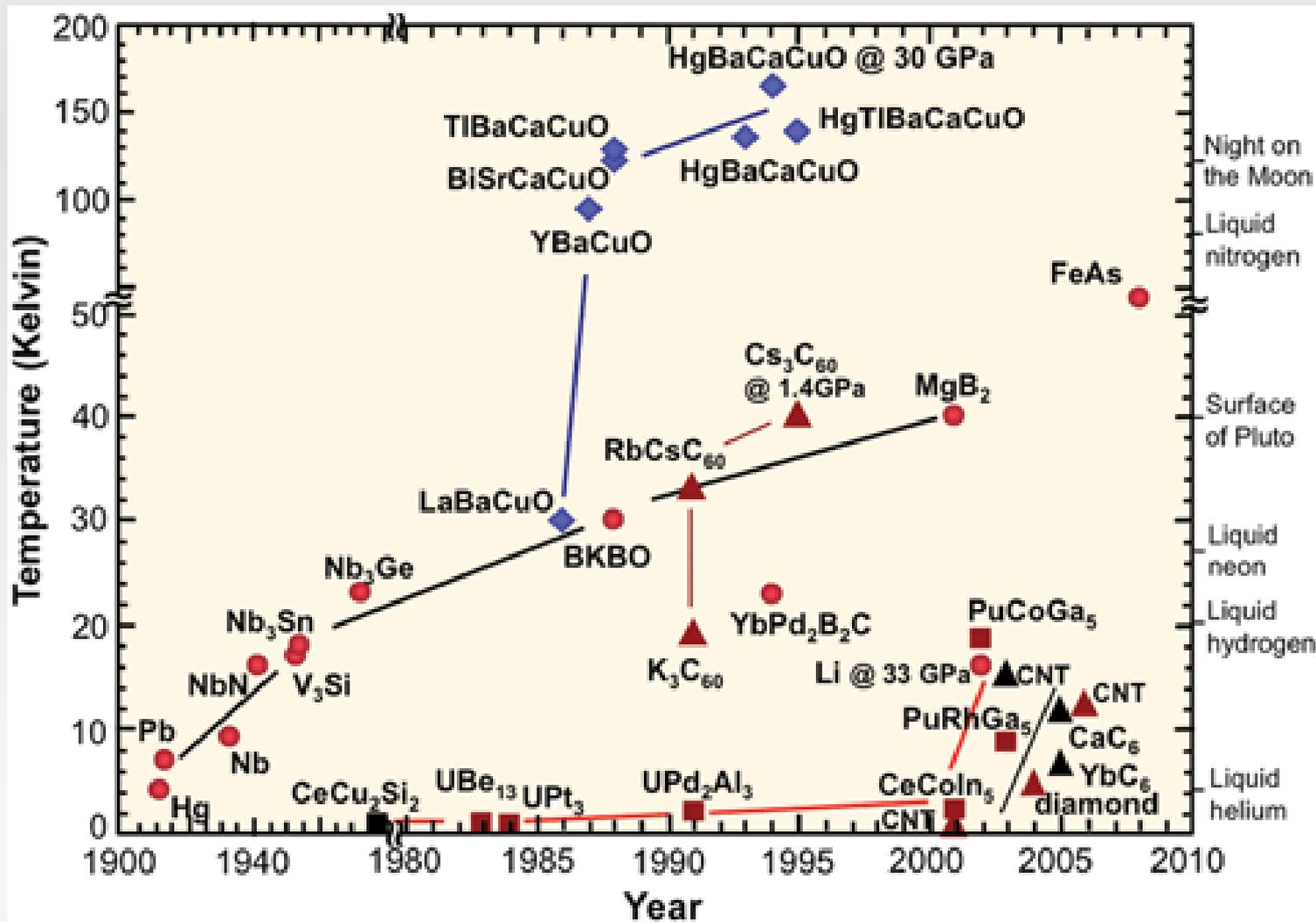


Supercondutividade

- Interações entre electrões → formação de **pares de Cooper**
- Destruir par de Cooper custa energia
- A baixa temperatura, energia térmica não consegue destruir par
- Pares de Cooper condensam



Supercondutividade



Supercondutividade

Aplicações

- Ímãs supercondutores:
 - Ressonância magnética
 - Aceleradores de partículas
- SQUID (Superconducting Quantum Interference Device): magnetómetro



Computação quântica

Computação clássica

- informação é armazenada em **bits**

Estados possíveis: 0 ou 1

Ex: 17 em binário é 10001

Computação quântica

- Informação armazenada em **qubits** (quantum bit)

Estados possíveis: **sobreposições** de 0 e 1

Computação quântica

O que pode ser um qubit?

- Spin de um electrão / núcleo
- Polarização de um fóton
- Níveis de energia de um átomo

Possíveis implementações físicas de um computador quântico:

- Armadilhas de iões
- Ressonância magnética nuclear (NMR)
- Quantum dots
- Computadores quânticos ópticos
- Supercondutores

Computação quântica

Critérios de David DiVincenzo:

- Escalável (aumentar número de qubits)
- Inicializar qubits para certo valor
- Operações (*gates*) mais rápidos do que tempo de decoerência
- Conjunto de operações universal
- Fácil leitura de qubits

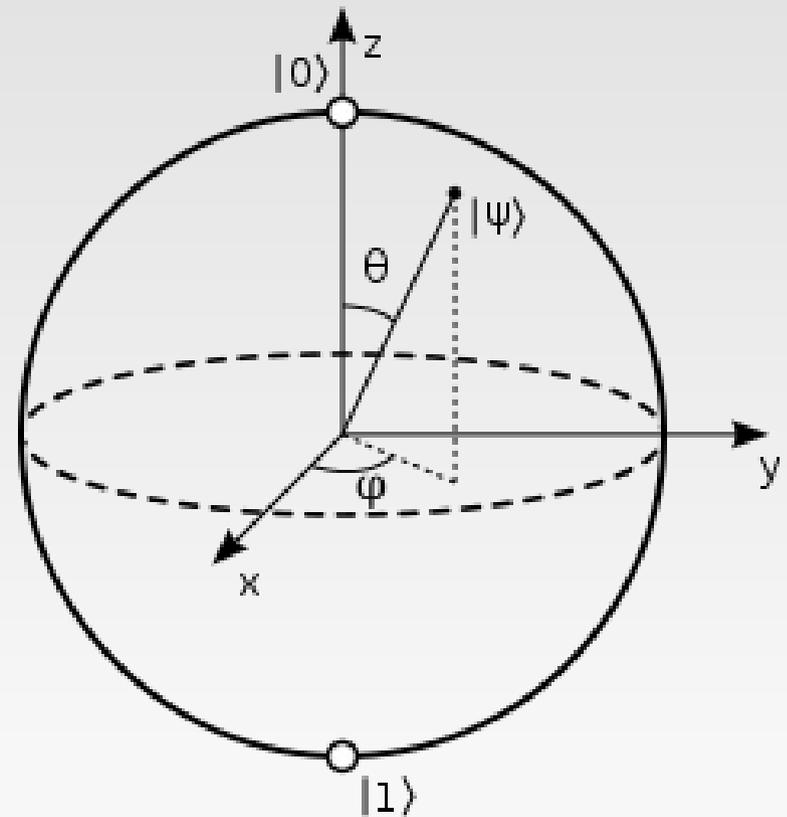
Computação quântica

Estado de um qubit:

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad , \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

Esfera de Bloch:

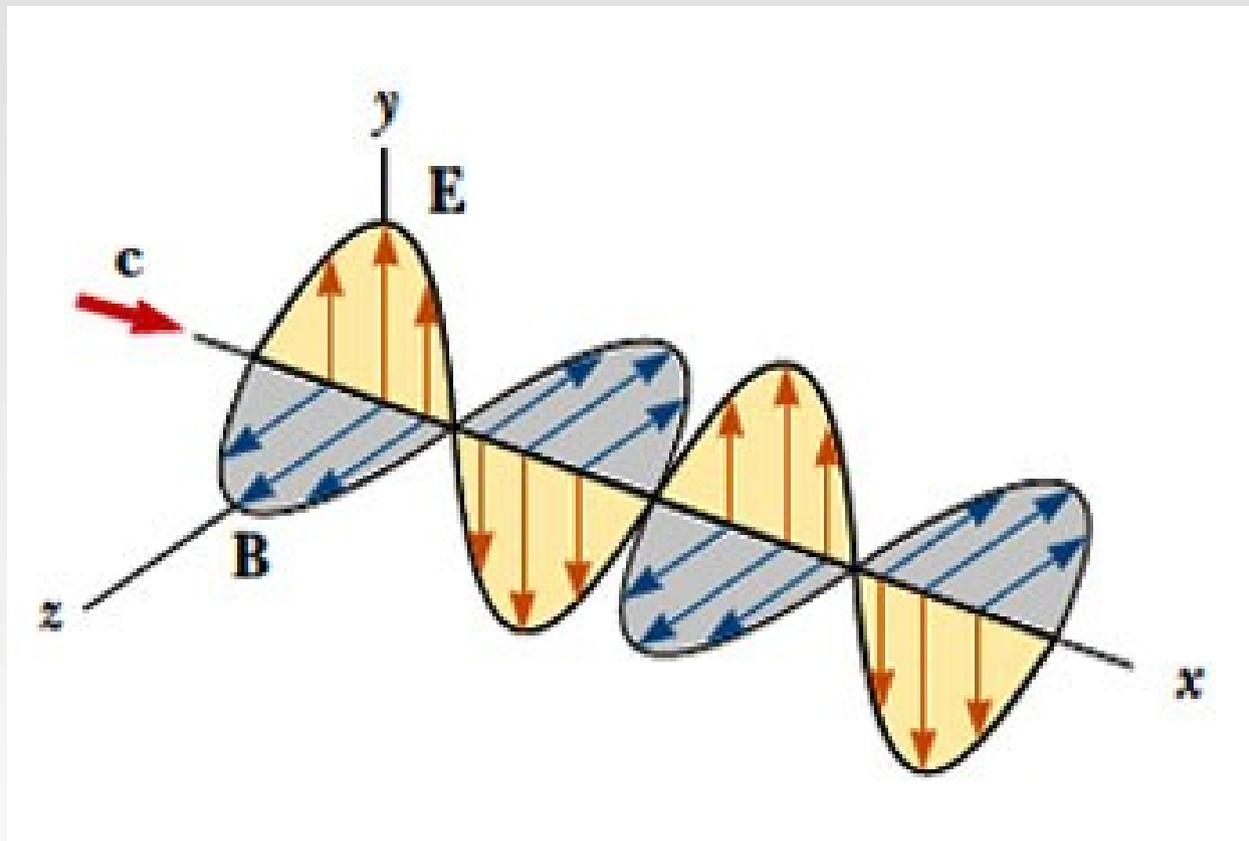
$$|\psi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle + e^{i\phi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|1\rangle$$



Computação quântica

Exemplo de sobreposição quântica:

Polarização de um fóton

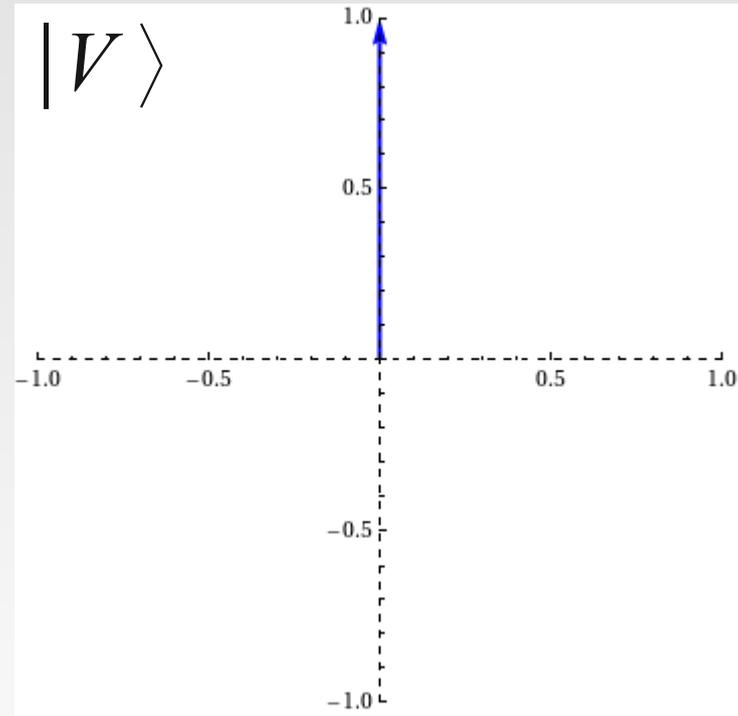
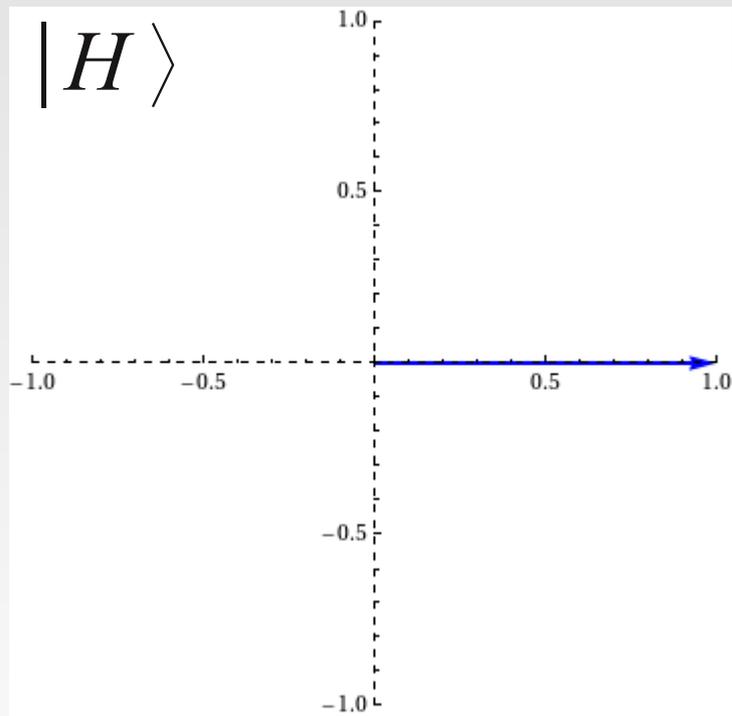


Computação quântica

Exemplo de sobreposição quântica:

Polarização de um fóton

Base Horizontal / Vertical

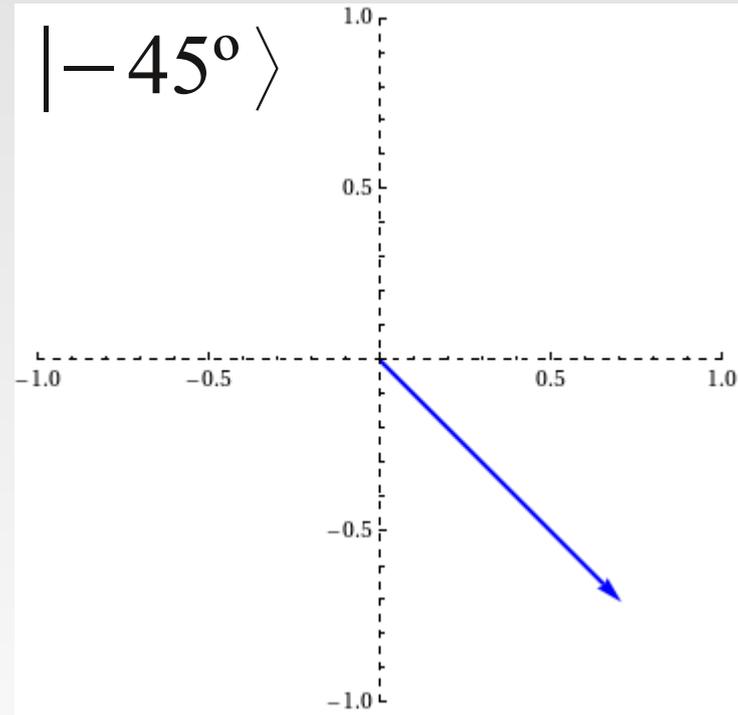
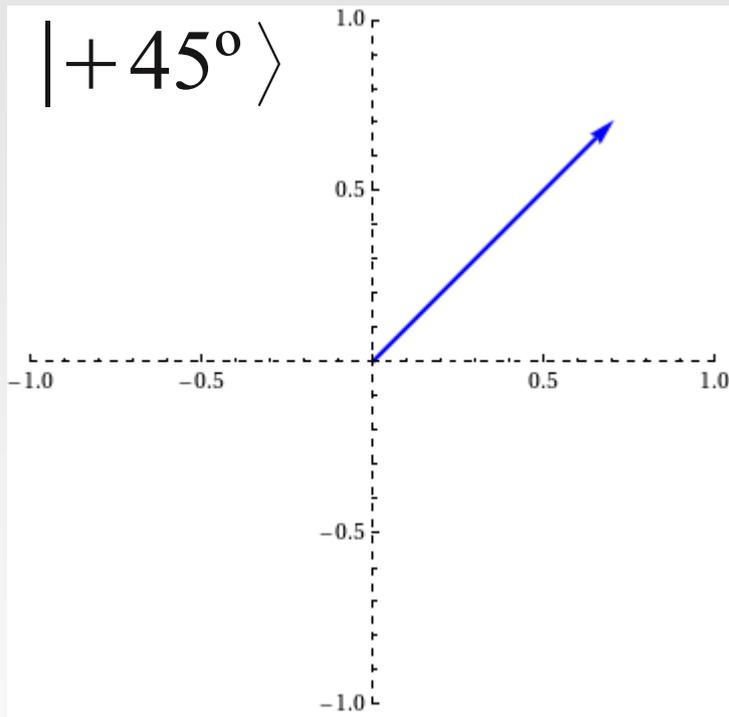


Computação quântica

Exemplo de sobreposição quântica:

Polarização de um fóton

Base $+45^\circ / -45^\circ$

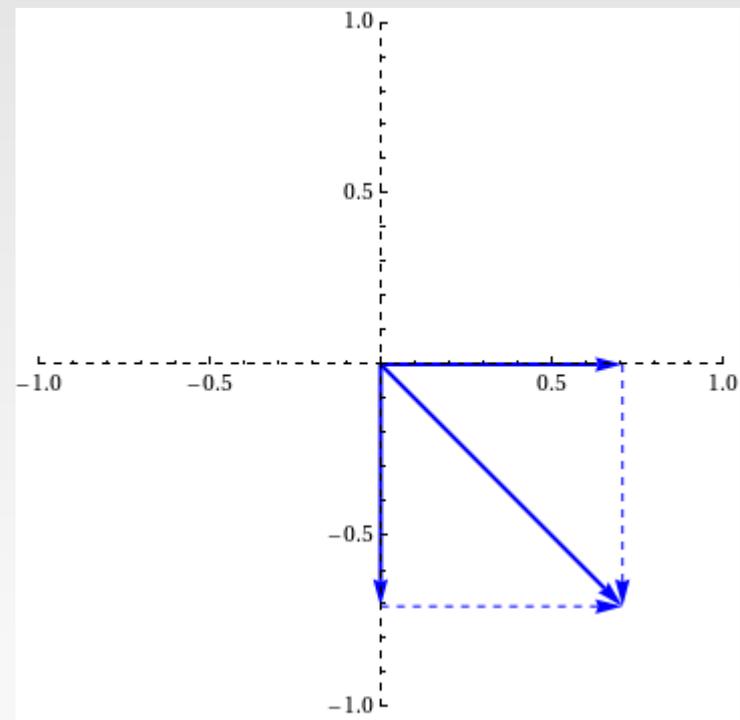
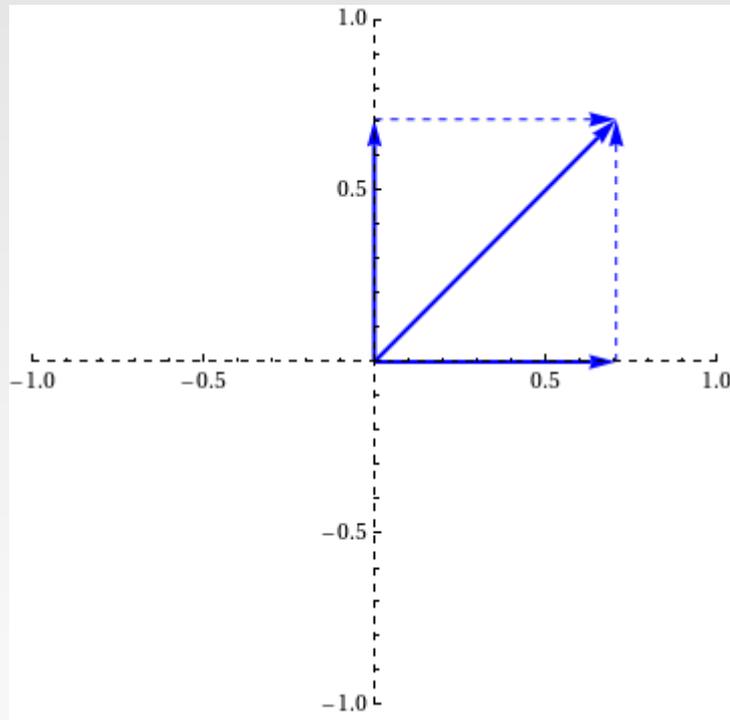


Computação quântica

Exemplo de sobreposição quântica:

Polarização de um fóton

$$|+45^\circ\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle + |V\rangle) \quad | -45^\circ\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle - |V\rangle)$$



Computação quântica

Potenciais usos:

- Algoritmo de Shor: factorização de números
- Algoritmo de Groover: procura numa base de dados
- Simulação quântica de muitos corpos

2001, grupo da IBM
Implementação do algoritmo de Shor:
Conseguem factorizar $15 = 5 \times 3$

Computação quântica

Exemplo acadêmico

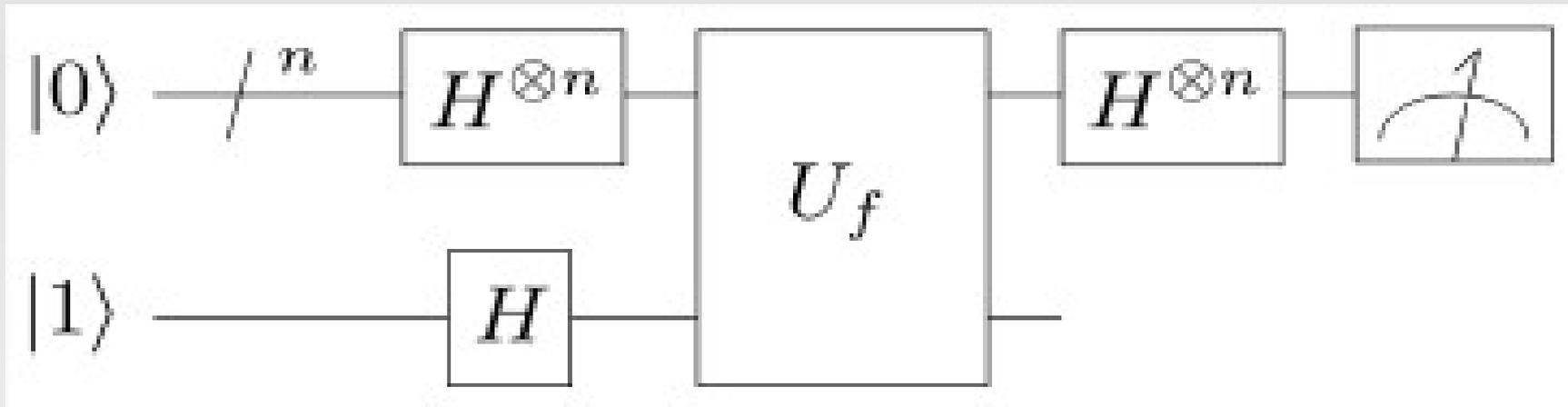
Algoritmo de Deutsch-Jozsa

- Temos uma função, f , o oráculo que lê uma lista X de N bits e devolve 0 ou 1
- Sabemos que f é de um de dois tipos:
 - Constante: mesmo resultado para todas as listas
 - Equilibrado: devolve 0 para metade das listas possíveis e 1 para as restantes

Computador clássico necessita de avaliar f $2^{N-1}+1$ vezes (pior dos casos)

Computador quântico necessita de avaliar f apenas UMA vez!

Computação quântica



Resultado da medição:

$|00\dots 0\rangle \longrightarrow f$ é constante

outro $\longrightarrow f$ é equilibrado

$$H : |0\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle)$$

$$H : |1\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle)$$

Computação Quântica

- Encontrar sistemas físicos que permitam implementar computador quântico
- Desenvolver algoritmos quânticos (que tiram proveito da sobreposição de estados)
- Desenvolver códigos quânticos de correção de erros

Mecânica Quântica é fixe!!!

