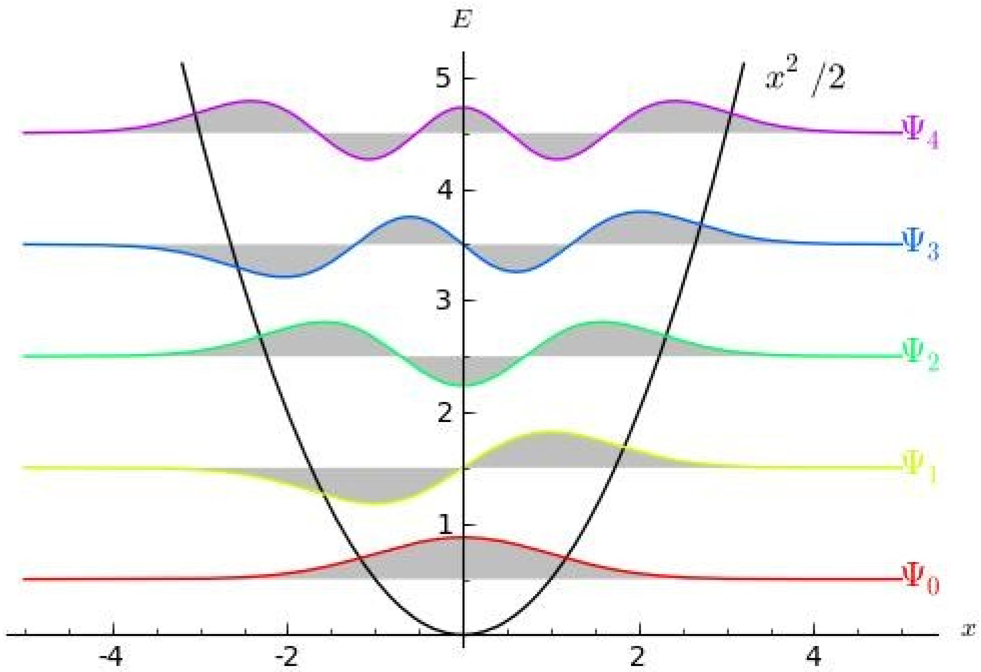
Mecânica Quântica

Aula 8: Interpretação de Born para as Funções de Onda; Princípio da Superposição

Universidade Federal do ABC



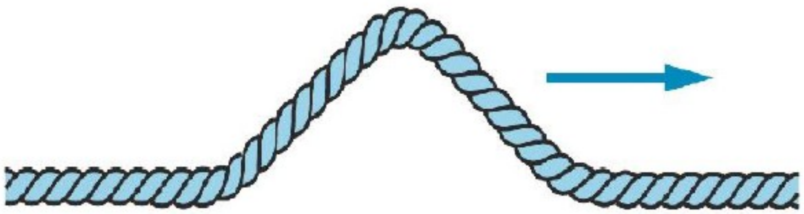
Pieter Westera
pieter.westera@ufabc.edu.br

http://professor.ufabc.edu.br/~pieter.westera/MQ.html

Ondas

O que é uma onda?

Uma variação, periódica ou não,
em alguma grandeza física *a*,
que se propaga pelo espaço.



Exemplos: Ondas sonoras: variações na pressão do ar,
Ondas eletromagnéticas: campos elétrico e magnético,
etc.

$$\boxed{\frac{\partial^2 a}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 a}{\partial t^2}}$$

Ela satisfaz a Equação de Onda:
que é derivada dos processos
que causam a propagação
(para ondas sonoras, as interações entre as partículas do ar, para ondas eletromagnéticas, uma combinação das Leis de Maxwell, ..)

Ondas

$$\frac{\partial^2 a}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 a}{\partial t^2}$$

O que é uma onda?

Soluções são:

$a_+(x,t) = g(x - vt)$: onda de forma $g(x)$ propagando-se com velocidade v na direção $+x$, e

$a_-(x,t) = h(x + vt)$: " $h(x)$ " na direção $-x$.

No caso tri-dimensional, a segunda derivada é o operador laplaciano,

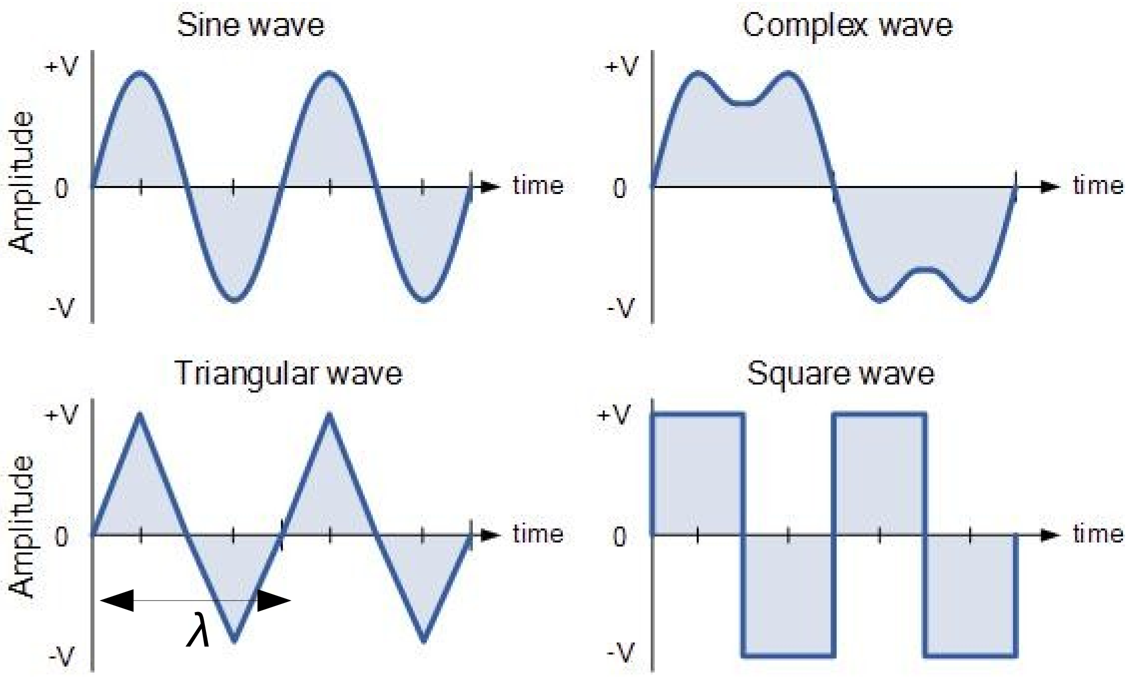
$\Delta = \nabla^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$ (=> FVV)

Neste caso, as soluções são ondas propagando-se com velocidade v em qualquer direção.

Ondas

Ondas Periódicas

Um caso interessante são ondas periódicas.



São ondas, para aquelas vale

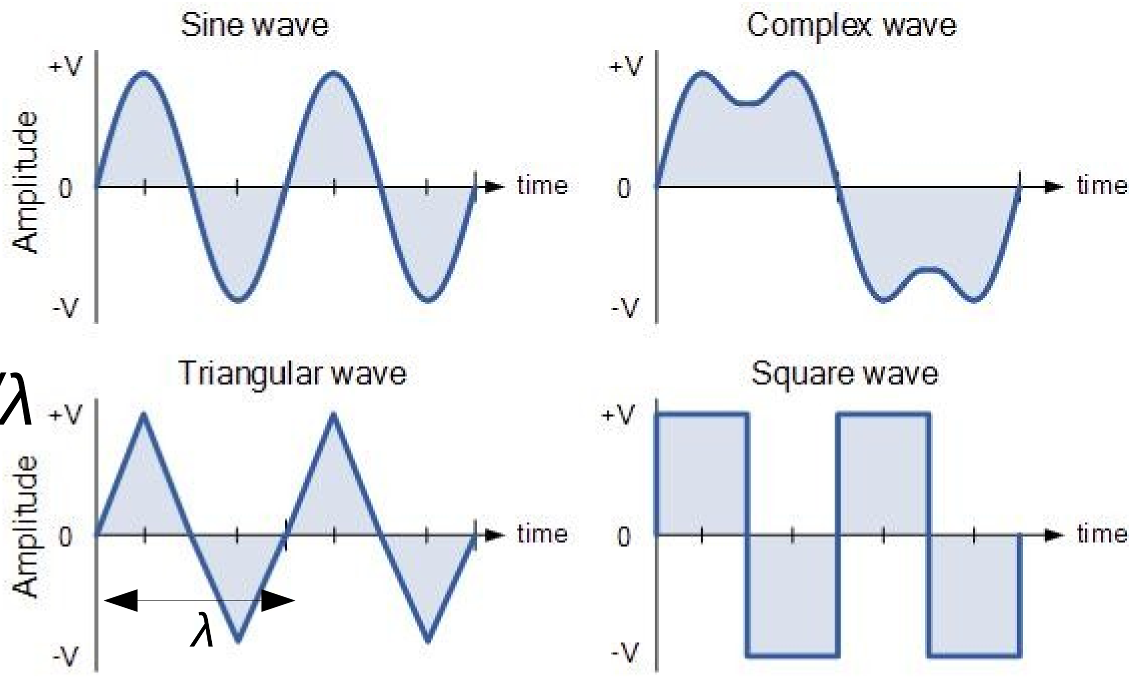
$$a(x, t) = a(x + n\lambda, t),$$
$$n = 1, 2, 3, \ldots$$

definimos como comprimento de onda λ, a menor distância que realiza isto.

(Qualquer múltiplo inteiro de λ também realiza isto.)

Ondas

Ondas Periódicas



Então: sendo o comprimento de onda λ,

Definimos como número de onda $k := 2\pi/\lambda$

Em uma dada posição fixa, a grandeza a oscila com período $T = \lambda/v$, isto é, com frequência $\nu = 1/T = v/\lambda$

Ainda definimos a frequência angular $\omega = 2\pi\nu = 2\pi/T$.

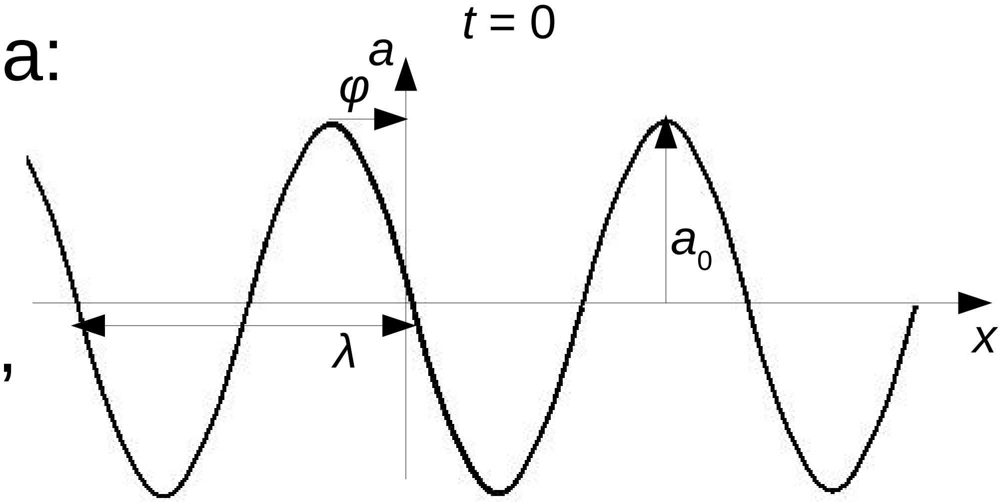
Para ondas propagando-se na direção $-x$, $v < 0$, k e λ são negativos.

Ondas

Ondas Senoidais

Caso mais interessante ainda:

$$a = a_0 \cos(kx - \omega t + \varphi)$$
$$= a_0 \cos 2\pi(x/\lambda - t/T + \varphi)$$
$$= a_0 \cos [2\pi/\lambda \cdot (x - vt) + \varphi],$$



onde

a_0 é a amplitude da onda,

φ é chamado fase

(o deslocamento do pico da onda até $x = 0$ em $t = 0$).

Ondas

Interferência

Quando duas (ou mais) ondas a_1 e a_2 passam pela mesma região do espaço, elas se sobrepõem:

$$a(x, t) = a_1(x, t) + a_2(x, t)$$

fenômeno chamado interferência.

No caso de duas ondas senoidais temos

$$a(x, t) = a_{1,0} \cos(k_1 x - \omega_1 t + \varphi_1) + a_{2,0} \cos(k_2 x - \omega_2 t + \varphi_2)$$

Usando a identidade trigonométrica
$\cos\alpha + \cos\beta = 2 \cdot \cos[(\alpha + \beta)/2] \cdot \cos[(\alpha - \beta)/2]$
vamos agora achar umas propriedades interessantes de ondas em interferência.

Ondas

Interferência: ondas com a mesma frequência

Se as ondas têm a mesma frequência e se propagam na mesma direção: $\nu_1 = \nu_2 =: \nu$
=> $\omega_1 = \omega_2 =: \omega$, $\lambda_1 = \lambda_2 =: \lambda$, $k_1 = k_2 =: k$,

e têm a mesma amplitude
$a_{0,1} = a_{0,2}$,
a soma dá

$a = a_0 \cos(kx - \omega t + (\varphi_1 + \varphi_2)/2)$,
onde $a_0 = 2 \cdot \cos((\varphi_1 - \varphi_2)/2) \cdot a_{0,1}$

=> uma onda com os mesmos frequência, comprimento de onda, etc. que as duas ondas a_1 e a_2.

Ondas

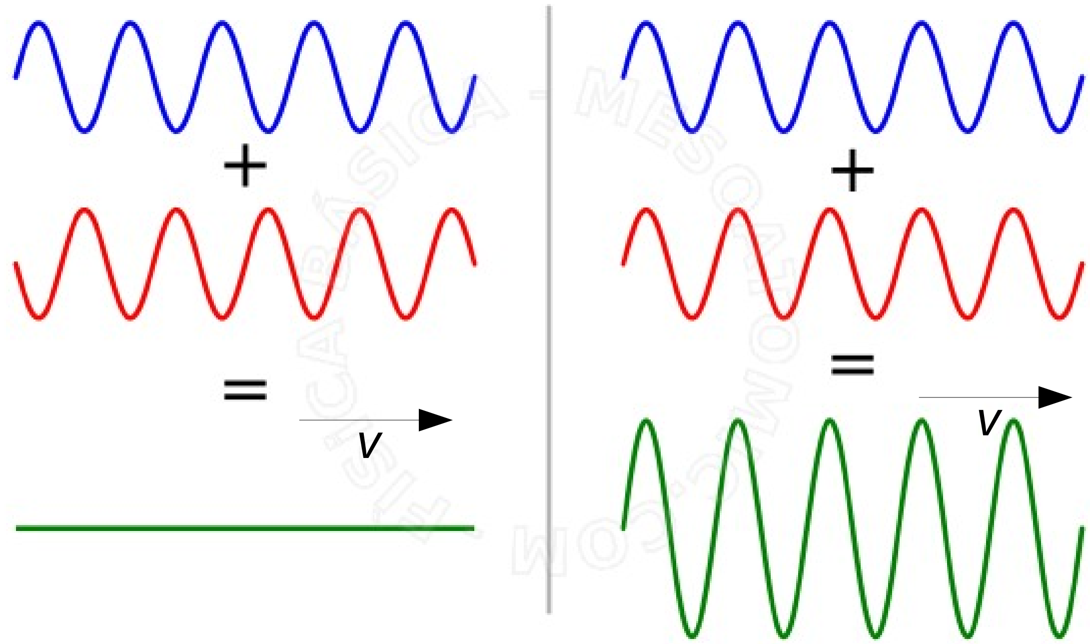
Interferência: ondas com a mesma frequência

$a = a_0 \cos(kx - \omega t + (\varphi_1 + \varphi_2)/2)$, onde $a_0 = 2\cos((\varphi_1 - \varphi_2)/2)\, a_{0,1}$

Dois casos especiais:

$\varphi_1 = \varphi_2 + (n + ½)\cdot 2\pi$, exatamente fora de fase

$\varphi_1 = \varphi_2 + n\cdot 2\pi$, exatamente em fase



$a_0 = 0$
interferência destrutiva

$a_0 = 2a_{0,1} = 2a_{0,2}$
interferência construtiva

Ondas

Interferência: ondas com a mesma frequência

$a = a_0 \cos(kx - \omega t + (\varphi_1 + \varphi_2)/2)$, onde $a_0 = 2\cos((\varphi_1 - \varphi_2)/2)\, a_{0,1}$

=> Dependendo da diferença de fase, as ondas se amplificam (interferência construtiva) ou cancelam (interferência destrutiva).

=> Pela intensidade da onda resultante, dá para determinar a diferença de fase entre as ondas a_1 e a_2.

Na interferência de ondas com a mesma frequência e amplitudes diferentes, interferência construtiva e destrutiva também acontecem, mas no caso da destrutiva, o cancelamento não é total.

Ondas

Batimento

Ondas com quase a mesma frequência, $\nu_1 \approx \nu_2$
=> $\omega_1 \approx \omega_2$, $\lambda_1 \approx \lambda_2$, $k_1 \approx k_2$
Para facilitar, tomamos $\nu_1 > \nu_2$, as duas amplitudes iguais, $a_{0,1} = a_{0,2}$, e as fases como zero, $\varphi_1 = \varphi_2 = 0$:

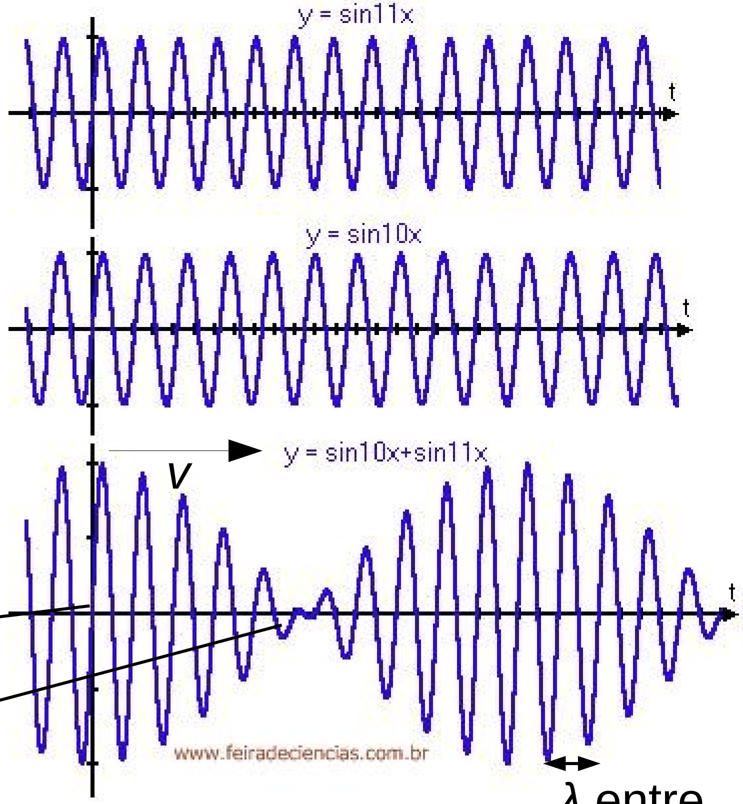
$$a = a_0 \underbrace{\cos\left(\tfrac{1}{2}(k_1+k_2)x - \tfrac{1}{2}(\omega_1+\omega_2)t\right)}_{\substack{\text{onda com frequência } \frac{1}{2}(\nu_1+\nu_2), \\ \text{isto é, similar às ondas } a_1 \text{ e } a_2}} \cdot \underbrace{\cos\left(\tfrac{1}{2}(k_1-k_2)x - \tfrac{1}{2}(\omega_1-\omega_2)t\right)}_{\substack{\text{onda com frequência muito baixa,} \\ \text{isto é, com período/c.d.o. longo}}},$$

onde $a_0 := 2a_{0,1} = 2a_{0,2}$

Ondas

Batimento

=> O resultado é uma onda com frequência/comprimento de onda bem similar às duas ondas originais, cuja amplitude oscila lentamente, fenômeno chamado batimento.



aqui, as duas ondas fazem interferência construtiva,

e aqui, destrutiva

λ entre λ_1 e λ_2

metade de $2\pi/[\frac{1}{2}(k_1 - k_2)]$ $= (\lambda_1^{-1} - \lambda_2^{-1})^{-1}$

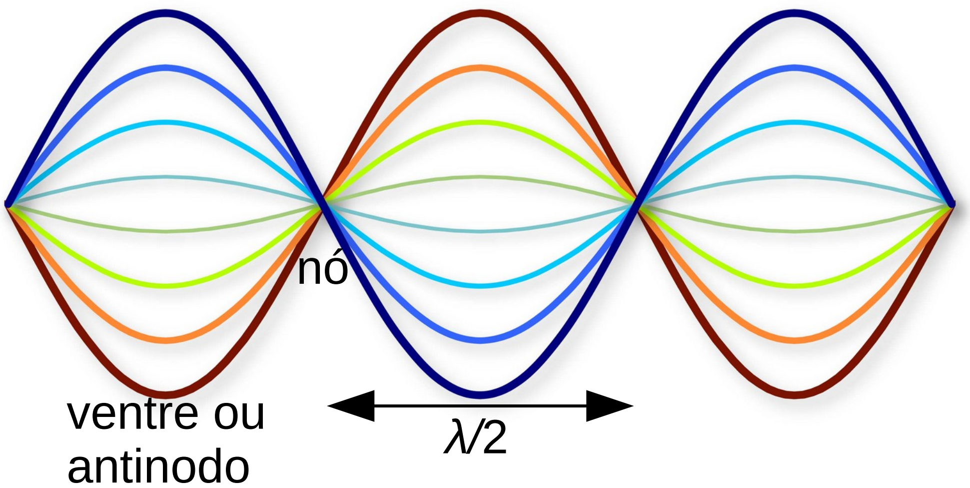
Se as duas ondas têm amplitudes diferentes, há batimento também, mas a amplitude não chega a zero entre dois máximos.

Ondas

Ondas Estacionárias

Ondas com as mesmas frequência, $\omega_1 = \omega_2 =: \omega$,
e amplitude, $a_{0,1} = a_{0,2}$,
mas indo na direção oposta:
$k_1 =: k \Rightarrow k_2 = -k$
tomando $\varphi_1 = \varphi_2 = 0$:

$\Rightarrow a = a_0 \cdot \cos(-\omega t) \cdot \cos(kx)$,
onde $a_0 := 2a_{0,1} = 2a_{0,2}$



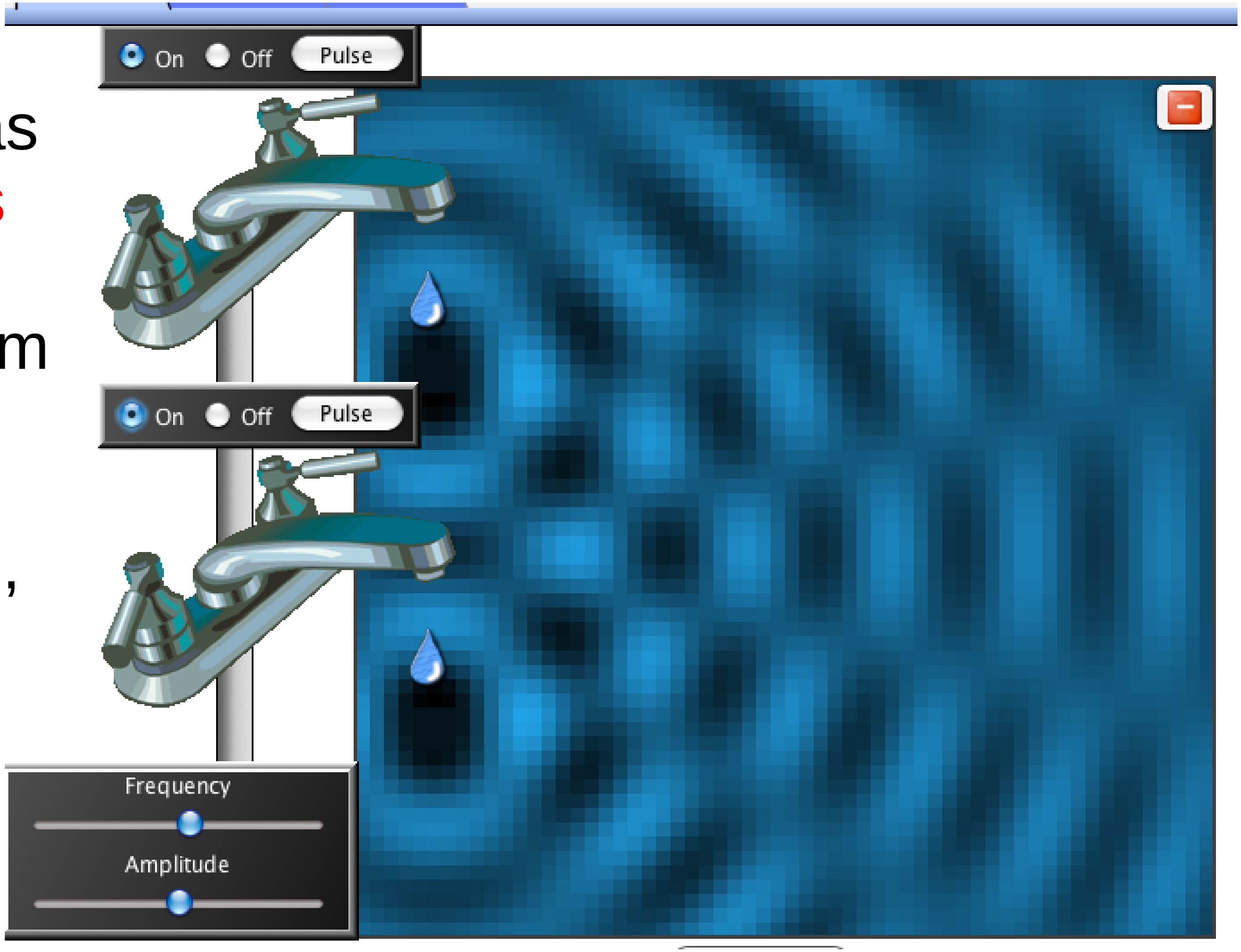
oscila muito em certas posições, os ventres (onde $kx = n\pi$),
e não oscila em outras posições, os nós (onde $kx = (n+½)\pi$).

=> Onda estacionária

Ondas

A Experiência da Fenda Dupla

No plano ou no espaço 3D, duas ondas esféricas com a mesma frequência fazem interferência construtiva em certas posições, e destrutiva em outras, assim produzindo um padrão de interferência.

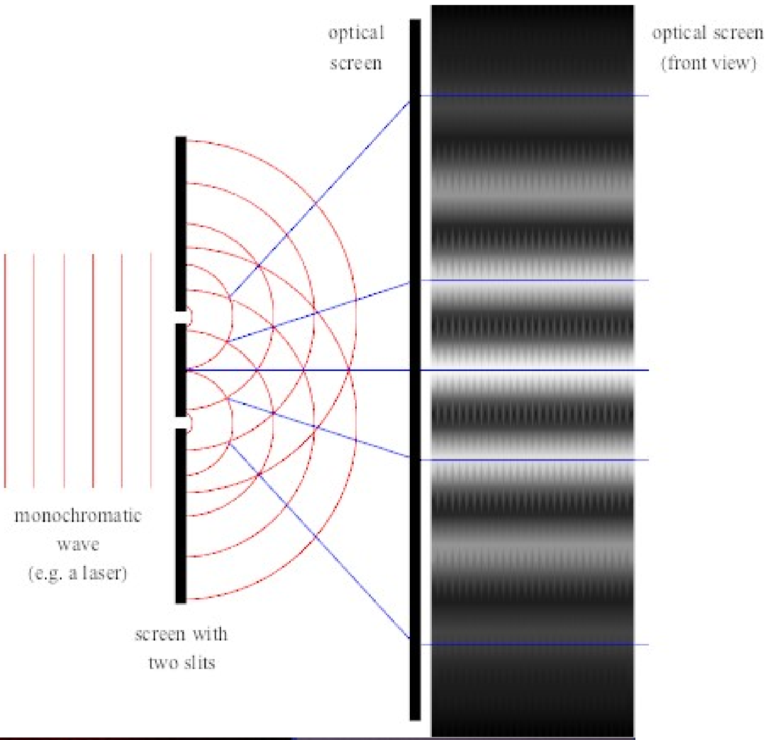


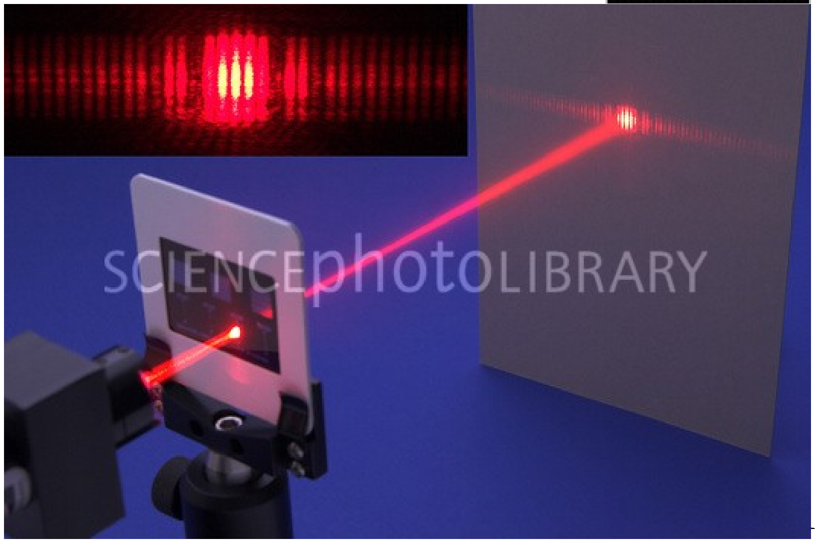
Ondas

A Experiência da Fenda Dupla

Esta situção pode ser gerada passando uma luz monocromática (i.e. um laser) por um par de fendas e colocando uma tela atrás.

Na tela aparece um padrão de interferência ou difração.





Pacotes de Ondas

Voltando ao Batimento

$$a = a_0 \cos\left(\tfrac{1}{2}(k_1+k_2)x - \tfrac{1}{2}(\omega_1+\omega_2)t\right) \cdot \cos\left(\tfrac{1}{2}(k_1-k_2)x - \tfrac{1}{2}(\omega_1-\omega_2)t\right),$$

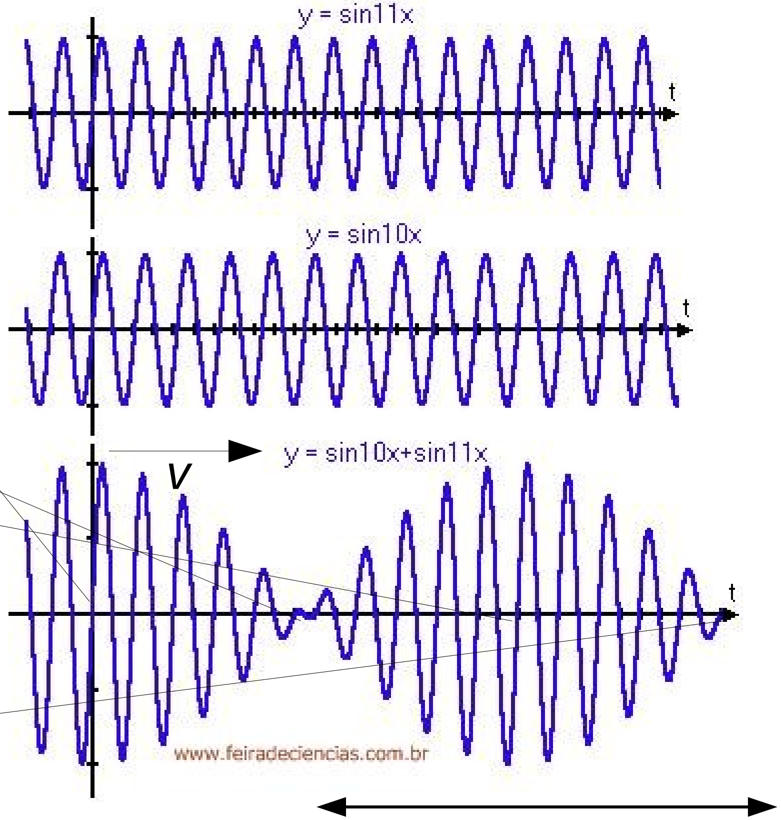
aqui, as duas ondas fazem interferência construtiva, por estarem em fase (diferença de fase 0)

e aqui, destrutiva, por estarem fora de fase (diferença de fase π)

aqui, elas fazem interferência construtiva de novo, por estarem em defasados por um comprimento de onda (diferença de fase 2π)

e aqui, destrutiva de novo, por estarem fora de fase de novo (diferença de fase 3π)

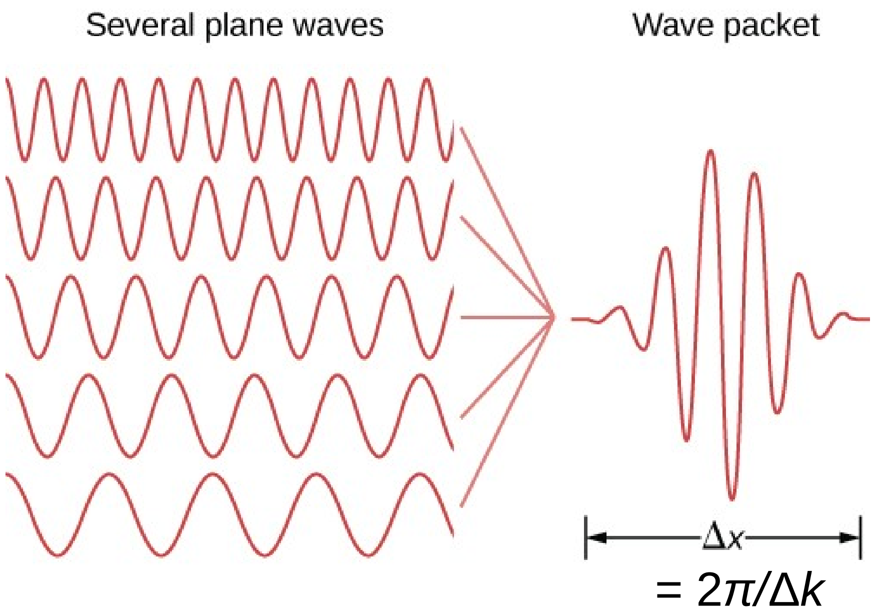
etc.



$2\pi/(k_1-k_2) = 2\pi/\Delta k$

Pacotes de Ondas

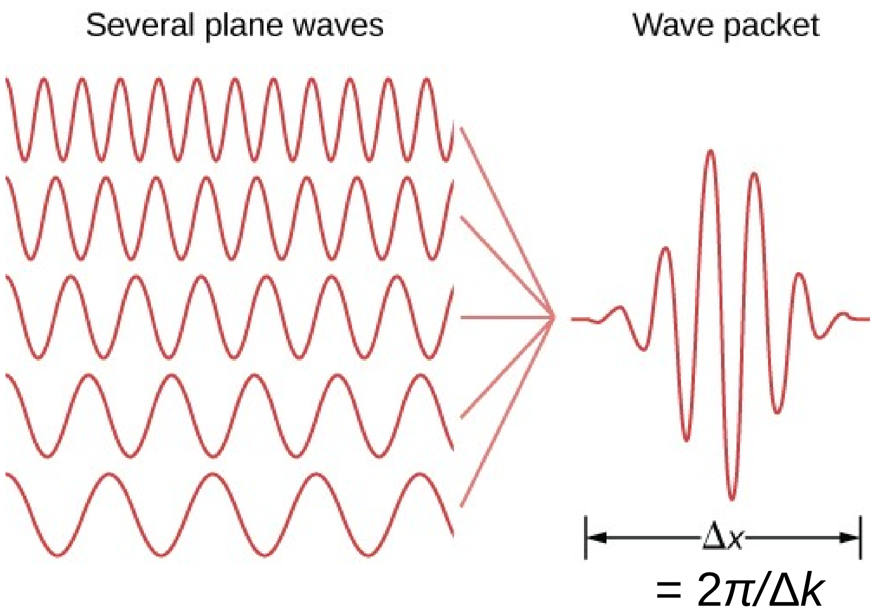
Somamos agora, além de a_1 e a_2, todas as ondas com número de onda entre k_1 e k_2, isto é, todas as ondas numa faixa Δk (centrada em $k := ½(k_1 + k_2)$) o que chamaremos de pacote de ondas.



Agora as ondas estarão em fase apenas uma vez. Lá, onde a_1 e a_2 estão em fase de novo (defasados por um comprimento de onda), as ondas intermediárias estão defasados por frações de um comprimento de onda e se cancelam com a_1 e a_2 e entre sí.

Pacotes de Ondas

=> Um pacote de ondas com números de onda numa faixa de largura Δk é localizado numa região de largura $\Delta x = 2\pi/\Delta k$.



Interpretando o pacote de ondas como uma partícula/onda com uma incerteza intrínseca no número de onda de Δk e uma incerteza na posição de Δx, podemos dizer:
Quanto melhor definido é o número de onda da partícula/onda, tanto menos bem definida é a sua posição.

Pacotes de Ondas

Os dois casos extremos:

- $\Delta x = 0 \Rightarrow \Delta k = \infty$:

A posição é bem definida, mas o número de onda totalmente indefinido, i. e. as propriedades ondulatórias são totalmente perdidas

=> partícula clássica

- $\Delta k = 0 \Rightarrow \Delta x = \infty$:

O número de onda é bem definido, mas a posição é totalmente indefinida, i. e. as propriedades corpusculares são totalmente perdidas

=> onda clássica

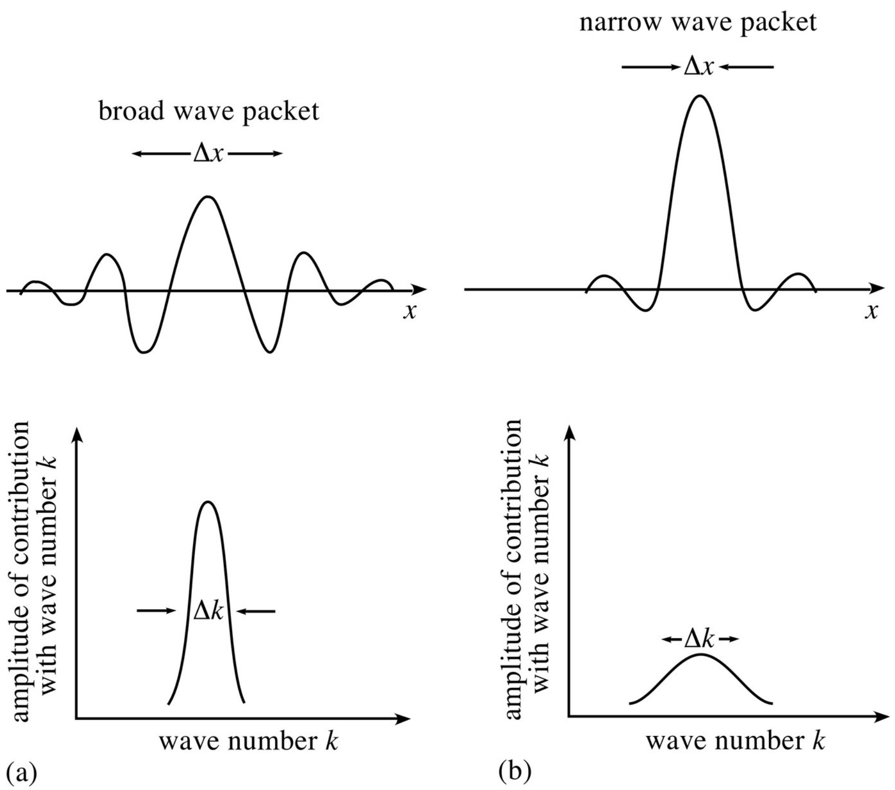
Podemos reformular a frase do slide anterior:

Quanto mais se manifesta a natureza corpuscular do pacote, tanto menos se manifesta a natueza ondulatória, e vice-versa.

=> Dualidade onda <=> partícula

Pacotes de Ondas

Na prática, a distribuição de números de onda de um pacote de ondas nunca é da forma “constante dentro de uma faixa Δk”, mas é mais para “distribuição gaussiana com largura Δk”.



No caso de uma gaussiana perfeita dá para calcular, que a largura da distribuição de posições é $\Delta x = 1 / 2\Delta k$,

$\Delta x{\cdot}\Delta k = ½$

Para distribuições gerais vale: $\Delta x{\cdot}\Delta k \geq ½$

Pacotes de Ondas

Em lugar de olhar pra onda em função da posição em um momento fixo, podemos olhar para ela em função do tempo numa posição fixa.

Em relação ao tempo, a frequência angular faz o papel que o número de onda faz em relação à posição, e podemos repetir todas as refleções dos últimos slides, substituindo x por t e k por ω.

De maneira análoga achamos: $\Delta t \cdot \Delta\omega \geq \frac{1}{2}$

onde $\Delta\omega$ é a largura da faixa (a incerteza) de frequências angulares do pacote de ondas, e Δt, o tempo que o pacote leva para passar pela posição fixa (a incerteza no momento de passagem).

Pacotes de Ondas

$\Delta x \cdot \Delta k \geq ½$
$\Delta t \cdot \Delta \omega \geq ½$

Multiplicando os dois por $\hbar$, obtemos

$\Delta x \cdot \Delta k\hbar = \Delta x \cdot \Delta(\hbar k) \geq \hbar/2$
$\Delta t \cdot \Delta \omega\hbar = \Delta t \cdot \Delta(\hbar\omega) \geq \hbar/2$

Mas, pelas relações de de Broglie,
$\hbar k = \hbar \cdot 2\pi/\lambda = h/\lambda = p$
e $\hbar\omega = \hbar \cdot 2\pi\nu = h\nu = E$

=> $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$
$\Delta t \cdot \Delta E \geq \hbar/2$

O princípio de incerteza para x e p e para t e E!

A Função de Onda

Se o elétron é uma onda, qual é esta onda?

Vimos nas últimas aulas, que a posição de uma partícula não é definida com precisão.

Num dado momento *t*, ela se encontra com certa probabilidade no lugar x_1, com certa probabilidade no lugar x_2, etc.
A probabilidade de estadia da partícula no momento *t* depende da posição.

Ela é descrita por uma função, que depende do tempo e da posição, a função de onda $\Psi(x, t)$ (letra grega psi maiúscula).

Frequentemente estamos apenas interessados na parte espacial, e usamos a função de onda independente do tempo $\psi(x)$ (letra grega psi minúscula).

A Função de Onda

A função de onda é complexa, quer dizer os valores dela têm uma parte real e uma parte imaginária.

A probabilidade de encontrar a partícula (no tempo t) entre as posições x e $x+dx$, $P(x, t)dx$ ou $P(x)dx$, é dada pelo quadrado do módulo da função de onda:

$$P(x, t)dx = |\Psi(x, t)|^2 dx = \Psi^*(x, t)\Psi(x, t)dx \qquad \text{ou}$$

$$P(x)dx = |\psi(x)|^2 dx = \psi^*(x)\psi(x)dx$$

onde $\Psi^*(x, t)$ é a complexamente conjugada de $\Psi(x, t)$, e $\psi(x)^*$ é a complexamente conjugada de $\psi(x)$.

A Função de Onda

Para calcular a probilidade de encontrar a partícula entre as posições *a* e *b*, temos que integrar $P(x(, t))$ de *a* a *b*:

$$P_{a\rightarrow b}(t) = \int_a^b P(x, t)dx = \int_a^b |\Psi(x, t)|^2 dx = \int_a^b \Psi^*(x, t)\Psi(x, t)dx$$

$$P_{a\rightarrow b} = \int_a^b P(x)dx = \int_a^b |\psi(x)|^2 dx = \int_a^b \psi^*(x)\psi(x)dx$$

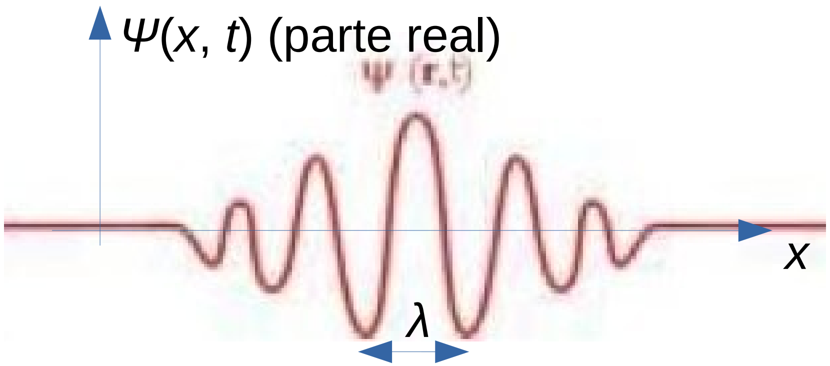
Integrada sobre o espaço inteiro, a probabilidade de estadia da partícula tem que ser 1 (a partícula tem que estar em algum lugar):
Condição de normalização da função de onda:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(x, t)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t)\Psi(x, t)dx = 1$$

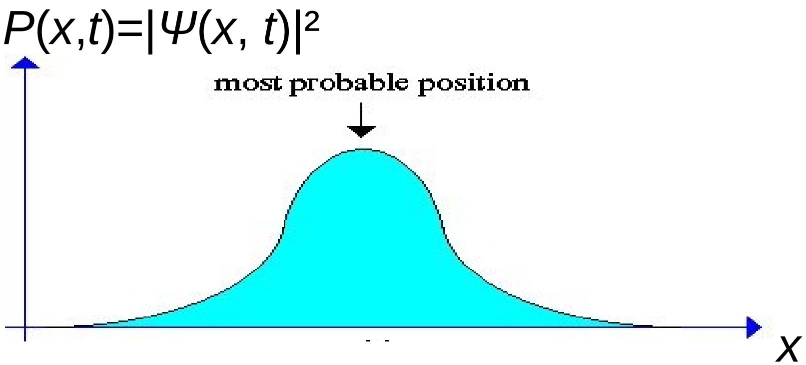
$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = 1$$

A Função de Onda

Exemplo de uma função de onda e a distribuição de probabilade correspondente



=>



Neste caso, os máximos e mínimos da parte real da função de onda coincidem com os pontos zero da parte imaginária, e vice-versa. Como a distribuição de probabilidade é a soma dos quadrados das partes real e imaginária, os mínimos e máximos não aparecem na distribuição de probabilidade.

Todos os fenômenos quânticos que já conhecemos, a quantização da energia, a dualidade onda-partícula, o princípio de incerteza, etc., podem ser deduzidos a partir das propriedades das funções de onda.

A Função de Onda

Por que não se define simplesmente $P(x, t)$ como "função de onda"?

- Justamente, por que P às vezes esconde a natureza ondulatória, mas ela é real e pode ser observada em situações de interferência/difração/ressonância, por exemplo no experimento de Davisson e Germer.

Exemplo: A interferência de duas ondas é descrita por:

$$P(x, t) = |\Psi_1(x, t) + \Psi_2(x, t)|^2,$$

e não por

$$P(x, t) = P_1(x, t) + P_2(x, t) = |\Psi_1(x, t)|^2 + |\Psi_2(x, t)|^2$$

A Função de Onda

Por que não se define simplesmente $P(x, t)$ como "função de onda"?

- A equação para encontrar a função de onda em casos concretos, a equação de Schrödinger (=> aula que vem) serve para achar $\Psi(x, t)$ ou $\psi(x)$.

Não existe nenhuma equação para achar $P(x(, t))$ diretamente.

A Função de Onda

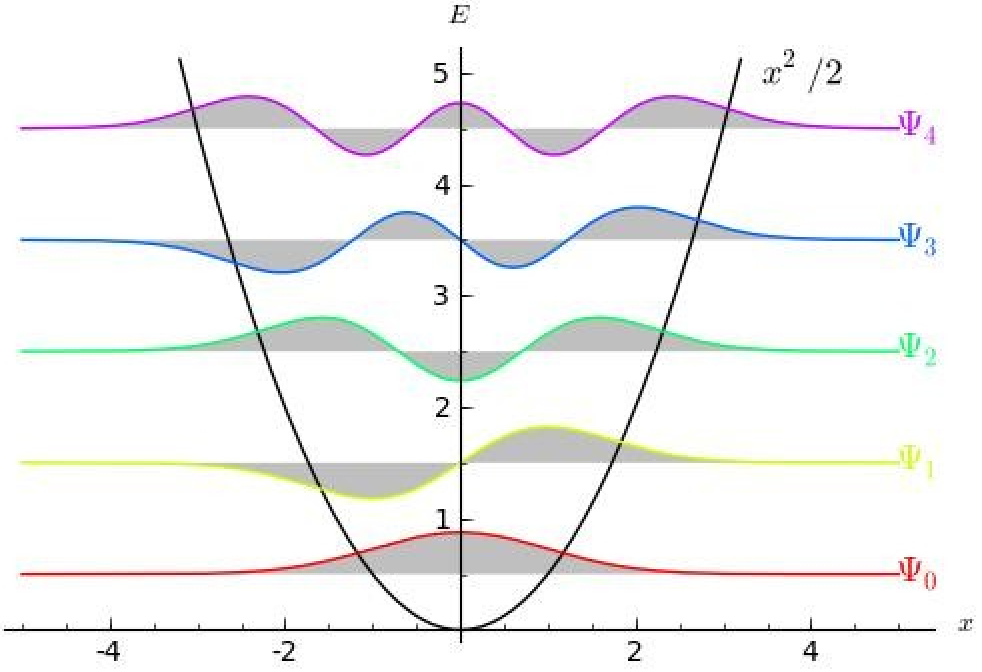
Em muitos casos, especialmente quando estamos interessados na função de onda independente do tempo $\psi(x)$, conseguimos nos livrar da parte imaginária. Frequentemente, ela entra apenas como "fator de fase" $e^{-i\omega t}$, que não interessa na hora de calcular $P(x, t)$, já que

$$|e^{-i\omega t} \cdot \psi(x)|^2 = |e^{-i\omega t}|^2 \cdot |\psi(x)|^2 = 1 \cdot |\psi(x)|^2 = |\psi(x)|^2$$

Física Quântica

FIM PARA HOJE

Universidade Federal do ABC



http://professor.ufabc.edu.br/~pieter.westera/MQ.html