

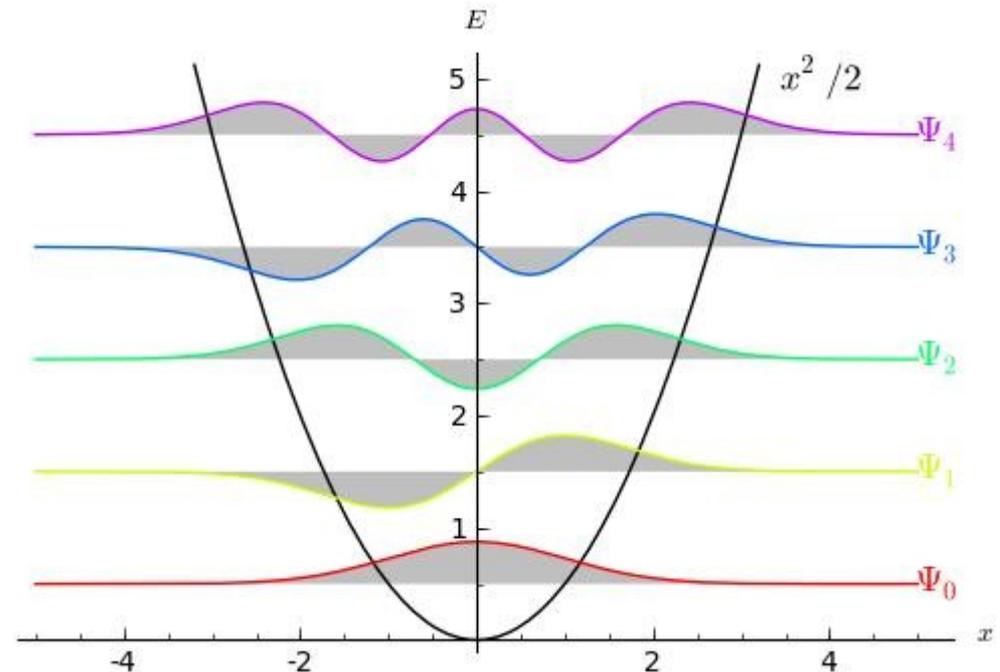
Física Quântica

Aula 5: Princípio de Incerteza, Função de Onda

Pieter Westera
pieter.westera@ufabc.edu.br



Universidade Federal do ABC



<http://professor.ufabc.edu.br/~pieter.westera/Quantica.html>

Relações de Indeterminação

Supondo que uma **partícula/onda** pode ser descrita como **pacote de ondas**, podemos usar as **relações de deBroglie** para traduzir o **número de onda** em **momento linear** e **frequência** (angular) em **energia** (total):

$$p = h/\lambda = hk/2\pi = \hbar k \text{ e}$$

$$E = h\nu = h\omega/2\pi = \hbar\omega$$

As **incertezas** nas duas grandezas viram:

$$\Delta p = \hbar\Delta k$$

$$\Delta E = \hbar\Delta\omega$$

!!! Estas, e Δx e Δt , são incertezas **intrínsecas** nas propriedades de uma partícula/onda, não simplesmente limitações nos aparelhos de medição.

Relações de Indeterminação

Assim, as **relações** achadas no final da última aula,

$$\Delta x \cdot \Delta k \geq \frac{1}{2} \quad \text{e} \quad \Delta t \cdot \Delta \omega \geq \frac{1}{2},$$

se tornam

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2 \quad \text{e}$$

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar/2$$

chamadas

relações de indeterminação ou **princípio de incerteza** de **Heisenberg** (1927).



Werner Heisenberg

Existem relações similares para outros pares de grandezas.

Relações de Indeterminação

No caso tri-dimensional,
a relação de incerteza
posição - momento
são, na verdade, três:

$$\Delta p_x \Delta x \geq \frac{1}{2} \hbar,$$

$$\Delta p_y \Delta y \geq \frac{1}{2} \hbar,$$

$$\Delta p_z \Delta z \geq \frac{1}{2} \hbar.$$



Werner Heisenberg

Relações de Indeterminação

Em palavras:

Quanto **melhor determinada** é a **posição** de uma partícula, tanto **menos bem definida** é o seu **momento linear**.

e

Quanto melhor determinada é a **energia** (por exemplo, a energia de excitação de um estado quântico), tanto menos bem definida é o seu **“tempo”** (neste caso, o tempo de vida do estado).



Werner Heisenberg

Relações de Indeterminação

Em

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2 \text{ e}$$

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar/2$$

se trata de estimativas de ordens de grandeza (o “ $= \hbar/2$ ” vale apenas para distribuições gaussianas de probabilidades de valores, no resto dos casos temos “ $>$ ”), tal que, na prática, frequentemente usamos \hbar em lugar de $\hbar/2$.

Relações de Indeterminação

Algumas Consequências das Relações de Indeterminação

Energia Mínima de uma Partícula em uma “Caixa”

Melhor dito: **confinada** a uma região de dimensão L :

$$\Rightarrow \Delta x = L \quad \Rightarrow \Delta p \geq \hbar/L$$

Mas $\langle \cdot \rangle$ e $\bar{\cdot}$ significam valor médio):

$$(\Delta p)^2 = \langle (p - \bar{p})^2 \rangle = \langle p^2 - 2p\bar{p} + \bar{p}^2 \rangle = \langle p^2 \rangle$$

$$\Rightarrow \langle p^2 \rangle = (\Delta p)^2 = (\hbar/L)^2$$

$\bar{p} = 0$, a partícula não se desloca mediado sobre o tempo

$$\Rightarrow \text{Energia (cinética) média: } E = \langle p^2 \rangle / 2m \geq \hbar^2 / 2mL^2$$

\Rightarrow Uma partícula presa numa “caixa” tem uma **energia mínima** $\neq 0$, chamada **energia de ponto zero**, e está em **movimento**, até em **temperatura absoluta zero** (0 K).

Relações de Indeterminação

Algumas Consequências das Relações de Indeterminação

Tamanho do átomo de Hidrogênio (modelo planetário)

O princípio de incerteza também implica em um **tamanho mínimo** dos **átomos**, isto é, um **raio mínimo** da **órbita(s)** do(s) **elétron(s)**:

Se a posição do elétron é limitada “demais”, a incerteza no seu momento linear, e então, na sua velocidade, fará que logo logo a posição não será mais tão limitada.

Tomamos como medida da **incerteza** na **posição** do elétron o **raio** da sua órbita:

$$\Delta x = r \Rightarrow \langle p^2 \rangle = (\Delta p)^2 \geq \hbar^2 / r^2$$

Estamos interessados no **mínimo**, então usamos $\langle p^2 \rangle = \hbar^2 / r^2$

Relações de Indeterminação

Algumas Consequências das Relações de Indeterminação

Tamanho do átomo de Hidrogênio (modelo planetário)

Usando (\Rightarrow dedução na aula sobre o átomo de Bohr)

$$p = \sqrt{e^2 m_e / 4\pi\epsilon_0 r} :$$

$$\Rightarrow \langle p^2 \rangle = e^2 m_e / 4\pi\epsilon_0 r = \hbar^2 / r^2$$

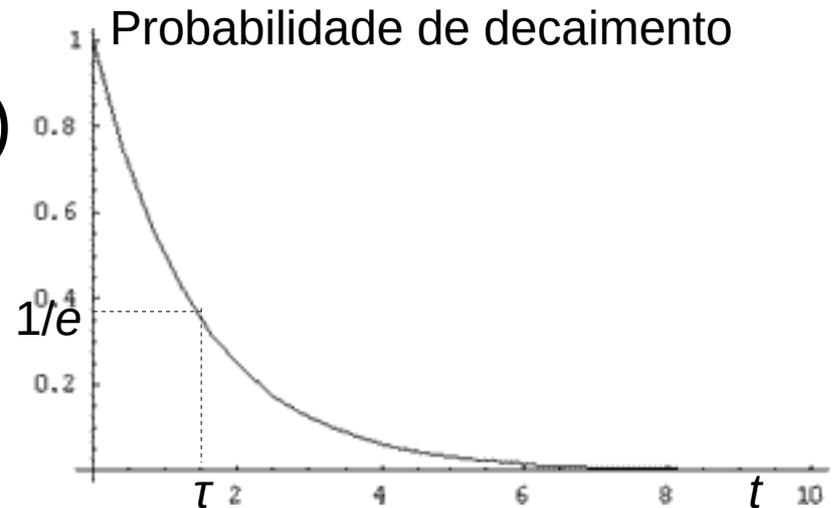
$$\Rightarrow r = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / e^2 m_e = a_0$$

Exatamente o **raio** da **primeira órbita** de **Bohr**!

Relações de Indeterminação

Largura das Linhas Espectrais

Um sistema com níveis de energia (como o átomo de Bohr) que se encontra em um **nível excitado**, se **desexcitará** para o nível fundamental (ou outro nível mais baixo) após um **certo tempo**.



A **probabilidade** desta decaimento cai **exponencialmente** com o **tempo**: $P(t)dt$ prop. $e^{-t/\tau}dt$.

Onde τ é valor médio (ponderado) de todos os possíveis tempos de vida, chamado **vida média**.

O próprio τ também é uma medida pra **incerteza** no **tempo de vida** do **estado**, $\Delta\tau = \tau$.

Relações de Indeterminação

Largura das Linhas Espectrais

Também há uma **incerteza** na **energia** do estado excitado, dada pelo princípio de incerteza $\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar/2$ (ou \hbar), também chamada **largura intrínseca** da linha espectral gerado no decaimento:

$$\Gamma_0 = \Delta E \geq \hbar/\Delta t = \hbar/\Delta\tau = \hbar/\tau,$$

da ordem de 10^{-7} eV para transições atômicas.



Relações de Indeterminação

Largura das Linhas Espectrais

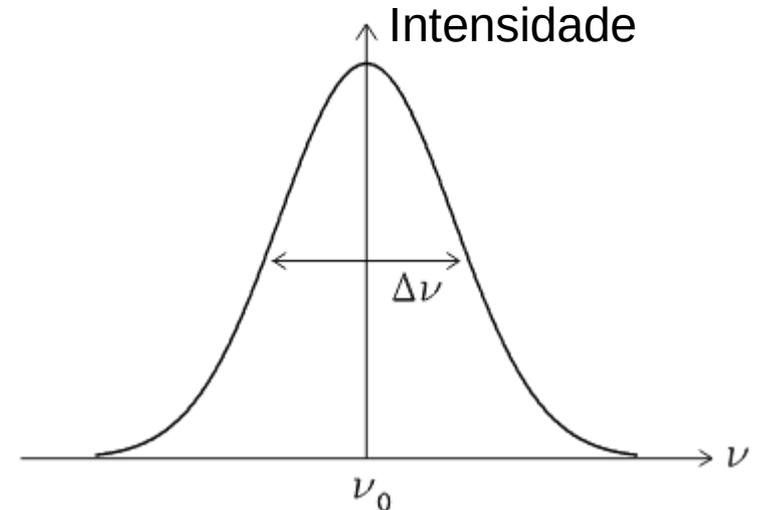
Em termos de **frequência** da linha, a incerteza é (já que $E = h\nu$):

$$\Delta\nu = \Delta E/h = \hbar/h\Delta t = 1/2\pi\Delta t,$$

e no **comprimento de onda** (já que $E = hc/\lambda \Rightarrow \lambda = hc/E$):

$$\Delta\lambda = |d\lambda/dE| \cdot \Delta E = |-hc/E^2| \cdot \hbar/\tau = h\hbar c/E^2\tau = \hbar\lambda/E\tau$$

A largura intrínseca é normalmente desprezível comparada a outros efeitos que alargam linhas espectrais como efeito Doppler, efeito de recuo, colisões atômicas, etc.



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**:

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

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

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 **probabilidade** 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):

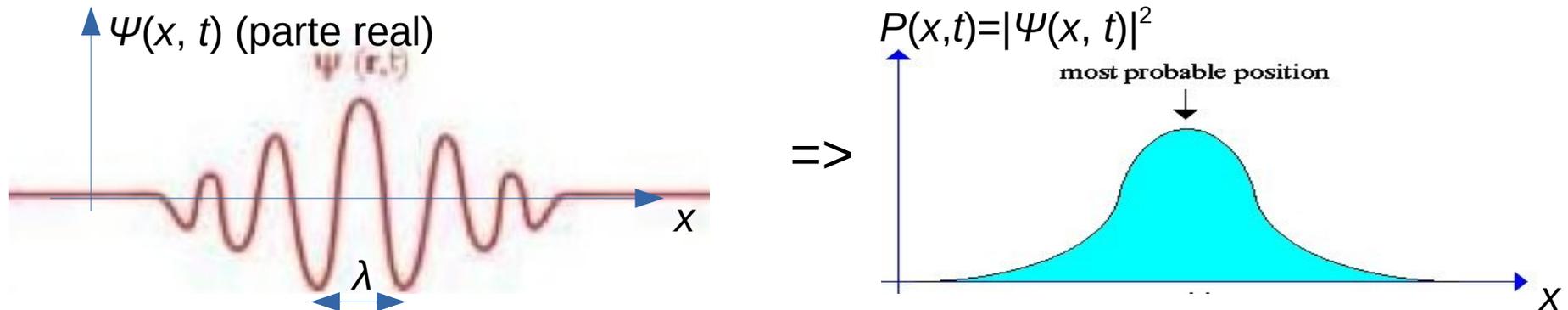
Condição de **normalização** da função de onda:

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

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

A Função de Onda

Exemplo de uma função de onda e a distribuição de probabilidade 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** (\Rightarrow 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

Por que não se define simplesmente $P(x,t)$ como “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

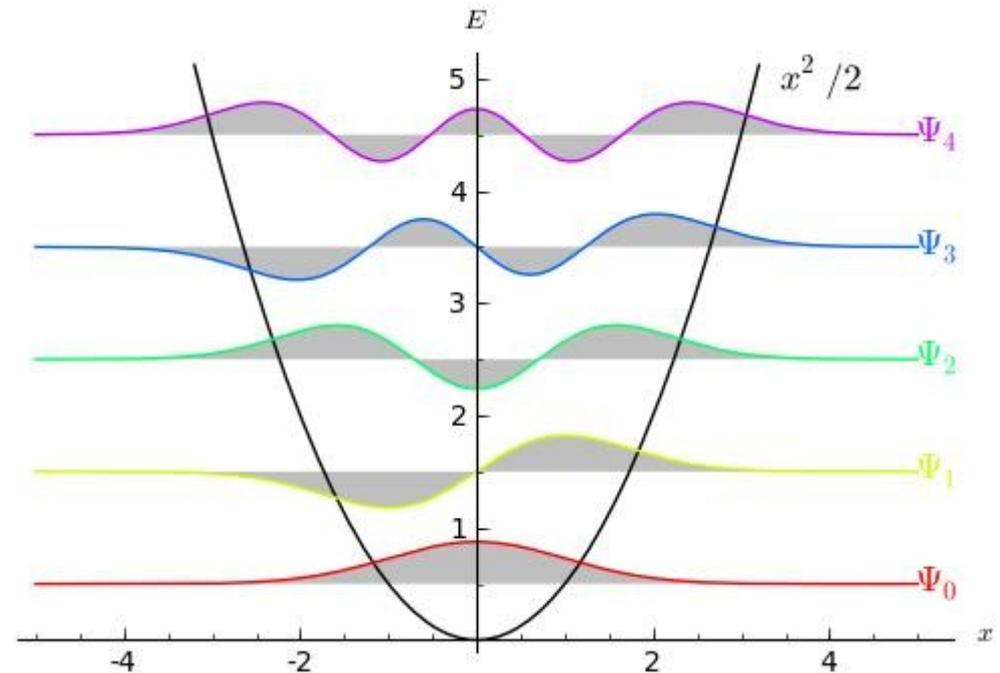
$$|e^{-i\omega t} \cdot \psi(x)|^2 = |e^{-i\omega t}|^2 \cdot |\psi(x)|^2 = 1 \cdot |\psi(x)|^2 = |\psi(x)|^2$$

Física Quântica

FIM PARA HOJE



Universidade Federal do ABC



<http://professor.ufabc.edu.br/~pieter.westera/Quantica.html>