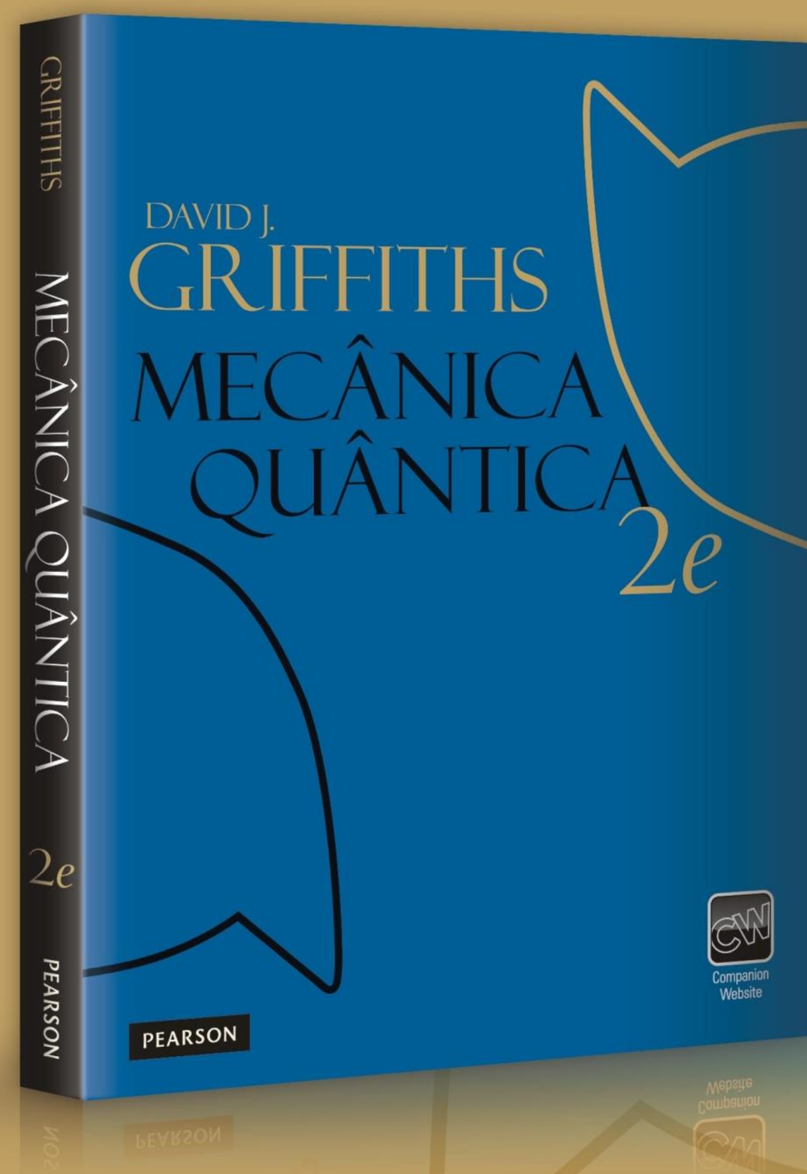
Onde encontrar o assunto*
dessa Aula?

Capítulo 1
A função de onda

(*) Disponível na BV
link no e-Disciplinas



A função de onda

1.1 Equação de Schrödinger

Obtemos a **função de onda** da partícula $\Psi(x,t)$ ao resolver a **equação de Schrödinger***:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+V\Psi.$$

i é a raiz quadrada de –1, (número complexo),
e ħ é a constante de Planck

$$\hbar=\frac{h}{2\pi}=1{,}054572\times10^{-34}\,\mathrm{J\,s}.$$

A eq. de Schrödinger desempenha um **papel análogo** à 2ª lei de Newton:

- Descreve a **dinâmica** de partículas-ondas (sistemas quânticos)

(*) **Sugestão de leitura**: para ver as origens dessa equação, leia o artigo de Felix Bloch em *Physics Today*, dez./1976, ou a descrição histórica detalhada no artigo bastante de Jagdish Mehra, *Foundations of Physics* vol. 17, p 1141–1188(1987), .

A função de onda

1.2 A interpretação estatística

O que *é* exatamente essa ‘função de onda’?
O que ela fornece quando *obtida*?

A função de onda

1.2 A interpretação estatística

O que *é* exatamente essa 'função de onda'?
O que ela fornece quando *obtida*?

- A resposta é fornecida pela **interpretação estatística** de Born sobre a função de onda:

$$\int_a^b |\Psi(x,t)|^2 \, dx = \left\{ \begin{array}{l} \text{probabilidade de encontrar a partícula} \\ \text{entre } a \text{ e } b \text{ no instante } t. \end{array} \right\}$$

A função de onda

1.2 A interpretação estatística

O que *é* exatamente essa 'função de onda'?
O que ela fornece quando *obtida*?

- A resposta é fornecida pela **interpretação estatística** de Born sobre a função de onda:

$$\int_a^b |\Psi(x,t)|^2\, dx = \left\{ \begin{array}{l} \text{probabilidade de encontrar a partícula} \\ \text{entre } a \text{ e } b \text{ no instante } t. \end{array} \right\}$$

A interpretação estatística apresenta um tipo de **indeterminação intrínseca** dentro da mecânica quântica.

A função de onda

1.2 A interpretação estatística

- ✓ Embora a função de onda seja, em geral, uma *função complexa*, o seu módulo quadrado é sempre uma *função real*

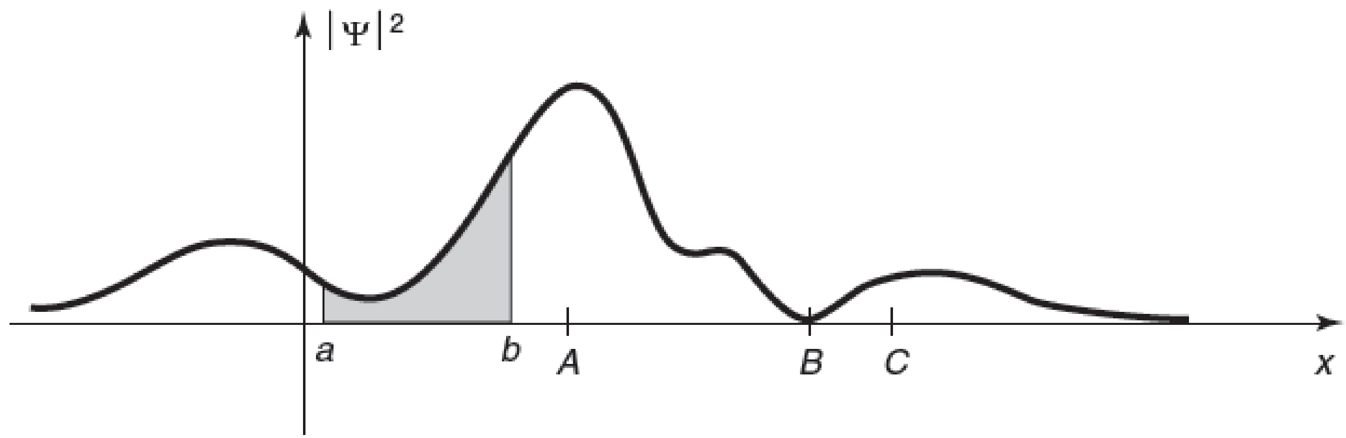


FIGURA 1.2 Função de onda típica. A área sombreada representa a probabilidade de encontrarmos a partícula entre *a* e *b*. A partícula provavelmente seria encontrada próximo a *A*, e, dificilmente, próximo a *B*.

A função de onda

1.2 A interpretação estatística

Suponha que se meça a posição da partícula e a encontre no ponto *C*.

Pergunta: Onde estava a partícula *antes* da medida? 🤔

A função de onda

1.2 A interpretação estatística

Suponha que se meça a posição da partícula e a encontre no ponto *C.*

Pergunta: Onde estava a partícula *antes* da medida? 🤔

Há três respostas plausíveis:

1. A posição **realista**: *a partícula estava em C.*

2. A posição **ortodoxa**: *a partícula não estava em lugar nenhum*.

3. A posição **agnóstica**: *recusa-se a responder.*

A função de onda

1.2 A interpretação estatística

Suponha que se meça a posição da partícula e a encontre no ponto *C.*

Pergunta: Onde estava a partícula *antes* da medida? 🤔

Há três respostas plausíveis:

1. A posição **realista**: *a partícula estava em C.*

2. A posição **ortodoxa**: *a partícula não estava em lugar nenhum*.

3. A posição **agnóstica**: *recusa-se a responder.*

Os *experimentos* <u>*confirmam decisivamente*</u> a **interpretação ortodoxa**:

- (*aparentemente*) uma partícula não *tem* uma posição precisa antes da medida. A interpretação ortodoxa diz que é o processo de medida que "colapsa" a função de onda num determinado valor e, assim, "*cria*" *um* resultado específico (antes apenas probabilisticamente previsto).

A função de onda

1.2 A interpretação estatística

- E se eu fizesse uma <u>*segunda*</u> medida, <u>*imediatamente*</u> após a primeira?? 🤔

A função de onda

1.2 A interpretação estatística

- E se eu fizesse uma *segunda* medida, *imediatamente* após a primeira?? 🤔

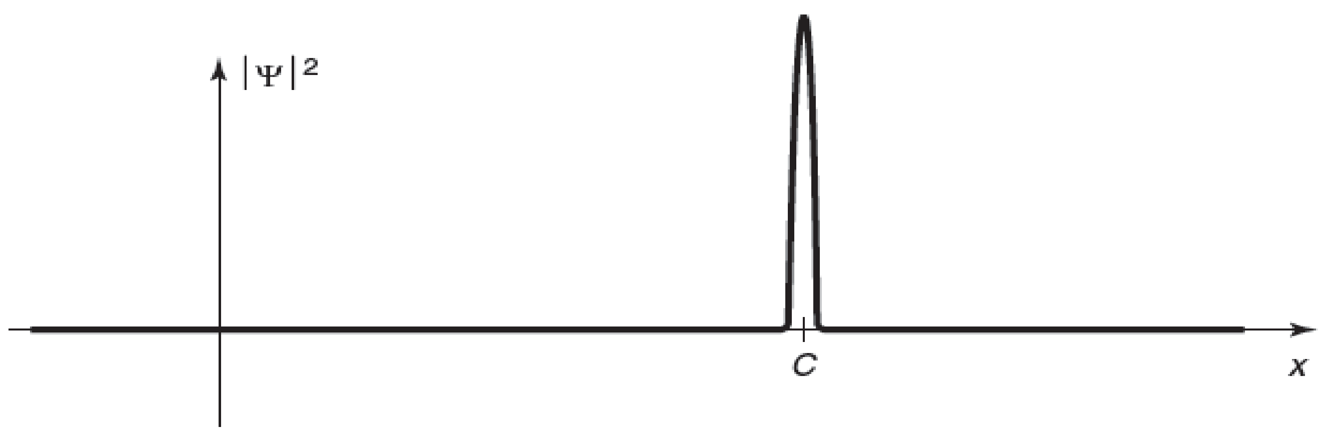


FIGURA 1.3 Colapso da função de onda: representação de $|\Psi|^2$ imediatamente *após* uma medida ter encontrado a partícula no ponto C.

A função de onda

1.2 A interpretação estatística

➢ E se eu fizesse uma ***segunda*** medida, ***imediatamente*** após a primeira?? 🤔

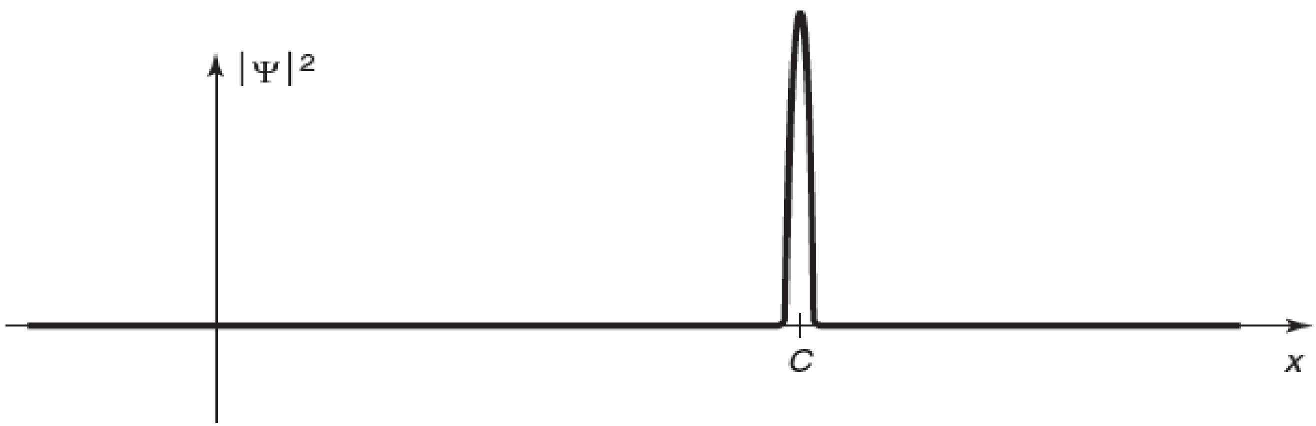


FIGURA 1.3 Colapso da função de onda: representação de $|\Psi|^2$ imediatamente *após* uma medida ter encontrado a partícula no ponto *C*.

Uma medida repetitiva (da mesma partícula), imediatamente após a primeira, deve resultar sempre no mesmo valor.

➢ *A primeira medida altera, de forma radical (e real!), a função de onda, de modo que agora ela passa a ser um pico estreito centrado em C!!*

A função de onda

1.3 Probabilidade (revisão rápida)

1.3.1 Variáveis discretas

O valor médio de *j* (o qual escrevemos $\langle j \rangle$) é:

$$\langle j \rangle = \frac{\sum jN(j)}{N} = \sum_{j=0}^{\infty} jP(j).$$

Na mecânica quântica, a <u>média</u> é, geralmente, a quantidade de interesse; nesse contexto, ela é chamada de **valor esperado**.

Normalmente, o valor médio de alguma *função* de *j* é dado por:

$$\langle f(j) \rangle = \sum_{j=0}^{\infty} f(j)P(j).$$

<u>Atenção</u>: a média dos quadrados, $\langle j^2 \rangle$, *não* é igual, em geral, ao quadrado da média, $\langle j \rangle^2$.

A função de onda

1.3 Probabilidade (revisão rápida)

1.3.1 Variáveis discretas

Mas há uma diferença visível entre os dois histogramas na Figura 1.5:

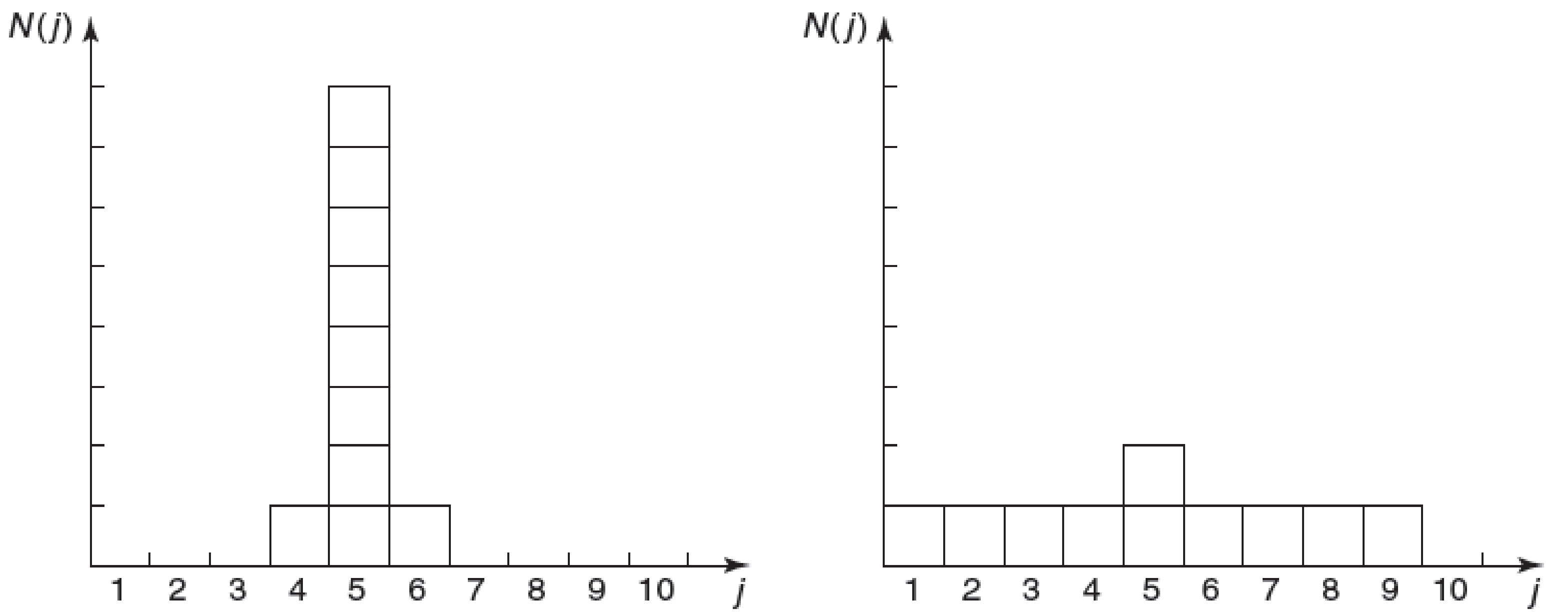


FIGURA 1.5 Dois histogramas com a mesma mediana, mesma média e mesmo valor mais provável, mas desvios-padrão diferentes.

A função de onda

1.3 Probabilidade (revisão rápida)

1.3.1 Variáveis discretas

Há um teorema útil sobre **variâncias**:

$$\begin{aligned}\sigma^2 &= \langle (\Delta j)^2 \rangle = \sum (\Delta j)^2 P(j) = \sum (j - \langle j \rangle)^2 P(j) \\ &= \sum (j^2 - 2j\langle j \rangle + \langle j \rangle^2) P(j) \\ &= \sum j^2 P(j) - 2\langle j \rangle \sum j P(j) + \langle j \rangle^2 \sum P(j) \\ &= \langle j^2 \rangle - 2\langle j \rangle\langle j \rangle + \langle j \rangle^2 = \langle j^2 \rangle - \langle j \rangle^2 .\end{aligned}$$

Tirando a raiz quadrada, o **desvio-padrão** pode ser escrito da seguinte forma:

$$\boxed{\sigma = \sqrt{\langle j^2 \rangle - \langle j \rangle^2} .}$$

Na prática, essa é uma maneira muito mais rápida de obter σ: simplesmente calcule $\langle j^2 \rangle$ e $\langle j \rangle^2$, subtraia e tire a raiz quadrada.

A função de onda

1.3 Probabilidade (revisão rápida)

1.3.2 Variáveis contínuas

$$\left\{\begin{array}{l}\text{probabilidade de que um indivíduo (escolhido}\\ \text{aleatoriamente) esteja entre } x \text{ e } (x+dx)\end{array}\right\} = \rho(x)dx.$$

- O fator de proporcionalidade, ρ(*x*), é chamado de **densidade de probabilidade**.

Dada a densidade de probabilidade **ρ(*x*)** de um evento em função de uma variável contínua x, a probabilidade de que esse evento ocorra quando *x* esteja entre *a* e *b* (intervalo *finito*) é dada pela integral de ρ(*x*):

$$P_{ab} = \int_a^b \rho(x)dx,$$

A função de onda

1.3 Probabilidade (revisão rápida)

1.3.2 Variáveis contínuas

As regras que deduzimos para distribuições discretas se traduzem de forma óbvia:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x)\,dx,$$ (normalização da probabilidade)

$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\rho(x)\,dx,$$ (valor médio –*valor "esperado"*– da função f(x): caso geral)

$$\sigma^2 \equiv \langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2.$$ (variância do "valor esperado" de x)

(*) **ATENÇÃO**: Há um erro na impressão do livro (2ª edição), ao escrever o valor esperado <x>!!
>> Use a definição da segunda linha acima (para uma função f(x), qualquer), sempre válida.

A função de onda

1.4 Normalização

$|\Psi(x,t)|^2$ é a **densidade de probabilidade**, $\rho(x,t)$, para encontrar a partícula no ponto x, no tempo t.

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

Sem isso, a interpretação estatística não teria sentido.

Normalização da função de onda – *processo usado para garantir que essa equação seja satisfeita* (e faça sentido falar em probabilidade), no qual determina-se o valor de um fator multiplicativo, que normalize a integral.

$$\frac{1}{\mathrm{A}^2} = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(r,t)|^2 \, d^3r \;\rightarrow A^2 \int |\psi(r,t)|^2 \, d^3r = 1$$

Exemplo 1:

$$\frac{1}{\mathrm{A}^2} = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 \, dx$$

Função de onda: $\psi(x) = A\, sen(\pi\, x/\mathrm{a}\,),\ \ 0 \leq\ x \leq a$

*Sugestão: Qual a probabilidade de encontrar a partícula no intervalo $\mathrm{a}/2 \leq\ x \leq 3a/4$?

Resposta: 0,41

Problema 1:

Suponha que uma certa distribuição de probabilidade seja dada por $\rho(x) = \frac{9}{4}\frac{1}{x^3}$ para $1 \leq x \leq 3$. Encontre a probabilidade de $\frac{5}{2} \leq x \leq 3$.

Resposta: 0,055

A função de onda

1.4 Normalização (*conservação da probabilidade*)

Suponha que se tenha normalizado a função de onda no instante t = 0.
Como saber se ela *permanecerá* normalizada, conforme o tempo passa e $\mathbf{\Psi}$ evolui?

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\Psi(x,t)\right|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial}{\partial t}\left|\Psi(x,t)\right|^2 dx.$$

Pela regra do produto,

$$\frac{\partial}{\partial t}\left|\Psi\right|^2 = \frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi) = \Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\Psi.$$

A função de onda

1.4 Normalização (*conservação da probabilidade*)

Agora a equação de Schrödinger diz que

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar} V\Psi,$$

e também

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar} V\Psi^*,$$

portanto,

$$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2 = \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2}\Psi\right) = \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\Psi\right)\right].$$

A função de onda

1.4 Normalização (*conservação da probabilidade*)

A integral pode agora ser calculada explicitamente:

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\Psi(x,t)\right|^2 dx = \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi\right)\Bigg|_{-\infty}^{+\infty}.$$

Porém, Ψ (*x, t*) deve ir a zero quando *x* vai a (±) infinito. Caso contrário, a função de onda não seria normalizável. Segue que

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\Psi(x,t)\right|^2 dx = 0,$$

Portanto, a **integral é *constante*** (independente do tempo);
se $\boldsymbol{\Psi}(x,t)$ é normalizada em *t* = 0*,* ela ***permanece* normalizada** em qualquer instante de tempo futuro.

A função de onda

1.5 Posição, Velocidade e Momento

Para uma partícula no estado Ψ, o **valor esperado de *x*** é

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x \left| \Psi(x,t) \right|^2 dx.$$

O que isso significa exatamente?

• <u>NÃO</u> significa a média de várias medidas repetidas!!

• A primeira medida colapsará a função de onda em um pico estreito em torno de um ponto no valor obtido, e as medições subsequentes mostrarão o mesmo resultado.

• Em vez disso, **⟨*x*⟩ é a média de medições** feitas em partículas que *estão todas no estado* Ψ. Isto é, a média *de ensemble*!

A função de onda

1.5 Posição, Velocidade e Momento

O ***valor esperado*** *é a média das medidas repetidas em um conjunto de sistemas preparados de maneira idêntica (ensembles).*

Agora, conforme o tempo passa, $\langle x \rangle$ mudará, e talvez tenhamos interesse em saber quão rapidamente ele se move.

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \int x \frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2 dx = \frac{i\hbar}{2m}\int x \frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\Psi\right) dx.$$

Essa expressão pode ser simplificada se usarmos integração por partes:

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = -\frac{i\hbar}{2m}\int \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\Psi\right) dx.$$

A função de onda

1.5 Posição, Velocidade e Momento

Realizando outra integração por partes, no segundo termo, concluímos que:

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = -\frac{i\hbar}{m}\int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x}\,dx.$$

O que devemos fazer com o resultado?

O *valor esperado da velocidade será igual à derivada temporal do valor esperado da posição*:

$$\langle v\rangle = \frac{d\langle x\rangle}{dt}.$$

Na verdade, costuma-se trabalhar com **momento** ($p = mv$) em vez de velocidade:

$$\langle p\rangle = m\frac{d\langle x\rangle}{dt} = -i\hbar\int\left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x}\right)dx.$$

Teorema de Ehrenfest*:
Os valores esperados obedecem às leis clássicas

$$\langle p\rangle = \int \Psi^* \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi\,dx \Rightarrow \frac{d\langle p\rangle}{dt} = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle$$

A função de onda

1.5 Momento angular e Energia (operadores)

<u>*Todas*</u> as <u>variáveis dinâmicas</u> clássicas **podem ser expressas em termos de posição e momento**. A energia cinética, por exemplo, é $T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$,

e o momento angular é $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times m\mathbf{v} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$.

$$p \rightarrow \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right) \quad \text{(1D)}$$

- Para calcular o valor **esperado de *qualquer* quantidade Q(*x*,*p*)**

$$\langle Q(x,p)\rangle = \int \Psi^* Q\left(x, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi\, dx.$$

$$\langle p_x \rangle = \int \Psi^* \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi\, dx$$

$$\langle x \rangle = \int \Psi^* (x) \Psi\, dx$$

Por exemplo, o valor esperado da energia cinética é

$$\langle T\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\int \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} dx.$$

A função de onda

1.5 Operadores e Valores esperados

$$p_k \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial k}$$

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

(3D) $\Psi(r,t) = \Psi(x,y,z,t)$

$$p \rightarrow \left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right) = -i\hbar\nabla$$

$$\langle x \rangle = \int \Psi^* (x) \Psi \, d^3r$$

$$\langle y \rangle = \int \Psi^* (y) \Psi \, d^3r$$

$$\langle z \rangle = \int \Psi^* (z) \Psi \, d^3r$$

$$\langle r \rangle = \int \Psi^* (r) \Psi \, d^3r$$

$$\langle p \rangle = \int \Psi^* (-i\hbar\nabla) \Psi \, dx$$

$$\langle T \rangle = \int \Psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right) \Psi \, dx$$

$$\langle V \rangle = \int \Psi^*(r,t) \, V(r,t) \Psi(r,t) \, dx$$

$$\langle E \rangle = \left\langle i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right\rangle = \left\langle -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \right\rangle + \langle V \rangle$$

A função de onda

1.5 Densidade de corrente de probabilidade

$$\rho(r,t) = |\psi(r,t)|^2 = \psi^*(r,t)\,\psi(r,t)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(r,t) = \frac{\partial}{\partial t}[\psi^*(r,t)\,\psi(r,t)] = \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial^2 x} + V\psi \quad \rightarrow \quad \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} = \psi^*\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial^2 x} + \psi^* V\psi \qquad \text{(c.c.)}$$

Define-se a **densidade de corrente de probabilidade** $J(r,t)$:

$$\boxed{J(r,t) = \frac{\hbar}{2mi}[\psi^*\,\nabla\psi - \psi\,\nabla\psi^*]}$$

Equação de continuidade para a **densidade de probabilidade**

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}\rho(r,t) + \nabla\cdot J(r,t) = 0}$$

(*) Voltaremos a falar e explorar o significado dessas grandezas e operadores nas próximas aulas.
O objetivo aqui é apenas introduzir a formulação matemática e mostrar sua conexão com a física.

A função de onda

1.6 O princípio da incerteza

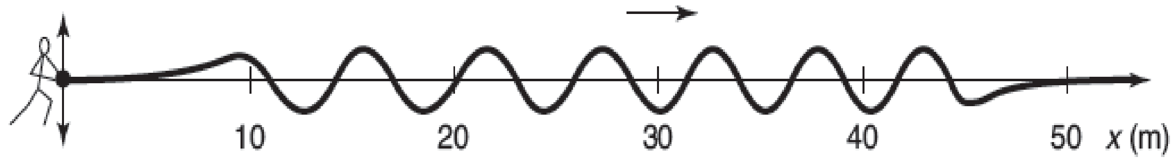


Figura 1.7 Uma onda com um *comprimento* (razoavelmente) bem definido, porém uma *posição* mal definida.

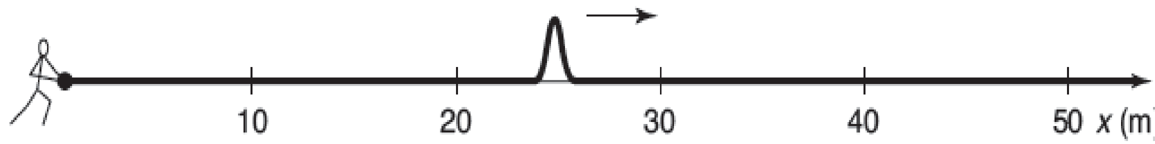
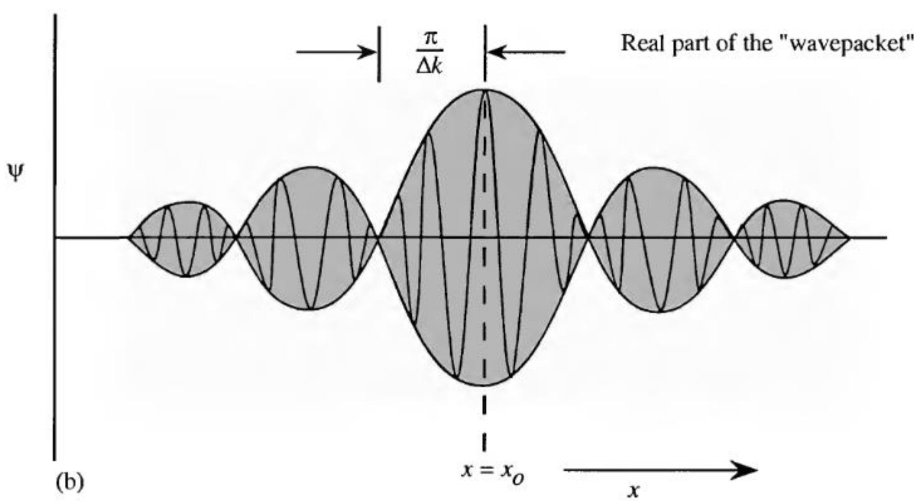


Figura 1.8 Uma onda com *posição* (razoavelmente) bem definida, porém um *comprimento* mal definido.



Pode-se construir um pulso ou "onda localizada" (pacotes de ondas) somando-se várias ondas harmônicas (Fourier)

A função de onda

1.6 O princípio da incerteza

O comprimento de onda de Ψ está relacionado ao *momento* da partícula pela **fórmula de de Broglie**:

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}.$$

Uma distribuição (variância) em *comprimentos de onda* (do pacote de onda) corresponde a uma distribuição (variância) do *momento*, que obedece:

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2},$$

Esse é o famoso **princípio da incerteza** de Heisenberg.

(*) Vimos uma relação parecida, nas primeiras aulas ($\sigma_x \sigma_k > 1$), para ondas clássicas, como consequência da análise de Fourier (válido para qualquer onda). No caso das ondas da MQ isso implica em consequências física marcantes.