Partícula descrita por um "pacote de onda"

Einstein: $E = h\nu$

de Broglie: $\lambda = h/p$

$$\text{Onda}: \ \mathrm{v_p} = \lambda\nu \Rightarrow \mathrm{v_p} = \frac{h}{p}\frac{E}{h} = \frac{E}{p}$$

Partícula livre, não relativística:

$$E = \frac{1}{2}m\mathrm{v}^2 \ \text{ e } \ p = m\mathrm{v} \Rightarrow \mathrm{v_p} = \frac{\mathrm{v}}{2}$$

Se for relativística:

$$p = \gamma m_0 \mathrm{v} = m\mathrm{v} \ \text{ e } \ E = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4} = \gamma m_0 c^2 = mc^2$$

$$\therefore \mathrm{v_p} = \frac{mc^2}{m\mathrm{v}} = \frac{c^2}{\mathrm{v}}$$

Onda plana: $y(x,t) = A\cos\left(\frac{2\pi x}{\lambda} - 2\pi\nu t\right) = A\cos\left(kx - \omega t\right)$

Com $\omega = 2\pi\nu$ e $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ Mas $\mathrm{v_p} = \lambda\nu \Rightarrow \mathrm{v_p} = \frac{\omega}{k}$

Superposição de 2 ondas de mesma amplitude e

$k_2 = k_1 + dk$ e $\omega_2 = \omega_1 + d\omega$

Nesse caso, a amplitude resultante é :

$$y = y_1 + y_2 = A\cos\left(k_1 x - \omega_1 t\right) + A\cos\left(k_2 x - \omega_2 t\right)$$

Lembrando que: $\cos a + \cos b = 2\cos\tfrac{1}{2}\left(a-b\right)\cos\tfrac{1}{2}\left(a+b\right) \Rightarrow$

$$y = 2A\cos\tfrac{1}{2}\left[\left(k_2 - k_1\right)x - \left(\omega_2 - \omega_1\right)t\right]\cos\left[\left(\frac{k_1 + k_2}{2}\right)x - \left(\frac{\omega_1 + \omega_2}{2}\right)t\right]$$

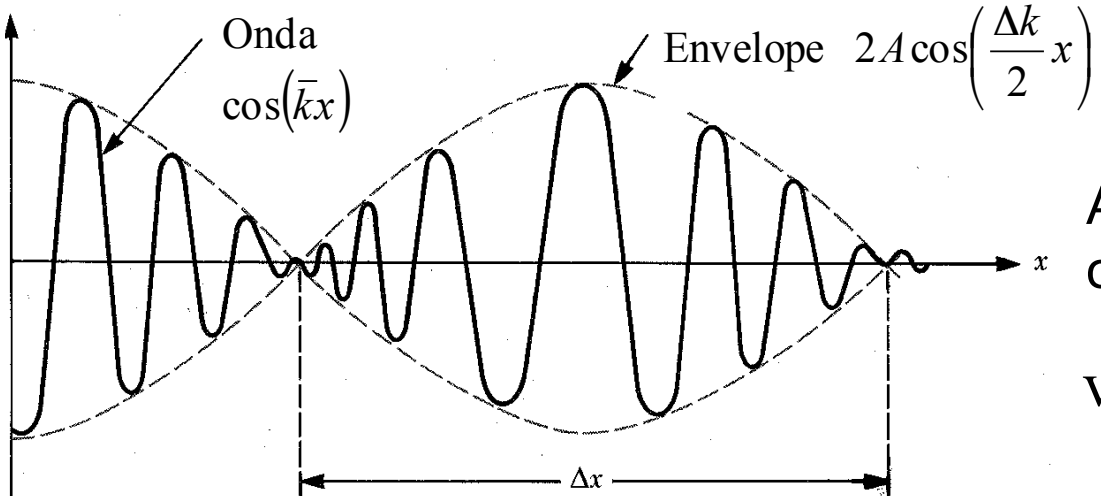
$$y = 2A\cos\tfrac{1}{2}\left[\Delta k x - \Delta\omega t\right]\cos\left[\bar{k}x - \bar{\omega}t\right]$$

Como as diferenças em k e ω são pequenas, temos que:

$\Delta k = k_2 - k_1$ e $\Delta\omega = \omega_2 - \omega_1$ são pequenos,

enquanto $\bar{k} \sim k_1 \sim k_2$ e $\bar{\omega} \sim \omega_1 \sim \omega_2$ são grandes.

Podemos então interpretar a onda soma como sendo um envelope que modula lentamente uma onda com k e ω médios:



A velocidade de propagação das ondas individuais é:

$$v_p = \frac{(\omega_1 + \omega_2)/2}{(k_1 + k_2)/2} \approx \frac{\omega_1}{k_1} = v_1 \approx v_2$$

Mas a velocidade de propagação do envelope, a velocidade de grupo, é:

$$v_g = \frac{(\omega_2 - \omega_1)/2}{(k_2 - k_1)/2} = \frac{\Delta\omega}{\Delta k} = \frac{d\omega}{dk}$$

No caso geral, com a soma de muitas ondas com k e ω ligeiramente diferentes, temos:

$$\mathrm{v_g} = \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k_0}$$ onde k_0 é o número de onda central da distribuição

A relação entre as velocidades de fase e de grupo é obtida por:

$$\mathrm{v_p} = \frac{\omega}{k} \Rightarrow \omega = k\mathrm{v_p}\,.\ \text{Diferenciando:}$$

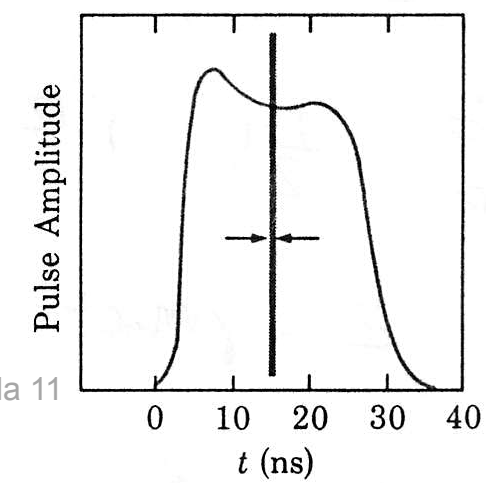
$$d\omega = dk\mathrm{v_p} + kd\mathrm{v_p} \Rightarrow \frac{d\omega}{dk} = \mathrm{v_p} + k\frac{d\mathrm{v_p}}{dk}$$

$$\mathrm{v_g} = \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k_0} = \mathrm{v_p}\Big|_{k_0} + k\left.\frac{d\mathrm{v_p}}{dk}\right|_{k_0}$$

A velocidade de fase, $\mathrm{v_p}$, em geral é $\mathrm{v_p}(k)$

$\Rightarrow$ Dispersão

Pulso de laser, com 1 ns de largura, após percorrer 1 km de fibra ótica.



Caso de 1 e^-: $\left.\begin{array}{l} E = \hbar\omega \Rightarrow \omega = \dfrac{E}{\hbar} \Rightarrow d\omega = \dfrac{dE}{\hbar} \\ p = \hbar k \Rightarrow k = \dfrac{p}{\hbar} \Rightarrow dk = \dfrac{dp}{\hbar} \end{array}\right\} \Rightarrow$

Caso não relativístico: $\Rightarrow \mathrm{v_g} = \dfrac{d\omega}{dk} = \dfrac{dE}{dp} = \dfrac{d}{dp}\left(\dfrac{p^2}{2m}\right) = \dfrac{p}{m} = \mathrm{v}$

Caso relativístico:

$$E = \left(p^2c^2 + m_0^2c^2\right)^{1/2} \Rightarrow \frac{dE}{dp} = \frac{1}{2}\left(p^2c^2 + m_0^2c^2\right)^{-1/2} 2pc^2 = \frac{pc^2}{E}$$

Mas $E = \gamma m_0 c^2$ e $p = \gamma m_0 \mathrm{v} \Rightarrow \dfrac{dE}{dp} = \dfrac{d\omega}{dk} = \mathrm{v_g} = \dfrac{pc^2}{E} = \dfrac{\gamma m_0 \mathrm{v} c^2}{\gamma m_0 c^2} = \mathrm{v}$

Portanto a velocidade da partícula é representada pela velocidade do grupo de ondas que formam o pacote.

A onda que descreve a partícula definitivamente **não é** uma perturbação que se propaga em um meio material. Ψ é, em geral, representada por um número complexo e é relacionada com a probabilidade de se encontrar a partícula em um determinado elemento de volume.

"Muitos cálculos com sua Psi
o Erwin consegue fazer,
mas ninguém conseguiu ainda saber
é exatamente o que Psi quer dizer", Walter Huckel.

A partícula é descrita por uma função de onda , $\Psi(x,y,z,t)$, que é chamada de amplitude de probabilidade. O quadrado do módulo, $\Psi^*\Psi = |\Psi|^2$, é a intensidade da onda e representa a densidade de probabilidade (probabilidade por unidade de volume) no ponto (x,y,z,t). Para determinar a probabilidade de se encontrar a partícula em uma certa região do espaço, deve-se integrar a intensidade da onda sobre o volume considerado.

Ψ^* representa o complexo conjugado de Ψ. Se $y = a + ib \Rightarrow$
$\Rightarrow y^* = a - ib$, ou, se $\Psi = e^{i\theta} \Rightarrow \Psi^* = e^{-i\theta}$

de Broglie: $\lambda = h/p$. Mas e quando p varia? (partícula submetida a uma força). Função de onda deve ser mais complicada que uma senóide.

Equação de Schrödinger: a função de onda é uma solução dela para um dado potencial. É uma equação diferencial, pois a solução é uma função, e de mais de uma variável $\Rightarrow$ derivadas parciais.

Propriedades desejadas da equação de movimento da MQ:

1. Ser consistente com de Broglie – Einstein;
2. Consistente com $E = p^2/2m + V$ (não relativística);
3. Linear em Ψ, de tal forma que, se Ψ_1 e Ψ_2 são soluções $\Rightarrow$ $\Rightarrow \Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ também é solução (combinação linear). Daí podemos ter interferência.

Caso particular em que $V(x,t) = V_0 \Rightarrow$ partícula livre $\Rightarrow p = \text{cte} \Rightarrow$ $E = \text{cte} \Rightarrow \lambda = \text{cte}$, etc. ...

Hipóteses 1 + 2 $\Rightarrow$ $\hbar\omega = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(x,t)$

Hipótese 3 (linearidade) $\Rightarrow$ Ψ^0 Ψ^1 Ψ^2 ...

Vamos experimentar a solução senoidal: $\Psi(x,t) = \text{sen}(kx - \omega t)$

Como precisamos de k^2 e ω, devemos derivar a função.

Derivadas são lineares: $\dfrac{\partial^2 c\Psi}{\partial x^2} = c\dfrac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -k^2\Psi \quad \text{e} \quad \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\omega\cos(kx - \omega t)$$

Para reproduzir $\hbar\omega = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(x,t)$ devemos ter uma equação assim:

$$\alpha\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) = \beta\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$$ Substituindo,

$$-\alpha k^2\,\text{sen}(kx - \omega t) + V_0\,\text{sen}(kx - \omega t) = -\beta\omega\cos(kx - \omega t)$$

Nada feito. Solução só quando sen(...)=cos(...). Devemos usar uma combinação $\Psi(x,t) = \cos(kx - \omega t) + \gamma\,\text{sen}(kx - \omega t)$

Fazendo as derivadas:

$$\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} = -k\,\mathrm{sen}(kx-\omega t) + k\gamma\cos(kx-\omega t)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = -k^2\cos(kx-\omega t) - k^2\gamma\,\mathrm{sen}(kx-\omega t)$$

e $$\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \omega\,\mathrm{sen}(kx-\omega t) - \omega\gamma\cos(kx-\omega t)$$

Podemos substituir na nossa equação:

$$\alpha\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) = \beta\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$$

para obter:

$$-\alpha k^2\cos(kx-\omega t) - \alpha k^2\gamma\,\mathrm{sen}(kx-\omega t) + V_0\cos(kx-\omega t) + V_0\gamma\,\mathrm{sen}(kx-\omega t) =$$

$$= \beta\omega\,\mathrm{sen}(kx-\omega t) - \beta\omega\gamma\cos(kx-\omega t) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \left(-\alpha k^2 + V_0 + \beta\omega\gamma\right)\cos(kx-\omega t) + \left(-\alpha k^2\gamma + V_0\gamma - \beta\omega\right)\mathrm{sen}(kx-\omega t) = 0$$

Para que essa igualdade valha para $\forall x$ e $\forall t \Rightarrow$ os coeficientes do seno e do cosseno têm que se anular. Assim:

$$-\alpha k^2 + V_0 = -\beta\gamma\omega \quad \text{e} \quad -\alpha k^2 + V_0 = \frac{\beta\omega}{\gamma}. \text{Subtraindo, temos:}$$

$$-\beta\gamma\omega - \frac{\beta\omega}{\gamma} = 0 \Rightarrow \gamma = -\frac{1}{\gamma} \Rightarrow \gamma^2 = -1 \Rightarrow \gamma = \pm\sqrt{-1} \equiv \pm i$$

Substituindo na equação acima:

$$-\alpha k^2 + V_0 = \mp i\beta\omega. \quad \text{Comparando com:} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0 = \hbar\omega,$$

$$\text{temos:} \quad \alpha = -\frac{\hbar^2}{2m} \quad \text{e} \quad \beta = \pm i\hbar \quad (\text{vamos pegar o sinal} +)$$

Chegamos, então, à equação de Schrödinger:

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

Notem que a função de onda da partícula livre é complexa: $\Psi(x,t) = \cos(kx - \omega t) + i\,\text{sen}(kx - \omega t)$

EXEMPLO 5-3

A função de onda $\Psi(x,t)$ para o estado de menor energia de um oscilador harmônico simples, constituído de uma partícula de massa m sob ação de uma força restauradora linear cuja constante é C, pode ser expressa como

$$\Psi(x,t) = Ae^{-(\sqrt{Cm}/2\hbar)x^2} e^{-(i/2)\sqrt{C/m}t}$$

$-(i/2)t\sqrt{C/m}$

onde a constante real A pode ter qualquer valor. Verifique que essa expressão é uma solução para a equação de Schroedinger com o potencial apropriado. (O termo dependente do tempo é uma exponencial complexa; vide o Apêndice E.)

A expressão se aplica ao caso em que o ponto de equilíbrio do oscilador (o ponto no qual a partícula clássica estaria em repouso caso não estivesse oscilando) está na origem do eixo x ($x = 0$). Neste caso, a energia potencial, independente do tempo, é

$$V(x,t) = V(x) = Cx^2/2$$

como pode ser verificado observando-se que a força correspondente, $F = -dV(x)/dx = -Cx$, é uma força restauradora linear cuja constante é C. A equação de Schroedinger para esse potencial é

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

Para verificar a validade da solução citada, calculamos suas derivadas. Encontramos

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{i}{2}\sqrt{\frac{C}{m}}\Psi$$

e

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = -\frac{\sqrt{Cm}}{2\hbar} 2x\Psi = -\frac{\sqrt{Cm}}{\hbar} x\Psi$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{\sqrt{Cm}}{\hbar}\Psi - \frac{\sqrt{Cm}}{\hbar} x \left(-\frac{\sqrt{Cm}}{\hbar} x\Psi\right)$$

$$= -\frac{\sqrt{Cm}}{\hbar}\Psi + \frac{Cm}{\hbar^2} x^2 \Psi$$

Substituição na equação de Schroedinger nos dá que

$$\frac{\hbar^2\sqrt{Cm}}{2m\hbar}\Psi - \frac{\hbar^2 Cm}{2m\hbar^2} x^2\Psi + \frac{C}{2} x^2 \Psi = i\hbar\left(-\frac{i}{2}\right)\sqrt{\frac{C}{m}}\Psi$$

ou

$$\frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{C}{m}}\Psi - \frac{C}{2}x^2\Psi + \frac{C}{2}x^2\Psi = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{C}{m}}\Psi$$

Como a última igualdade é evidentemente satisfeita, a solução é válida.

A solução geral da equação de Schroedinger para o oscilador harmônico é tratada no próximo capítulo. ▲

A interpretação de Born para as funções de onda

A ligação básica entre as propriedades da função de onda e o comportamento da partícula associada a ela é expressa em termos da densidade de probabilidade, $P(x,t) = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$.

$P(x,t)$ é real e não negativa.

EXEMPLO 5-4

Prove que $\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$ é necessariamente real, e ou positivo ou nulo.

Qualquer função complexa, como por exemplo $\Psi(x,t)$, pode ser escrita sempre como

$$\Psi(x,t) = R(x,t) + iI(x,t) \tag{5-25a}$$

onde $R(x,t)$ e $I(x,t)$ são ambas funções reais, chamadas, respectivamente, de suas partes *real* e *imaginária*. O *complexo conjugado* de $\Psi(x,t)$ é definido como

$$\Psi^*(x,t) \equiv R(x,t) - iI(x,t) \tag{5-25b}$$

Multiplicando as duas, obtemos

$$\Psi^*\Psi = (R - iI)(R + iI)$$

ou, como $i^2 = -1$,

$$\Psi^*\Psi = R^2 - i^2 I^2 = R^2 + I^2$$

Portanto

$$\Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = [R(x,t)]^2 + [I(x,t)]^2 \tag{5-26}$$