* Vimos 1) $p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$ pois $k = \frac{2\pi}{\lambda}$

2) Amplitude de probabilidade: $\Psi = [\Psi(x,y,z,t)]$

3) $|\Psi|^2 \equiv$ probabilidade de se encontrar a partícula em um certo estado relacionado com a posição (x,y,z) e um instante de tempo t

$$|\Psi|^2 = \Psi . \Psi^* \quad ; \quad \Psi^* \equiv \text{complexo conjugado}$$

Probabilidade $|\Psi|^2 dV \Rightarrow \underbrace{P(x)dx}$ $= |\Psi|^2 dx$

probabilidade da partícula ser encontrada no intervalo infinitesimal dx em torno do ponto x.

4) Como Ψ tem propriedades de uma onda é chamada de "Função de onda", mas não tem significado físico.

* Experiência com a fenda dupla

Com e^- é difícil de ser realizada pois $\lambda_e << \lambda_{luz} \Rightarrow$ dimensões da fenda devem ser muito pequenas

* Por exemplo, fóton e elétron com a mesma energia $1 eV = 1,6 \times 10^{-19} J$. Dado $h = 6,63 \times 10^{-34} J s$ e $m_e = 9,11 \times 10^{-31} kg$

Vamos calcular λ de cada um.

$\rightarrow$ infravermelho! $(12400 \mathring{A} = 1240 \, nm)$

Fóton: $E = hf \Rightarrow \lambda = \frac{c}{f} \Rightarrow E = \frac{hf}{\lambda_{fóton}}$

$$\lambda_{fóton} = \frac{hc}{E} = \frac{6,63 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^{8}}{1,6 \times 10^{-19}}$$

$$\lambda_{fóton} = 1,2 \times 10^{-6} = \boxed{1,2\,\mu m} \Rightarrow \text{infravermelho}$$

Elétron: $E = E_c = K = \frac{p^2}{2m_e}$ e $p = \frac{h}{\lambda}$

$$E = \frac{h^2}{2m_e \lambda_e^2} \Rightarrow \lambda_e = \sqrt{\frac{h^2}{2m_e E}} = \sqrt{\frac{6,63 \times 10^{-34}}{2 \times 9,11 \times 10^{-31} \times 1,6 \times 10^{-19}}}$$

$$\lambda_e = 1,2 \times 10^{-9}\,m = \boxed{12\,\mathring{A} = 1,2\,nm} \Rightarrow \text{raios X}$$

Ou seja, $\boxed{\lambda_e = 10^{-3} \lambda_f}$.

* Assim, para efetuar uma experiência com difração de e^-, as fendas deverão ser linhas regulares de átomos na rede cristalina de algum sólido cristalino. Isto é o que foi feito. (Cristal de sódio)

* O objetivo a partir de agora é procurar expressões matemáticas para Ψ (que irão depender do problema (sistema) apresentado.

* Vamos começar com o caso mais simples de uma partícula livre no espaço em 1D (pode-se mover ao longo do eixo x com comprimento de onda λ_o ($k_o = \frac{2\pi}{\lambda_o}$,

* Se, por analogia com a EM plana, for escolhida

$$\boxed{\Psi = A\cos(k_0 x - \omega t)} \Rightarrow$$

distribuição de probabilidade: $|\Psi|^2 \propto \cos^2(k_0 x - \omega t)$

* Observe então, que existirão posições no eixo-x nas quais a partícula nunca seria encontrada!!

* Existe, porém, uma outra forma de exprimir (e trabalhar) com função de onda para partícula livre em termos de uma onda plana: $\boxed{\Psi = A\, e^{i(k_0 x - \omega t)}}$ Retrato de partícula

* Que, sendo função complexa $\Rightarrow$ vale a relação de Euler:

$$e^{i\phi} = \cos\phi + i\,\text{sen}\,\phi \Rightarrow$$

Parte real $\Rightarrow Re(\Psi)$

Parte imaginária $\Rightarrow Im(\Psi)$

São funções periódicas

$$Re(\Psi) = A\cos(k_0 x - \omega t)$$

$$Im(\Psi) = A\,\text{sen}(k_0 x - \omega t)$$

* Agora, $|\Psi|^2 = \Psi \cdot \Psi^* = A\, e^{i(k_0 x - \omega t)} \cdot A\, e^{-i(k_0 x - \omega t)} \Rightarrow$

$|\Psi|^2 = A^2 \equiv cte$ (independe x como deveríamos esperar para uma partícula livre.

* Em seguida, somando todas as probabilidades de encontrar a partícula em um dado ponto da reta:

$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx = 1$, o que corresponde a 100%, significa normalizar a função de onda

↳ (densidade de probabilidade)

Mas, $\left[\int_{-\infty}^{\infty} A^2 dx = A^2 [+\infty - (-\infty)] \to \infty \right.$

* No entanto, para o caso particular da partícula livre, isso causa um problema, pois a integral não converge!!

* Daí a necessidade de pensar para a partícula livre um "pacote de onda", que para $t=0$, por exemplo.

$$\Psi(x,0) = A e^{-\frac{x^2}{4\sigma_x^2}} e^{i k_0 x}$$

O valor esperado de x $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi|^2 dx$

* Com distribuição de probabilidade:

$$|\Psi|^2 = A^2 e^{-x^2/2\sigma_x^2} \equiv \text{distribuição Gaussiana}$$

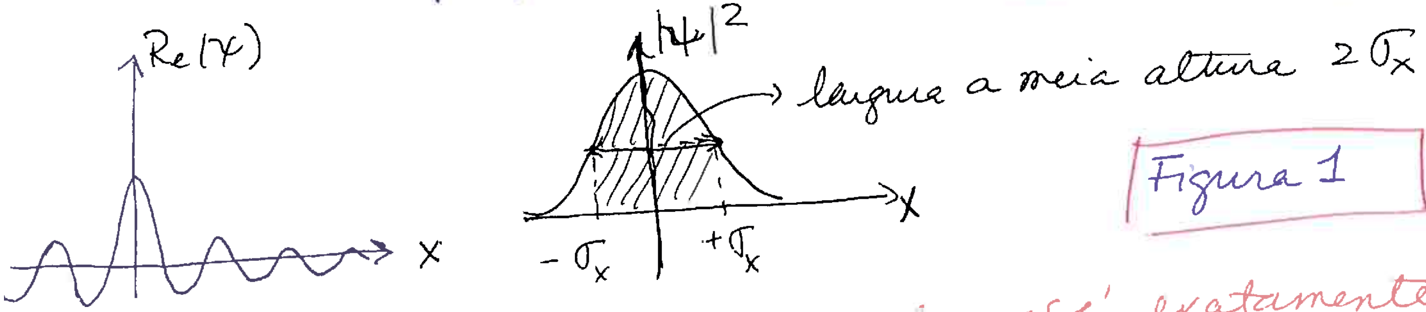


Figura 1

"pacote de onda" a função de onda não é exatamente conhecida pois há Δx (incerteza)

comprimento de onda não é conhecido com precisão

* Note que a probabilidade da partícula ser encontrada entre $-\sigma_x$ e $+\sigma_x$ é maior que 50% (corresponde à área sob a curva).

* Podemos associar $\sigma_x = \Delta x$ como sendo a incerteza que envolve o valor máximo da distribuição. (5)

* Mas, mesmo nessa situação, se pudéssemos descrever a partícula livre em termos de uma série de senos e cossenos os cálculos ficariam simplificados.

* Por isso, fazemos

$$\psi = A\, e^{\frac{x^2}{4\sigma_x^2}} e^{ik_0 x} = \sum B_n e^{ik_n x}$$

$A = 1$ escolho σ_x para que isto ocorra.

$B_n \equiv$ coeficientes da expansão

$\boxed{\text{Figura 2}}$

$$\int_0^\infty e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

Fazer: $\int_0^\infty A^2 e^{-x^2/2\sigma_x^2} dx = 1 \overset{A=}{\Rightarrow} \sigma_x = \frac{2}{\sqrt{2\pi}}$

* Como o número de ondas senoidais puras necessárias é muito grande

$$\psi = e^{-\frac{x^2}{4\sigma_x^2}} e^{ik_0 x} = \int B(k)\, e^{ikx} dk \quad (A)$$

* Usando a relação matemática $\frac{\sigma_x}{\sqrt{\pi}} \int e^{-\sigma_x^2(k-k_0)^2} e^{ikx} dk = e^{-\frac{x^2}{4\sigma_x^2}} e^{ik_0 x}$ (B)

* Então, de (A) e (B) $\Rightarrow$ $B(k) = \frac{\sigma_x}{\sqrt{\pi}} e^{-\sigma_x^2(k-k_0)^2}$

* Como $\underbrace{p = \hbar k}_{p = \frac{h}{\lambda} \text{ e } k = \frac{2\pi}{\lambda}}$ $\Rightarrow$ $\boxed{B(p) = \frac{\sigma_x}{\sqrt{\pi}} \exp\left[-\frac{(p-p_0)^2}{(\hbar/\sigma_x)^2}\right]}$

distribuição de momentos da partícula com o ψ anterior

* Esta função distribuição de momentos está representada na $\boxed{\text{Figura 3}}$ para 2 pacotes de onda de larguras diferentes. Note que, quanto mais estreito é o pacote de ondas, mais larga é a função distribuição de momentos. (lado esquerdo)

* Novamente, a probabilidade de encontrar a partícula que possui distribuição $B(k)e^{ikx}$ é proporcional ao quadrado da amplitude $|B(k)|^2$.

* Igualmente, a densidade de probabilidade de encontrar a partícula com momento p.

$$|B(p)|^2 = \frac{\sigma_x}{(\sqrt{\pi})^2} \exp\left[\frac{-(p-p_0)^2}{2\left(\frac{\hbar}{2\sigma_x}\right)^2} \right] \qquad (e^x)^2 = e^{2x}$$

* Como essa expressão também descreve uma distribuição Gaussiana em termos do momento, então podemos pensar em substituir $\frac{\hbar}{2\sigma_x} = \sigma_p$ ou então $\frac{\hbar}{2\Delta x} = \Delta p \Rightarrow$

em comparação com $|\psi|^2$

$$\boxed{\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}}$$

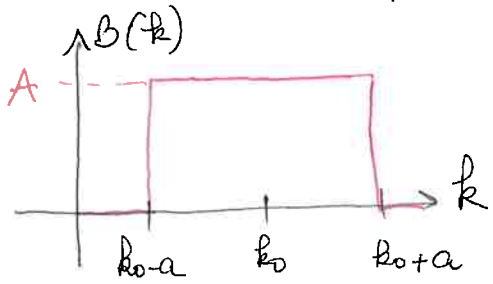
* Heisenberg, analisando essa relação para outras funções de onda (partícula não livre) observou que nunca $\Delta x \Delta p < \frac{\hbar}{2}$ então formulou o princípio da incerteza: $\boxed{\Delta x \Delta p > \hbar}$

* Vários cientistas têm proposto experiências que violem o princípio da incerteza, mas até hoje sem sucesso!!

Exemplo: Supondo um pacote de onda e momento dados por uma função quadrada:

$$B(k) = \begin{cases} 0 & p/ \quad k < k_0 - a \\ A & p/ \quad k_0 - a < k < k_0 + a \\ 0 & p/ \quad k > k_0 + a \end{cases}$$

determine $\psi(x)$ correspondente.



$$\psi(x) = \int B(k)\, e^{+ikx}\, dk = \int_{k_0-a}^{k_0+a} A e^{ikx}\, dk = \frac{A}{ix} e^{ikx} \Big|_{k_0-a}^{k_0+a}$$

$$\psi(x) = \frac{A}{ix}\left[e^{i(k_0+a)x} - e^{i(k_0-a)x} \right] = \frac{A}{ix}\left[e^{ik_0x} \cdot e^{iax} - e^{ik_0x - i\ldots} \ldots \right.$$

$$\psi(x) = \frac{A e^{ik_0x}}{ix}\left[e^{iax} - e^{-iax} \right] = \frac{A e^{ik_0x}}{ix}\left[\cancel{\cos ax} + i\,\text{sen}\,ax - \cancel{\cos ax} + i\,\text{sen}\ldots \right.$$

$$\psi(x) = \frac{A e^{ik_0x}}{ix}\, 2i\,\text{sen}\,ax = \frac{2A\,\text{sen}\,ax}{x}\, e^{ik_0x}$$

De forma que: $|\psi(x)|^2 = \psi\psi^* = \frac{2A\,\text{sen}\,ax}{x} e^{ik_0x} \times \left(\frac{2A\,\text{sen}\,ax}{x} e^{-ik\ldots} \right.$

$$\boxed{|\psi|^2 = \frac{4A^2\,\text{sen}^2\,ax}{x^2}}$$

$\boxed{\text{Figura 4}}$

Fig. 1

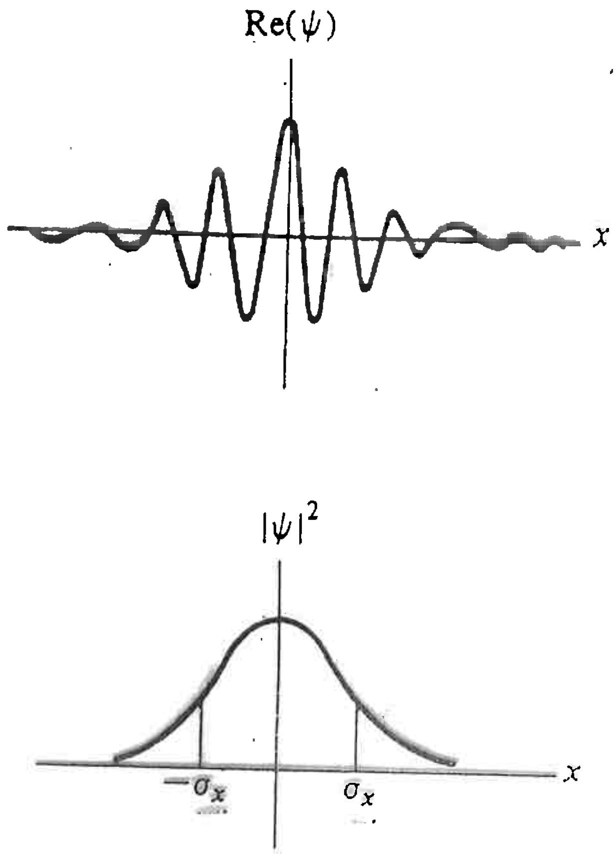
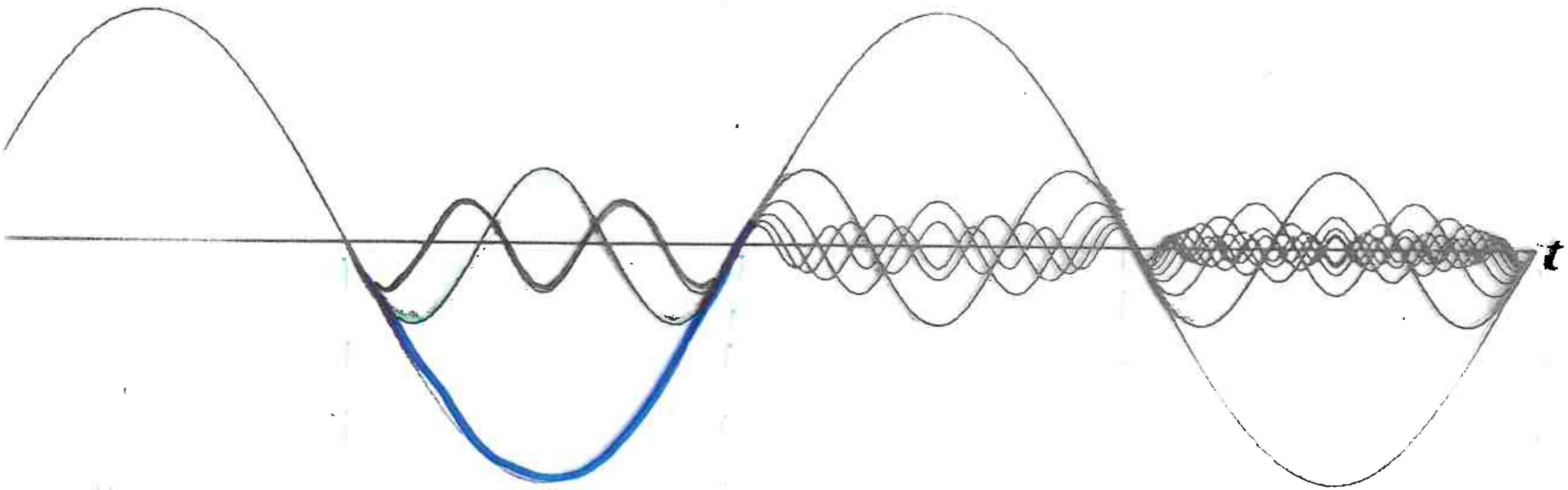


Figura 25-1. *Pacote de ondas gaussiano. (a) Parte real contra x. (b) Quadrado do módulo ou densidade de probabilidade contra x.*

Fig. 2



$$y = A\left(\sin\omega t + \tfrac{1}{3}\sin 3\omega t + \tfrac{1}{5}\sin 5\omega t + \tfrac{1}{7}\sin 7\omega t + \ldots\right)$$

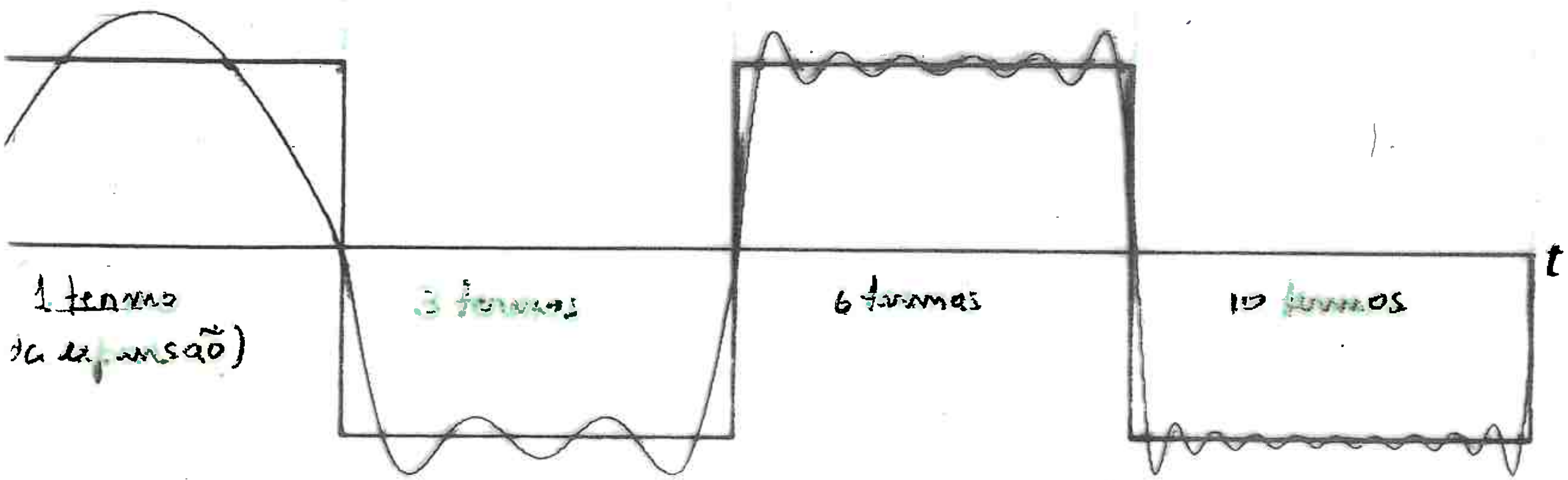
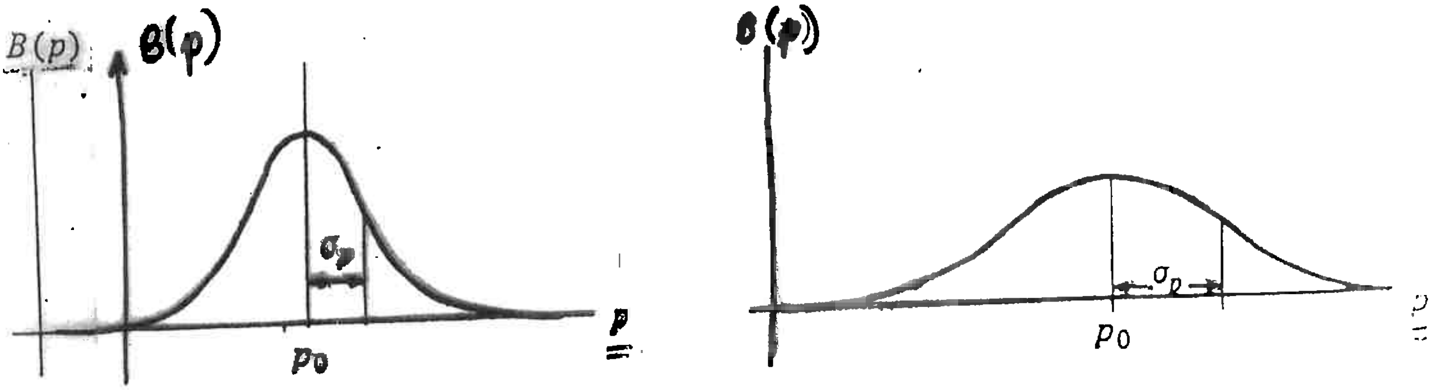


Fig. 3



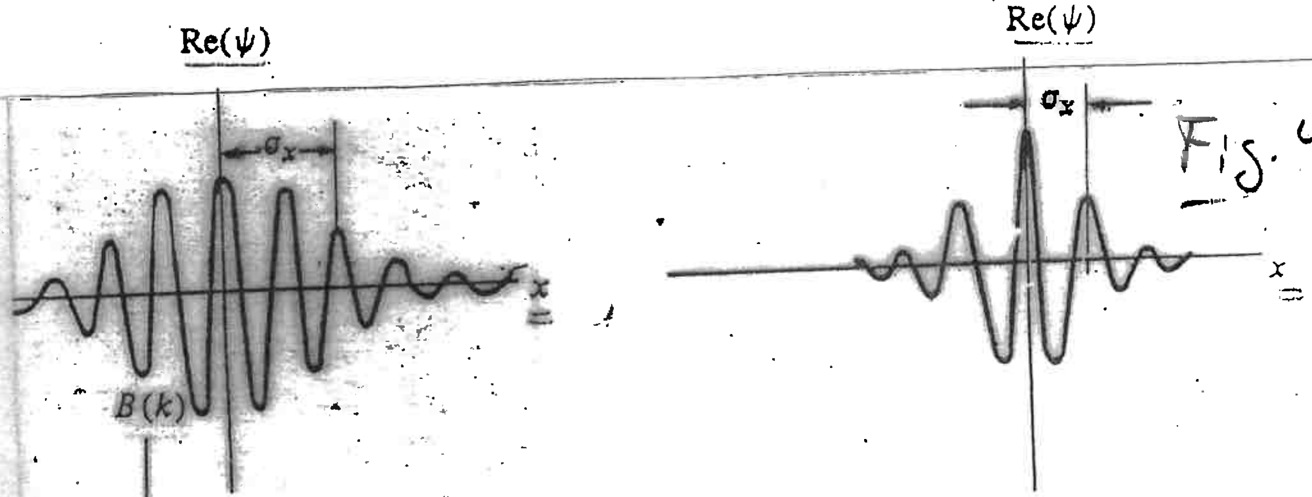


Fig. 4