

Universidade Estadual de Campinas
Instituto de Física *Gleb Wataghin*

Projeto de F809 – Instrumentação para Ensino

Simulação da Formação de um Pacote de Ondas



Aluno: Daniel Francisco Boriero RA 008396
Orientador: Engenheiro Pedro Miguel Raggio Santos
Co-Orientadora: Professora Kyoko Furuya

Campinas – SP
Data de finalização do relatório: 12/06/2005

Resumo

É apresentado um programa de computador que simula a formação de um pacote de ondas, sua evolução temporal e a incerteza gerada pela relação entre o pacote e sua transformada de Fourier. Concentrando-se nos princípios básicos que a mecânica quântica utiliza para descrever uma partícula massiva e sem spin, o programa mostra de forma didática como a superposição de ondas planas forma uma função que descreve a probabilidade da partícula estar em uma determinada posição e como essa probabilidade varia em função do tempo.

1. Introdução

O propósito do programa é mostrar didaticamente a formação de um pacote de ondas e algumas de suas propriedades sob a perspectiva da mecânica quântica, considerando este objetivo foi escolhido o caso mais simples e familiar aos alunos egressantes da mecânica clássica e que é o caso de uma partícula livre, massiva e sem spin, as ondas planas que serão superpostas para formar o pacote são soluções da equação de Schrödinger e auto-estados dos operadores momento linear P e Hamiltoniano H . Este caso geralmente é abordado nos primeiros capítulos dos livros textos de introdução à mecânica quântica[1,2], dessa forma espera-se que o programa desenvolvido possa cumprir o papel de ferramenta auxiliar para os estudantes que ainda não estão habituados com a abstração necessária para compreender as interpretações oferecidas pela mecânica quântica.

Nas seções subseqüentes a resolução formal deste caso é descrita em detalhes e a partir dessa resolução é desenvolvida uma solução numérica que pode ser utilizada por um algoritmo computacional, em seguida é descrito como o programa foi desenvolvido e, finalmente, como pode ser operado extraindo resultados pertinentes ao entendimento dos conceitos básicos da mecânica quântica aplicados para este caso especial.

2. O pacote de ondas

Um pacote de ondas é uma função que descreve o estado de uma partícula, as etapas que conduzem a esta interpretação estão detalhadas abaixo.

2.1. As relações de de Broglie

Após a explicação do espectro da radiação de corpo negro por Planck através da hipótese da quantização da energia, da descoberta dos fótons por Einstein e da existência de níveis discretos de energia nos átomos por Bohr; em 1923, de Broglie apresentou a seguinte hipótese: partículas massivas, assim como fótons, possuem um aspecto ondulatório. Com apenas esta hipótese foram derivadas as regras empíricas de quantização dos níveis atômicos encontradas por Bohr-Sommerfeld, e em 1927 foi comprovado experimentalmente o aspecto ondulatório dos elétrons. Segundo a hipótese de de Broglie, cada partícula de energia E e momento linear p

têm associados uma frequência angular ω e um número de onda k , dados pela seguintes relações:

$$E = \hbar \omega \quad (1)$$

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad (2)$$

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{p} \quad (3)$$

$$\text{onde } \hbar = 2\pi h$$

O valor extremamente pequeno da constante h explica porque o aspecto ondulatório da matéria é muito difícil de ser observado.

2.2. Estado de uma partícula descrito como uma função de onda e a equação de Schrödinger

De acordo com a hipótese de de Broglie foram formulados os postulados da mecânica quântica que podemos apresentar, de forma simplificada e restrita ao nosso interesse imediato, da seguinte forma: o estado de uma partícula é caracterizado por uma função de onda $\Psi(r,t)$ que contém toda a informação que é possível obter sobre uma partícula. O valor de $\Psi(r,t)$ é interpretado como a amplitude da probabilidade da presença de uma partícula, dessa forma, $|\Psi(r,t)|^2$ representa a densidade de probabilidade e conseqüentemente

$$dP(\vec{r}, t) = C |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3 r \quad (4)$$

representa a probabilidade de encontrar a partícula entre r e $r + dr$. A partir dos trabalhos de de Broglie e Planck, o físico Erwin Schrödinger demonstrou que essa função deveria obedecer a seguinte equação de onda:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) \quad (5)$$

Considerando uma partícula livre ($V(r,t) = 0$), a equação acima tem como solução funções da seguinte forma:

$$\Psi(\vec{r}, t) = A e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (6)$$

$$\text{onde } \omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (6a)$$

Esse tipo de solução é chamada de onda plana e será a solução utilizada para realizar a simulação. O princípio de superposição nos diz que qualquer combinação

linear de ondas planas também será uma solução, considerando ainda o caso de propagação em apenas uma dimensão temos:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(k) e^{i[kx - \omega(k)t]} dk \quad (7)$$

A função de onda acima, composta por uma superposição de ondas planas, é chamada de pacote de ondas. A função $g(k)$ é uma função que determina o peso que cada onda terá dentro do pacote. Para realizar a simulação utilizaremos somente a parte real de $\Psi(x, t)$:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(k) \cos[kx - \omega(k)t] dk \quad (8)$$

Como o valor de $\Psi(x, t)$ não tem significado físico direto também será apresentado $|\Psi(x, t)|^2$. O **primeiro objetivo** da simulação será exibir como essas duas funções são construídas através do sucessivo acréscimo de ondas planas em uma combinação linear até formar um pacote de ondas. A função será construída em uma dimensão e somente sua parte real conforme a equação (8), essa função vai caracterizar o estado quântico de uma partícula livre, massiva e sem spin. Corresponderá a uma superposição de ondas planas harmônicas, soluções da equação de Schrödinger, que são auto-estados dos operadores momento linear P e Hamiltoniano H .

2.3. O princípio de incerteza de Heisenberg

Considerando que o estado inicial de uma partícula é dada pela equação (7) no instante $t = 0$, então temos:

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(k) e^{ikx} dk \quad (9)$$

Pode-se ver claramente que a função $g(k)$ é a transformada de Fourier da função $\Psi(x, 0)$, e que por isso pode ser calculada da seguinte forma:

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \Psi(x, 0) e^{-ikx} dx \quad (10)$$

Supondo que a função $|g(k)|$ possui um pico em k_0 e uma largura de Δk definida como a largura da curva a meia altura, podemos inferir que as ondas planas cujo número de onda k estiverem próximas de k_0 vão interferir construtivamente e quando estiverem longe destrutivamente. Assim, podemos esperar que na proximidade de k_0 a função $|\Psi(x, 0)|$ terá seu máximo e decrescerá à medida que se afasta assumindo probabilidade zero quando estiver fora de um intervalo Δx

centrado em x_0 . O decréscimo torna-se apreciável se $e^{i(k-k_0)(x-x_0)}$ oscila aproximadamente uma vez quando k atravessa o intervalo Δk , ou seja, quando:

$$\Delta k \cdot (x - x_0) \cong 1 \quad (11)$$

se definirmos Δx como a largura do pacote, então teremos

$$\Delta k \cdot \Delta x > 1 \quad (12)$$

Esta inequação é uma relação clássica entre as larguras de duas funções que são a transformada de Fourier uma da outra e, portanto, não é um princípio inerentemente quântico, o fato mais importante é que o produto $\Delta k \Delta x$ possui um limite inferior. O aspecto quântico surge quando interpretamos o número de onda k segundo a relação de de Broglie, contida na equação (2):

$$\Delta p = \hbar \Delta k \quad (13)$$

substituindo a equação acima na equação (12), teremos:

$$\Delta p \cdot \Delta x > \hbar \quad (14)$$

Esta inequação é conhecida como **relação de incerteza de Heisenberg**, seu significado é o seguinte: é impossível conhecer ao mesmo tempo a posição e o momento de uma partícula com um grau arbitrário de precisão. Quando o limite inferior da equação (14) é alcançado, o aumento na precisão da medida da posição de uma partícula implica em uma diminuição na precisão da medida do seu momento, o **segundo objetivo** da simulação é mostrar este efeito de acordo com as definições de Δx e de Δk dadas acima.

2.4. A evolução temporal de um pacote de ondas

A onda plana descrita pela equação (7) propaga-se com a seguinte velocidade de fase:

$$V_f(k) = \frac{\omega(k)}{k} \quad (15)$$

Substituindo o valor de $\omega(k)$ pelo valor determinado pela condição (6a), temos:

$$V_f(k) = \frac{\hbar k}{2m} \quad (16)$$

A equação (6a) é uma relação de dispersão que pelo fato de ser proporcional ao quadrado de k também é chamada de relação de dispersão quadrática, quando substituída na equação (14) resulta em uma velocidade de fase que depende do

número de onda, essa dependência vai fazer com que cada onda que compõe o pacote tenha uma velocidade diferente. O **terceiro objetivo** da simulação é mostrar que devido a essa relação de dispersão quadrática o pacote de ondas sofrerá uma dispersão na medida que evolui temporalmente ao longo da coordenada x .

3. Solução numérica

Como discutido acima, o objetivo do simulador é apresentar a função $|\Psi(x,t)|$, a função moduladora $g(k)$ e a função $|\Psi(x,t)|^2$, no entanto, em algoritmos computacionais não é possível aplicar fórmulas como a equação (8) pois integrais contínuas são construções puramente imaginárias, assim como ocorre na realidade as simulações aproximam integrais por somatórias para que possam ser computadas, assim a equação (8) é re-escrita da seguinte forma:

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{i=1}^N g(k_i) \cos[k_i x - \omega(k_i)t] \quad (17)$$

- O parâmetro N é a quantidade de ondas planas que serão superpostas para formar o pacote, este número será um parâmetro alterável dentro do programa pois dessa forma pretende-se mostrar o processo de formação do pacote através de sua variação.
- A função $g(k_i)$ é a função que determina o peso que cada número de onda terá na superposição, o usuário poderá escolher entre Gaussiana ou triangular, para ambas será possível alterar a largura (Δk) da função pois dessa forma pretende-se mostrar a dependência entre esse valor e a largura do pacote (Δx), resultando no princípio de incerteza.
- Os números de onda k_i serão determinados de acordo com a quantidade de ondas utilizadas para formar o pacote e distribuídas de forma uniforme ao redor de um número de onda central k_0 , de acordo com a equação abaixo:

$$k_i = i \frac{2 * k_0}{N + 1} \quad (18)$$

por exemplo, para

$$N = 1$$

$$N = 2$$

$$N = 3$$

teremos

$$k_1 = k_0$$

$$k_1 = (2/3) k_0$$

$$k_1 = (1/2) k_0$$

$$k_2 = (4/3) k_0$$

$$k_2 = k_0$$

$$k_3 = (3/2) k_0$$

- A frequência será calculada de acordo com a equação (6a):

$$\omega(k_i) = C k_i^2 \quad (19)$$

onde C é uma constante, escolhida de forma a otimizar a visualização da evolução temporal. A equação (19) para a frequência angular é consequência da utilização das ondas planas como solução da equação de Schrödinger resultando em uma relação de dispersão quadrática, com a possibilidade de visualizar a evolução temporal do pacote pretende-se mostrar que estas soluções conduzem à dispersão do pacote de ondas.

4. O simulador e a interface com o programa PyPhysics

4.1. Desenvolvimento

O simulador foi desenvolvido em JAVA 1.2.2[3], esta linguagem possui as seguintes vantagens:

- Ser fortemente orientada a objeto, facilitando a criação e utilização dos objetos matemáticos e gráficos pertinentes ao problema que se quer apresentar. Este aspecto da linguagem torna o código muito elegante e, portanto, própria para utilização em uma ciência como a física que preza pela elegância de suas teorias e equações.
- Possuir uma interface apropriada para divulgação pela internet chamada Applet, utilizada para criar o simulador.
- Ser multiplataforma, o código é compilado em um tipo binário próprio que pode ser executado em qualquer sistema operacional que possua uma Máquina Virtual Java(JVM) [3] instalada e que transforma o binário java em binário executável.
- Ter sido criada e expandida com a colaboração das comunidades virtuais sob o princípio da livre circulação de conhecimento.
- Estar sob as condições de licenciamento de software livre, o que permite a utilização livre da linguagem por qualquer pessoa ou instituição, ou seja, não é proprietário.

Estas características tornam o JAVA uma linguagem de programação muito apropriada ao ambiente de criação e divulgação científica.

Todas as bibliotecas utilizadas fazem parte do JavaCore, inclusive a classe Math que forneceu todas as funções matemáticas usadas no programa, isto significa que para compilar o programa não é necessário instalar nenhuma outra biblioteca além daquelas que são os padrões do Java e que estão contidas no pacote de desenvolvimento básico(JDK).

Em paralelo ao simulador foi desenvolvido uma interface para integra-lo a um programa chamado PyPhysics, criado por alunos do Instituto de Física *Gleb Wataghin* e que tem como um dos seus objetivos agregar todos os programas desenvolvidos para a disciplina de Instrumentação para Ensino ministrada neste mesmo instituto. Este software foi desenvolvido em Python, que possui muitas

características em comum com o JAVA incluindo o fato de estar sob a condição de licença de software livre, ou seja, não é proprietário. Para criar essa interface foram utilizados o Python2.3[4] e o pacote PyGames1.6[5].

4.2. Operação e resultados

O simulador (Anexo I) pode ser acessado diretamente, para isto basta descompactar todos os arquivos em um único diretório e abrir o arquivo pacote.html, é necessário que o computador tenha instalado uma Máquina Virtual Java (JVM)[3]. O acesso também pode ser feito através do programa PyPhysics (Anexo II), para isto deve-se descompactar todos os arquivos e executar o arquivo Main.py, acessar o módulo de Física Moderna e em seguida o item Simulador de um Pacote de Ondas, é necessário que o computador tenha instalado uma Máquina Virtual Java (JVM) [3] e também o Python2.3[4] juntamente com o pacote PyGames1.6[5].

A tela inicial do programa está reproduzida na figura abaixo, onde pode ser visto que o programa consiste de quatro áreas principais ordenadas verticalmente e que serão descritas nesta mesma ordem.

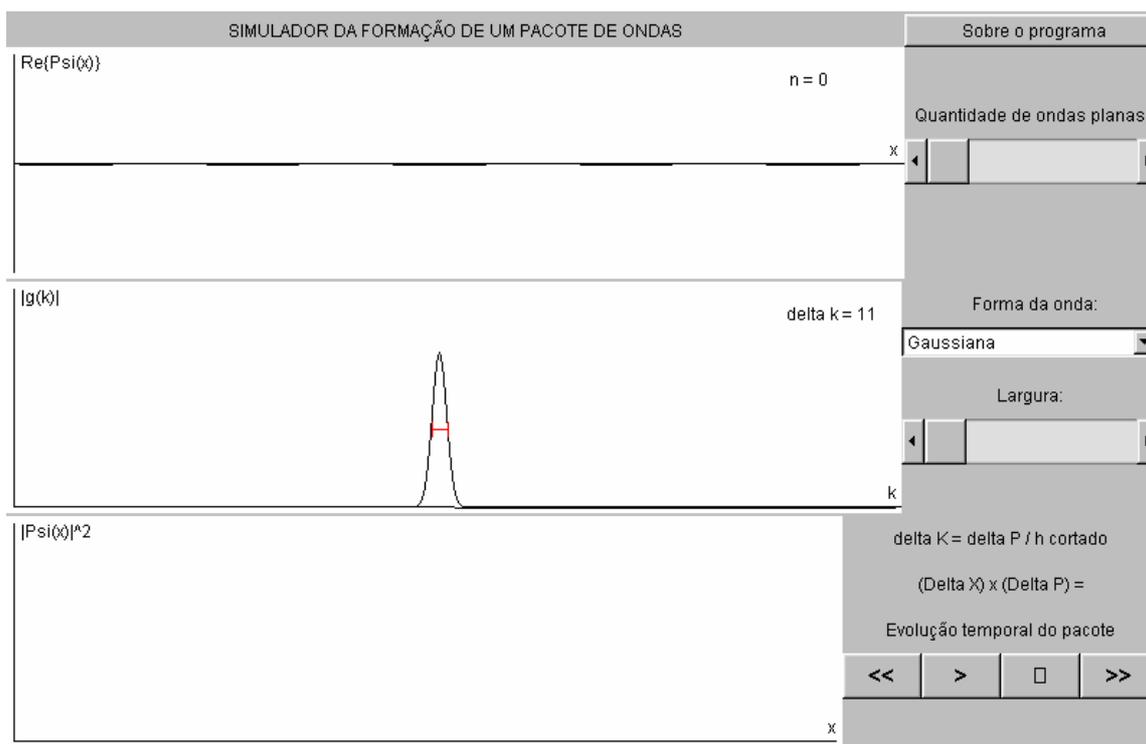


Figura 1 – Tela inicial do simulador

1. Na primeira área é exibido o nome do programa e um botão que se pressionado exibi uma tela com informações sobre o programa.
2. Na segunda área é apresentado o gráfico da função $|\Psi(x,t)|$ conforme a equação (17), ao lado direito há um controle onde pode-se determinar a

quantidade de ondas planas que o usuário quer que sejam superpostas, este valor varia de 0 a 80 e é exibido no canto superior direito do gráfico. O valor inicial é zero, o que significa que o pacote ainda não existe.

3. Na terceira área é apresentado o gráfico da função moduladora $|g(k)|$, ao lado direito há dois controles, o primeiro permite escolher entre a função Gaussiana e triangular e o segundo permite determinar a largura da função moduladora (Δk) representada por uma reta em vermelho e cujo valor é apresentado no canto superior direito do gráfico. No momento inicial a função selecionada é a Gaussiana e sua largura é o valor mínimo.
4. Na quarta área é exibido o gráfico da função $|\Psi(x,t)|^2$ e que representa a densidade de probabilidade, ao seu lado direito é apresentado o produto entre a largura da função moduladora, substituída pela relação de de Broglie contida na equação (13), e a largura do pacote (Δx), representada por uma reta em vermelho e cujo valor é apresentado no canto superior direito do gráfico. Ao lado do gráfico também há controles que permitem realizar a evolução temporal do pacote, a variável t é apresentada no canto superior direito do gráfico. O programa é iniciado com a evolução temporal desativada e com $t = 0$, enquanto o pacote ainda não existir ($N=0$) a largura do pacote e a variável temporal não podem ser exibidas.

A alteração de qualquer um dos parâmetros provoca a imediata atualização de todos os gráficos que dependem deste parâmetro. A única exceção é a evolução temporal que só é aplicada para $|\Psi(x,t)|^2$, pois $|\Psi(x,t)|$ não possui significado físico direto e a visualização de sua evolução temporal não acrescenta nenhuma informação útil.

A seguir é mostrado como o programa pode ser utilizado e quais resultados podem ser obtidos.

Na figura abaixo é exibido um pacote construído com um pequeno número de ondas planas ($N = 2$).

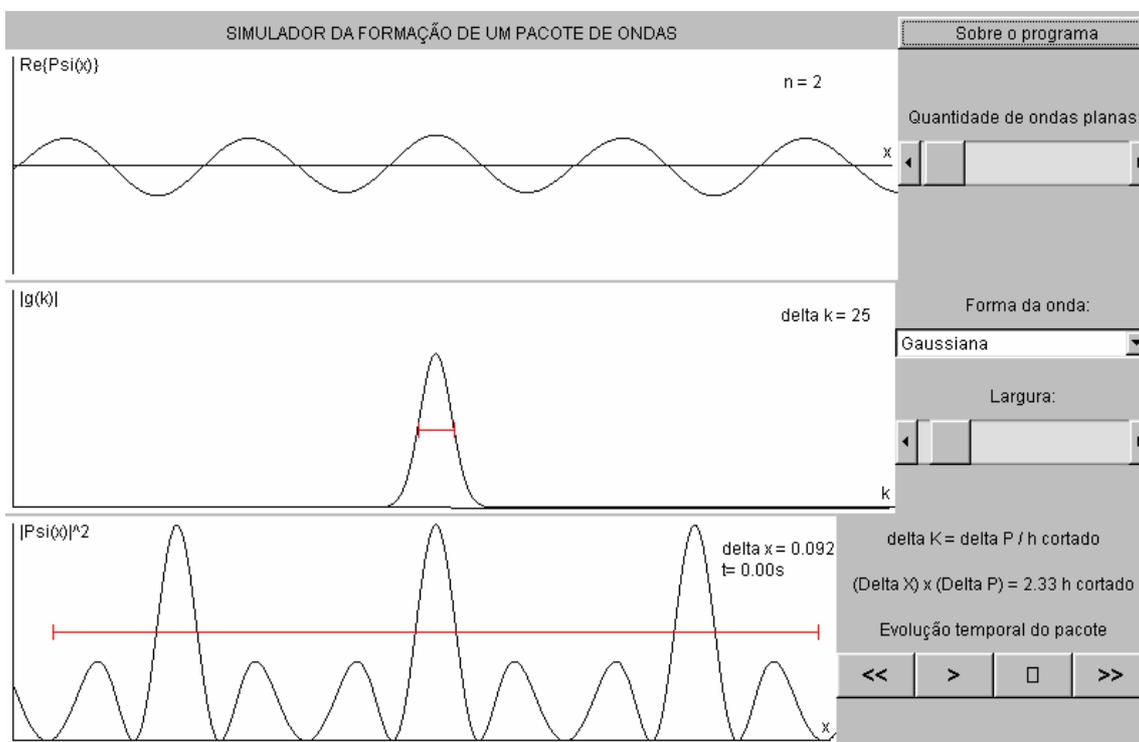


Figura 2 – Pacote para um pequeno número de ondas planas, $N = 2$

Como pode ser visto, a densidade de probabilidade exibida no terceiro gráfico apresenta vários picos, o que significa que para poucas ondas planas a partícula não está bem localizada.

Na figura seguinte é exibido um pacote em que a quantidade de ondas planas foi aumentado ($N = 40$).

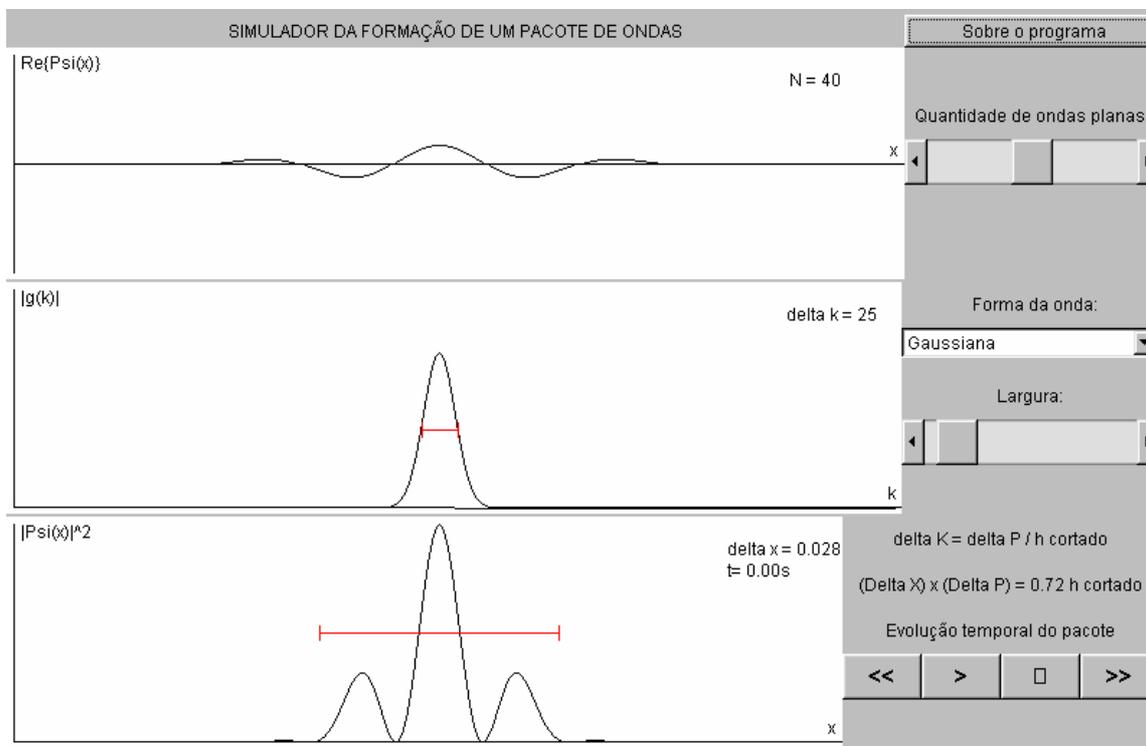


Figura 3 – Pacote formado com a soma de um grande número de ondas planas, $N = 40$

Neste caso pode ser visto que a partícula está bem localizada pois no gráfico que representa a densidade de probabilidade há somente um grande pico e que distante dele a probabilidade cai para zero.

Para a mesma configuração anterior pode-se aumentar a largura da função moduladora $g(k)$, o resultado está na figura abaixo.

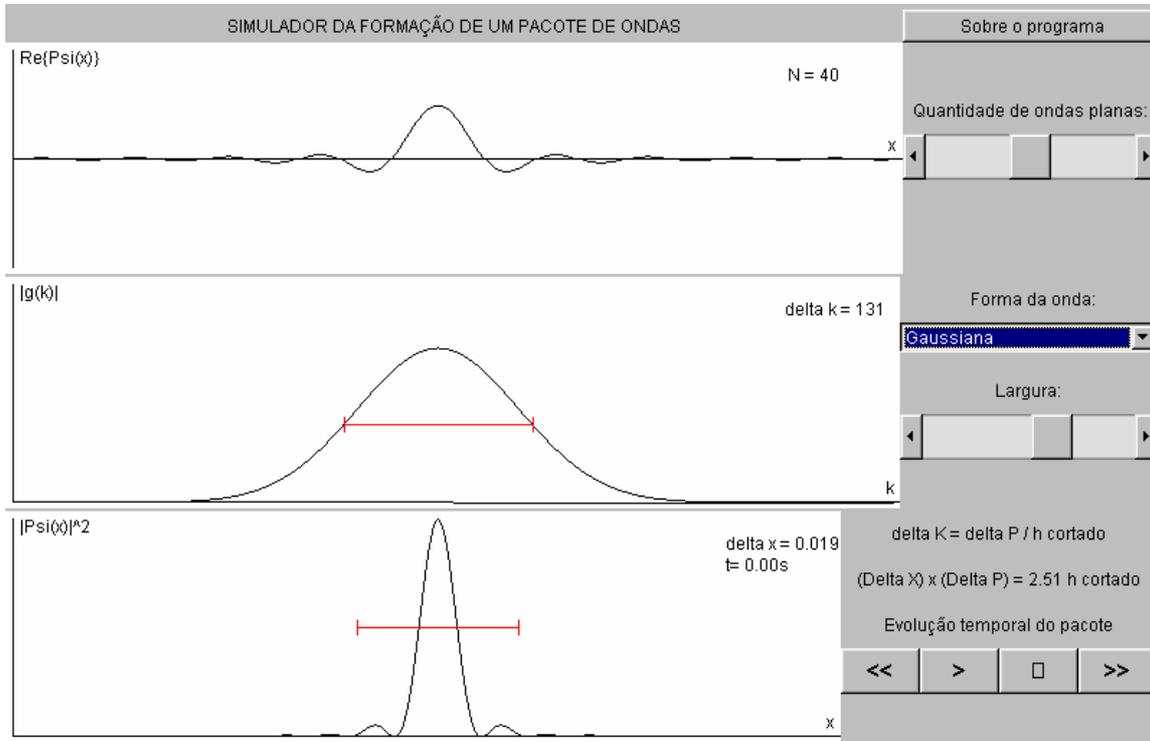


Figura 4 – Dependência entre a largura da função moduladora e a largura do pacote

Através da figura 4, pode-se constatar que um aumento na largura da função moduladora provoca uma diminuição da largura do pacote, esta dependência em conjunto com as relações de de Broglie leva-nos a conclusão de que é impossível diminuir arbitrariamente e simultaneamente a precisão na medida da posição e do momento da partícula, esta constatação está de acordo com a previsão descrita na seção 2.3 e que resulta no princípio de incerteza de Heisenberg.

Permitindo-se que o pacote evolua temporalmente por alguns instantes obtém-se o resultado exibido na figura abaixo.

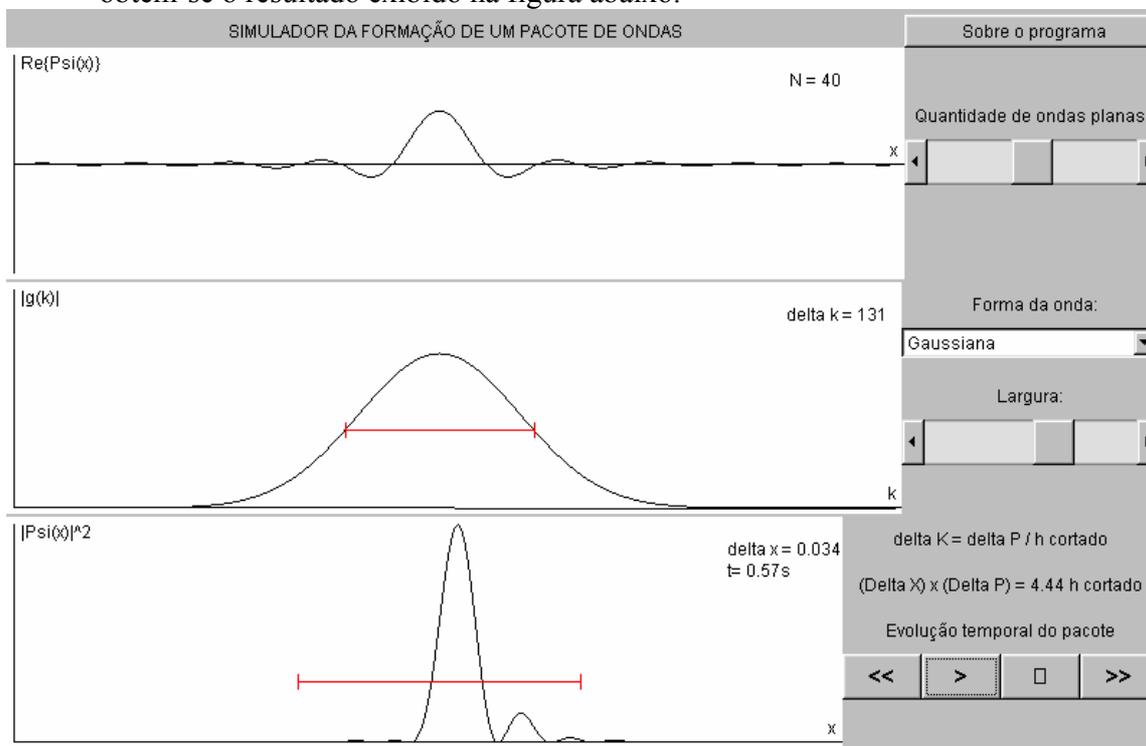


Figura 5 – Evolução temporal e subsequente alargamento do pacote

Como pode ser observado, após alguns instantes o pacote sofreu um alargamento, ou seja, sofreu uma dispersão. Este resultado está de acordo com a previsão descrita na seção 2.4, pois a relação de dispersão quadrática das ondas planas utilizadas para formar o pacote implicam na dispersão do pacote. Também pode ser observado que a largura da função moduladora não sofre alterações, isto significa que a dispersão do pacote ocorre por conta da incerteza na posição, isto é, o alargamento de Δx . Os mesmos resultados são observados quando a função moduladora escolhida é a função triangular.

5. Conclusão

Os resultados que podem ser facilmente observados no simulador estão de acordo com a resolução formal descrita na seção 2. No entanto, somente confirmar a previsão teórica não satisfaz os objetivos deste projeto pois a principal motivação é fornecer um instrumento para ensino, neste aspecto, o programa desenvolvido também possui as características para se tornar uma ferramenta didática auxiliar. Os controles visuais utilizados e as condições de contorno empregadas internamente oferecem uma visão qualitativa dos fenômenos da formação de um pacote de ondas, da relação de incerteza e da dispersão temporal do pacote sem envolver desnecessários parâmetros e resultados numéricos. A simplicidade e interatividade alcançadas na operação do programa foram muito satisfatórias, estas características possibilitam que o estudante observe a dinâmica de um pacote de ondas cuja interpretação dada pela mecânica quântica possui considerável

dificuldade de ser assimilada, dessa forma, é evidente a contribuição que esta ferramenta pode fornecer ao aprendizado.

6. Agradecimentos

O desenvolvimento deste projeto deveu-se à colaboração de algumas pessoas, o autor gostaria de agradecer especialmente ao Eng^o. Pedro Raggio e a Prof^a. Kyoko Furuya pelas suas orientações, ao coordenador da disciplina Prof^o. Lunazzi e aos alunos Erick Jaccoud e Carlos Gaspar pela orientação sobre o funcionamento do programa PyPhysics.

7. Comentários

No decorrer do desenvolvimento deste projeto foram realizados comentários por parte do coordenador da disciplina e que estão reproduzidos abaixo:

Na apresentação da proposta do projeto por email da sala Teleduc:

EMail enviado em 25/04/2005 19:39:20

Resp: Proposta de projeto de F809, sob orientação do Engo. Pedro Raggio

Procure um co-orientador para opinar sobre o resultado do ponto de vista da mecanica quantica.

Na apresentação do projeto através do portfolio da sala Teleduc:

Comentário feito em 24/04/2005 21:26:44

Projeto aprovado. Bom trabalho!

Entendo que o projeto é feito em e para Java, mas isso não está explícito no texto do projeto, onde deveria assinalar que o uso dos programas é livre, e não proprietário.

Na apresentação do relatório parcial através do portfolio da sala Teleduc:

Comentário feito em 03/06/2005 22:32:35

Nota 10. O trabalho está sendo realizado.

8. Referências

1. Cohen-Tannoudji, Claude, Bernard Diu, and Franck Laloë. *Quantum Mechanics*. Vol. 1 2nd ed. Paris: Wiley-Interscience, 1977
2. Eisberg, Robert e Resnick, Robert *Física Quântica*. 6^a ed. Rio de Janeiro: Editora Campos, 1998
3. <http://www.java.sun.com>
4. <http://www.python.org>
5. <http://www.pygame.org>
6. <http://www.physics.nwu.edu/ugrad/vpl/waves/superposition2.html>
7. <http://www.physics.nwu.edu/ugrad/vpl/waves/wavepacket.html>