

Partículas e Ondas de Matéria

1. Relações de de Broglie.

- Espectros de emissão e absorção de átomos é composto por “linhas finas”.
 - Energias possíveis do átomo E_i , com $i = 1, 2, 3 \dots n \dots k$ com n discreto e k contínuo. A surpresa estava no espectro discreto.
 - Energias de fótons causando transições $h\nu_{ij} = |E_i - E_j|$ discretas e contínuas. A parte continua é devido a foto-ionização do átomo.
- **1914** - A experiência de Franck-Hertz demonstrou isso (átomo de mercúrio).

- Bohr and Sommerfeld → Primeiras explicações:

{	órbitas especiais
	e
	regras de quantização

- **1923** - de Broglie: “*Partículas materiais, assim como fótons, tem aspectos ondulatórios*”.

- Ver complemento A_I

$$\begin{cases} E = h\nu = \hbar\omega \\ \vec{p} = \hbar\vec{k} \\ \lambda = \frac{2\pi}{|\vec{k}|} = \frac{h}{|\vec{p}|} \end{cases}$$

- **1927** - Davisson and Germer confirmam o caráter ondulatório das partículas com a experiência de difração e interferência de elétrons.

Funções de Onda – Equação de Schrödinger

2. A versão de Schrödinger da Mecânica Quântica (um resumo da disciplina F589).

- O estado é caracterizado por $\Psi(\vec{r}, t)$ que contém toda a informação possível de se obter sobre a partícula.

- No mundo quântico $\left\{ \begin{array}{l} \text{Perde-se o conceito de trajetória, conhecimento da} \\ \text{posição e velocidade da partícula a cada instante.} \\ \text{Ganha-se o conceito de estado quântico, dependente} \\ \text{do tempo, e conhecimento do futuro baseado em} \\ \text{probabilidades.} \end{array} \right.$
- $\Psi(\vec{r}, t)$ é interpretada como sendo uma amplitude de probabilidade da presença da partícula, pois permite definir:

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

onde C é uma constante de normalização, e considerar

$$dP(\vec{r}, t) \text{ como sendo } \left\{ \begin{array}{l} \text{a probabilidade da partícula estar, no} \\ \text{instante } t, \text{ em um elemento de volume} \\ d^3r = dxdydz, \text{ centrado em } \vec{r}. \end{array} \right.$$

A presença do volume d^3r permite concluir que:

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 \text{ é uma densidade de probabilidade.}$$

Funções de Onda – Equação de Schrödinger

- Princípio da decomposição espectral. Se você medir uma quantidade física:
 - O resultado encontrado precisa pertencer ao conjunto de auto-valores $\{a\}$.
 - A cada auto-valor está associado um auto-estado $\psi_a(\vec{r})$ de tal forma que se $\Psi(\vec{r}, t_0) = \psi_a(\vec{r})$ no instante da medida (t_0) o resultado da medida sempre será “a”.
 - Para um $\Psi(\vec{r}, t_0)$ arbitrário, pode-se escrever $\Psi(\vec{r}, t_0) = \sum_a C_a \psi_a(\vec{r})$, de tal forma que a probabilidade de se medir “a” é $P_a = \frac{|C_a|^2}{\sum_{a'} |C_{a'}|^2}$.
O denominador desta última expressão garante que $\sum_a P_a = 1$.
 - Se o resultado da medida for “a”, temos que, imediatamente após a medida, a função de onda colapsa de $\Psi(\vec{r}, t_0)$ para $\Psi'(\vec{r}, t_0) = \psi_a(\vec{r})$.
- Evolução temporal de $\Psi(\vec{r}, t) \Rightarrow$ A equação de Schrödinger:

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

$$\text{onde } \begin{cases} \Delta = \nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \\ V(\vec{r}, t) \equiv \text{energia potencial} \end{cases}$$

Propriedades da Equação de Schrödinger e comentários adicionais

- Nota-se que a equação de Schrödinger é linear e homogênea em Ψ .

$$\circ \text{ Consequência } \begin{cases} \text{Princípio da superposição} \\ + \\ \Psi \equiv \text{amplitude de probabilidade} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \text{comportamento} \\ \text{ondulatório} \end{cases}$$

- Nota-se que a equação é de primeira ordem em $t \Rightarrow \begin{cases} \text{Conhecido } \Psi(\vec{r}, t_0), \\ \text{conhece-se o futuro!} \end{cases}$

- Comentários:

- Para um sistema composto por uma partícula

$$\int dP(\vec{r}, t) = 1 \therefore C \int |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1 \therefore \int |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r \text{ é finito.}$$

O que equivale dizer que Ψ é quadraticamente integrável.

Note que $\frac{1}{C} = \int |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r$ mais tarde veremos que C não depende do tempo e que Ψ pode ser escolhido para ter $C = 1$.

- Note $\begin{cases} \text{Clássica: condição inicial } \begin{cases} \vec{r}(t_0) \\ \vec{v}(t_0) \end{cases} \Rightarrow \text{o futuro } \begin{cases} \vec{r}(t) \\ \vec{v}(t) \end{cases} \\ \text{Quântica: condição inicial } \Psi(\vec{r}, t_0) \Rightarrow \text{o futuro } \Psi(\vec{r}, t) \end{cases}$

- Conservação no número de partículas será útil em muitos casos.

Descrição Quântica de uma Partícula. Pacotes de onda.

- Partícula livre (nenhuma força atua sobre ela).

○ Neste caso, temos:
$$\begin{cases} V(\vec{r}, t) = 0 \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) \end{cases}$$

○ Percebe-se que:
$$\begin{cases} \text{a solução é } \Psi(\vec{r}, t) = Ae^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \text{ onde } A = \text{constante,} \\ \text{que fornece } i\hbar \cdot (-i\omega) Ae^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot (-k^2) Ae^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}. \end{cases}$$

Se usarmos de Broglie
$$\begin{cases} \vec{p} = \hbar \vec{k} \\ E = \hbar \omega \end{cases} \quad \text{obtemos} \quad \begin{cases} \omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \\ E = \frac{p^2}{2m} \end{cases}$$

Conhecida da mecânica clássica

○ Nota-se que $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = |A|^2$
$$\begin{cases} P(\vec{r}, t) \text{ é homogênea em todo o espaço.} \\ \Psi(\vec{r}, t) \text{ não é quadraticamente integrável e} \\ \therefore \text{ rigorosamente, não pode ser um estado} \\ \text{físico da partícula.} \end{cases}$$

Descrição Quântica de uma Partícula. Pacotes de onda.

- *Princípio da Superposição*: uma combinação de soluções também é solução da Equação de Schrödinger! Isto também vale para misturas “contínuas” de soluções que definem o chamado:

- Pacote de onda tridimensional $\Rightarrow \Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} d^3 k$

- Para facilitar - uma dimensão $\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(k) e^{i(kx - \omega t)} dk$

- Primeiro, considere a forma do pacote em um dado instante, $t = 0$

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

- Comentários
- ★ Nas próximas aulas estudaremos ele se movendo.
 - ★ Note que se ligássemos $V(\vec{r}, t)$, $g(\vec{k})$ mudaria, mas a forma de escrever o pacote continua valendo.
 - ★ Note que a onda plana não é quadraticamente integrável, mas o pacote pode ser.

- Em seguida, tome a transformada de Fourier do pacote

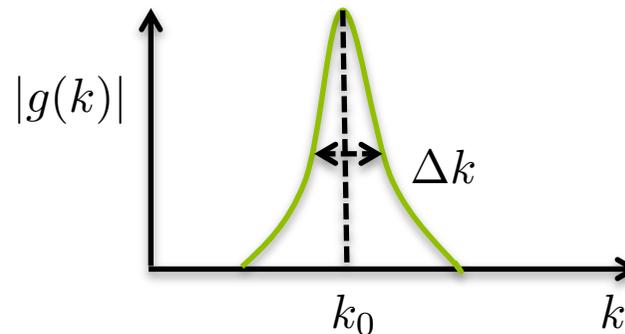
$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \Psi(x, 0) e^{-ikx} dx$$

É razoável supor $g(k)$ centrada em k_0 e com largura Δk . Porque?

Descrição Quântica de uma Partícula. Pacotes de onda.

Que tal a resposta: *Porque queremos que o pacote represente uma partícula com velocidade mais ou menos conhecida e com precisão minimamente controlada.*

Suponha $g(k)$, tal que $|g(k)|$ tenha o formato da figura abaixo de uma distribuição



centrada em k_0 com largura Δk (definida pela 1/2 altura).

Para desenvolver intuição, considere uma soma finita especial com três ondas

planas k_0 , $k_0 - \frac{\Delta k}{2}$, e $k_0 + \frac{\Delta k}{2}$ com amplitudes proporcionais à 1, 1/2, e 1/2,

respectivamente. Isso fornece

$$\Psi(x) = \frac{g(k_0)}{\sqrt{2\pi}} \left[e^{ik_0x} + \frac{1}{2} e^{i(k_0 - \frac{\Delta k}{2})x} + \frac{1}{2} e^{i(k_0 + \frac{\Delta k}{2})x} \right] = \frac{g(k_0)}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_0x} \left[1 + \frac{e^{i\frac{\Delta k}{2}x} + e^{-i\frac{\Delta k}{2}x}}{2} \right],$$

o que resulta em $\Psi(x) = \frac{g(k_0)}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_0x} \left[1 + \cos \frac{\Delta k}{2} x \right] \Rightarrow$ observe os zeros e máximos!

onde, *máximo: interferência construtiva; zero: interferência destrutiva.*

Descrição Quântica de uma Partícula. Pacotes de onda.

- A figura mostra a parte real das 3 ondas cuja soma resulta na parte real de $\Psi(x)$.

○ A curva tracejada é:
 $(1 + \cos \frac{\Delta k}{2} x) \propto |\Psi(x)|$

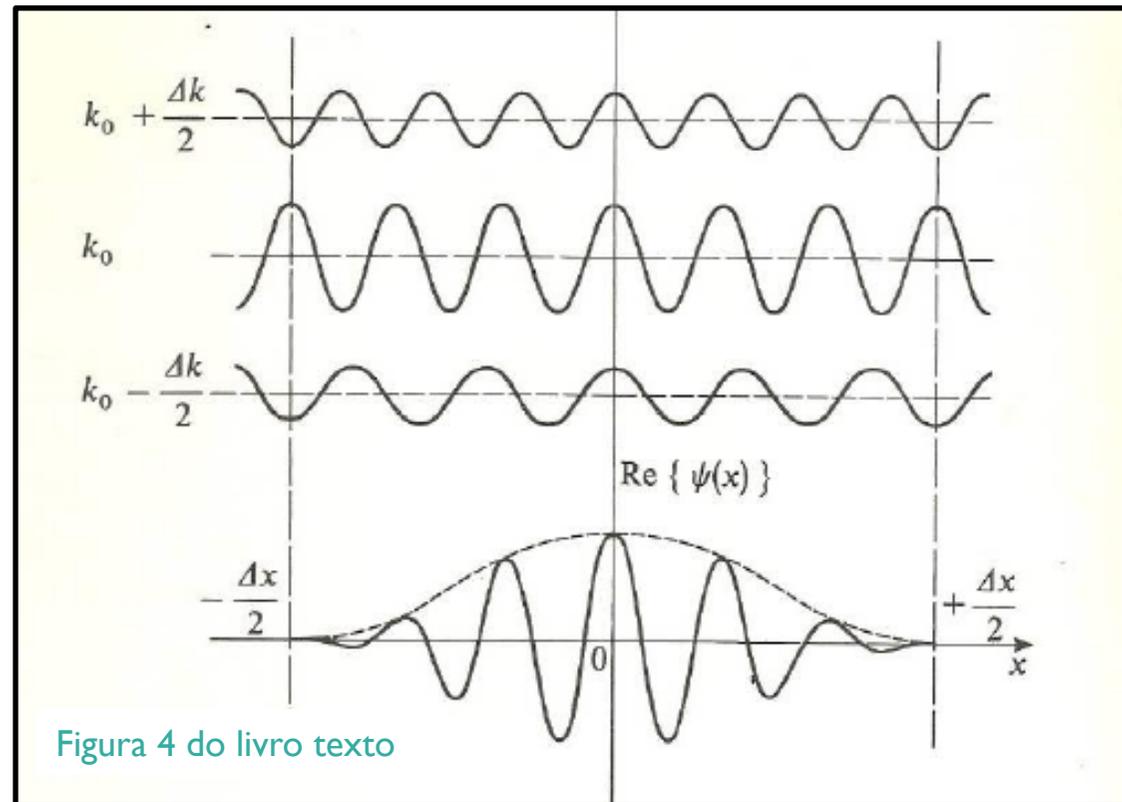


Figura 4 do livro texto

- Em $x = 0$, as três ondas estão em fase e interferem construtivamente.
- Ao se afastar de $x = 0$, elas ficam fora de fase até interferirem destrutivamente por completo em $1 + \cos \frac{\Delta k}{2} x = 0 \Rightarrow \frac{\Delta k}{2} x = \pm \pi \therefore x_1 = -\frac{2\pi}{\Delta k}$ e $x_2 = +\frac{2\pi}{\Delta k}$

- A distância entre os “zeros” é $x_2 - x_1 = \Delta x = \frac{2\pi}{\Delta k} - (-\frac{2\pi}{\Delta k}) = \frac{4\pi}{\Delta k}$

- Ou ainda, $\Delta x \Delta k = 4\pi \rightarrow$ quanto menor (maior) Δx maior (menor) Δk .

Descrição Quântica de uma Partícula. Pacotes de onda.

- *Importante:* A fórmula da caixa azul do slide 7 mostra que $|\Psi(x)|$ é periódica em x e desta forma tem uma série de máximos e mínimos. Isso é devido ao fato que $\Psi(x)$ foi construído pela superposição de um número finito de ondas. Para uma superposição de um número infinito e contínuo de ondas, tal periodicidade pode não ocorrer e $|\Psi(x, 0)|$ apresentar apenas um único máximo localizado em x_0 .
- Para explorar melhor esse assunto, considere novamente

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

- Aprendemos que $|\Psi(x, 0)|$ terá um máximo quando as ondas planas interferirem construtivamente.
- Escreva $g(k) = |g(k)| e^{i\alpha(k)} \Rightarrow$ e suponha $\frac{\Delta k}{2}$ pequeno.

Conhecida por
condição estacionária

Nestas condições vale $\begin{cases} \alpha(k) = \alpha(k_0) + (k - k_0) \left[\frac{d\alpha}{dk} \right]_{k=k_0}, \text{ para } k \\ \text{no intervalo } k_0 - \frac{\Delta k}{2} < k < k_0 + \frac{\Delta k}{2}. \end{cases}$

- Se chamarmos $\left[\frac{d\alpha}{dk} \right]_{k=k_0} \equiv -x_0$, podemos escrever:

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int |g(k)| e^{i\alpha(k_0) - i(k-k_0)x_0 + ikx} dk \text{ e simplificar para}$$

Descrição Quântica de uma Partícula. Pacotes de onda.

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\alpha(k_0) + ik_0 \cdot x} \int |g(k)| e^{i(k-k_0)(x-x_0)} dk$$

- Note que quando $|x - x_0|$ é grande, a exponencial oscila (dentro do intervalo Δk ao redor de k_0) e anula a integral.
- Note que quando $x \approx x_0$, não temos oscilação e $|\Psi(x, 0)|$ é máximo.
- A figura abaixo representa as duas situações

note que é onde $|g(k)| \neq 0$

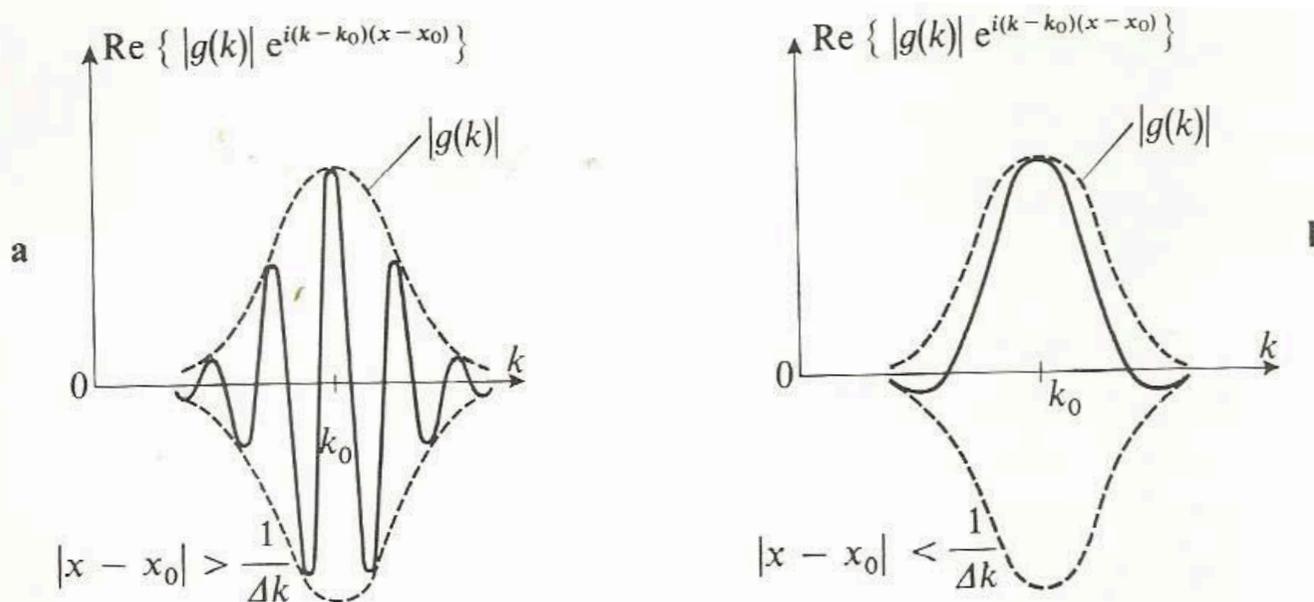


Figura 5 do livro texto

Descrição Quântica de uma Partícula. Pacotes de onda.

- Gostaríamos que a partícula estivesse em um intervalo Δx ao redor de x_0 . Para que a probabilidade de encontrar a partícula fosse nula nos extremos de Δx , a função $e^{i(k-k_0)(x-x_0)}$ tem que dar pelo menos uma oscilada quando k varre o intervalo $[k_0 - \frac{\Delta k}{2}, k_0 + \frac{\Delta k}{2}]$. Isso significa impor $(k-k_0)(x-x_0) \geq \pi$.
- Se Δx é aproximadamente a largura do pacote, encontramos algo importante:

O produto das incertezas $\Delta k \Delta x$ tem um valor mínimo!

- De argumento similar, nasce a chamada relação de incerteza de Heisenberg:

$$\Delta k \Delta x \geq 1/2 \rightarrow \Delta p \Delta x \geq \hbar/2.$$

- Mais tarde veremos que $\hbar/2$ é a condição mínima para um pacote Gaussiano.
- *Comentário sobre a origem do nome “condição estacionária” do slide 9.*

Re-escreva a equação da caixa azul do slide 9 com $g(k) = |g(k)|e^{i\alpha(k)}$, isto é

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int |g(k)| e^{i\alpha(k)} e^{ikx} dk, \text{ e note que a exigência de que a soma das}$$

condição estacionária

fases seja um extremo com respeito à k em k_0 fornece $x_0 = -\left[\frac{d\alpha}{dk}\right]_{k=k_0}$

Valor de x , onde $k < k_0$ e $k > k_0$ contribuem com mesmo sinal: interferência construtiva

Relação de Incerteza de Heisenberg

De volta com a onda plana.

- Vimos que para $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(k_0x - \omega_0t)}$ $\left\{ \begin{array}{l} \text{a probabilidade de encontrar a} \\ \text{partícula em } \forall \text{ posição é constante,} \\ \text{o que faz } \Delta x = \infty. \end{array} \right.$
- A onda plana é um pacote com um único k e uma única frequência
 \therefore uma solução com momento e energia bem definidos!
- Poderíamos escrever a onda plana no formato de pacote, isto é

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(k) e^{i(kx - \omega t)} \text{ com } g(k) = \delta(k - k_0) \text{ and } \therefore \Delta k = 0$$

Comentários

- Caso medíssemos o momento linear de partículas com a função de onda $\Psi(x, 0) = Ae^{ikx}$, a resposta seria sempre $p = \hbar k$.
- Para todos os valores reais de k podemos associar ondas do tipo $\Psi(x, 0) = Ae^{ikx}$. O espectro de momentos varre o contínuo, assim como o espectro equivalente da Mecânica Clássica.
- Como veremos, em seguida, na realidade $g(k)$ sempre tem uma largura diferente de zero

Relação de Incerteza de Heisenberg

De volta com o pacote de ondas planas.

- Vimos que para $t = 0$, o pacote pode ser escrito por

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

- Se uma medida de momento linear fosse feita em $t = 0$, a quantidade $|g(k)|^2$ estaria relacionada com a probabilidade de encontrar o valor $p = \hbar k$.
- Assim, $|g(k)|^2$ pode ser interpretado como a densidade de probabilidade, no espaço dos momentos, de encontrar a partícula com momento $p = \hbar k$.
- Ou ainda, $d\bar{P}(k) = \bar{C}|g(k)|^2 dk$ é a probabilidade de encontrar a partícula com momento linear entre $\hbar k$ e $\hbar k + \hbar dk$.

- Ao varrer todos os valores possíveis, $\int dP(x, 0) = \int d\bar{P}(k) = 1$

- Podemos usar a relação $p = \hbar k$, para re-escrever

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(k) e^{ikx} dk \Rightarrow \Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \bar{\Psi}(p) e^{i\frac{px}{\hbar}} dp$$

$$\begin{aligned} \int |\Psi(x, 0)|^2 dx &= 1 = \frac{1}{2\pi\hbar} \iiint \bar{\Psi}(p)^* \bar{\Psi}(p') e^{i(p'-p)\frac{x}{\hbar}} dp dp' dx = \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \iint \bar{\Psi}(p)^* \bar{\Psi}(p') 2\pi\hbar \delta(p' - p) dp dp' = \int_{-\infty}^{+\infty} |\bar{\Psi}(p)|^2 dp \end{aligned}$$

Isso permite
escolher $C = \bar{C} = 1$

Relação de Incerteza de Heisenberg

- Para um caso simples envolvendo uma distribuição $g(k)$, com apenas três pontos, obtivemos $\Delta k \Delta x \geq 1$. Se repetíssemos a estratégia para $\bar{\Psi}(p)$ obteríamos, conforme já indicado no slide 11, $\Delta p \Delta x \geq \hbar$, onde, Δp é a largura da curva $|\bar{\Psi}(p)|$.
- Essa propriedade, válida para ondas em geral, ficou surpreendente por envolver partículas materiais e ficou conhecida por *Princípio* ou *Relação de incerteza de Heisenberg*. Na prática significa:

É impossível prever o resultado da medida da posição e do momento linear de uma partícula, com precisão arbitrária.

- Para sistemas clássicos, onde $\frac{\hbar}{m}$ pode ser considerado desprezível,

$$\Delta p \Delta x \geq \hbar \rightarrow \Delta v \Delta x \geq \frac{\hbar}{m} \Rightarrow \Delta v \Delta x \geq 0,$$

as trajetórias (conhecimento de v e $x, \forall t$) podem ser previstas.