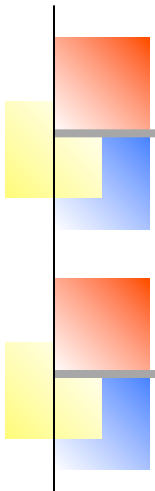


Física IV



Cap 40 - Funções de Onda e Incerteza

Prof. Daniel Jonathan

Niterói, Janeiro / 2016

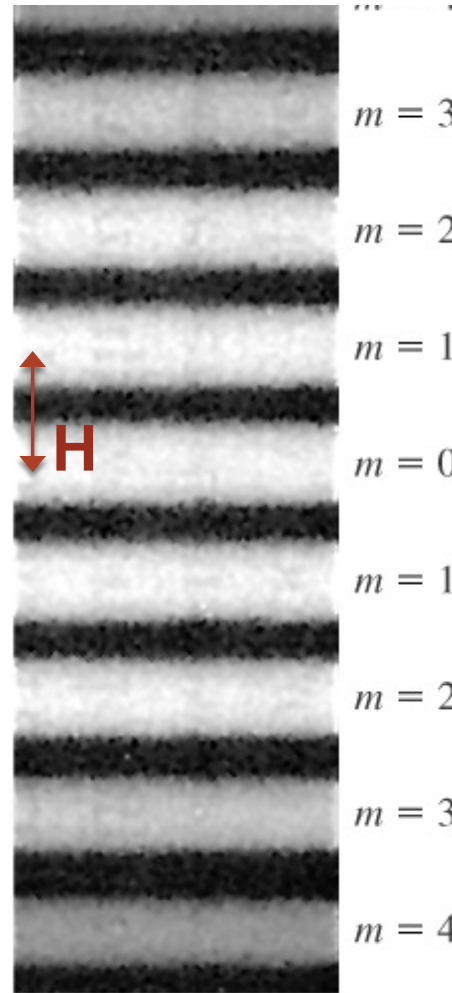
Interferência com duas fendas: ondas

1. A plane wave is incident on the double slit.

2. Waves spread out behind each slit.

3. The waves interfere in the region where they overlap.

4. Bright fringes occur where the antinodal lines intersect the viewing screen.



Interferência construtiva

máxima quando
 $|r_1 - r_2| = m\lambda$
(crista encontra crista)

Interferência destrutiva

máxima quando
 $|r_1 - r_2| = m + \frac{1}{2}\lambda$
(crista encontra vale)

Distância entre máximos consecutivos

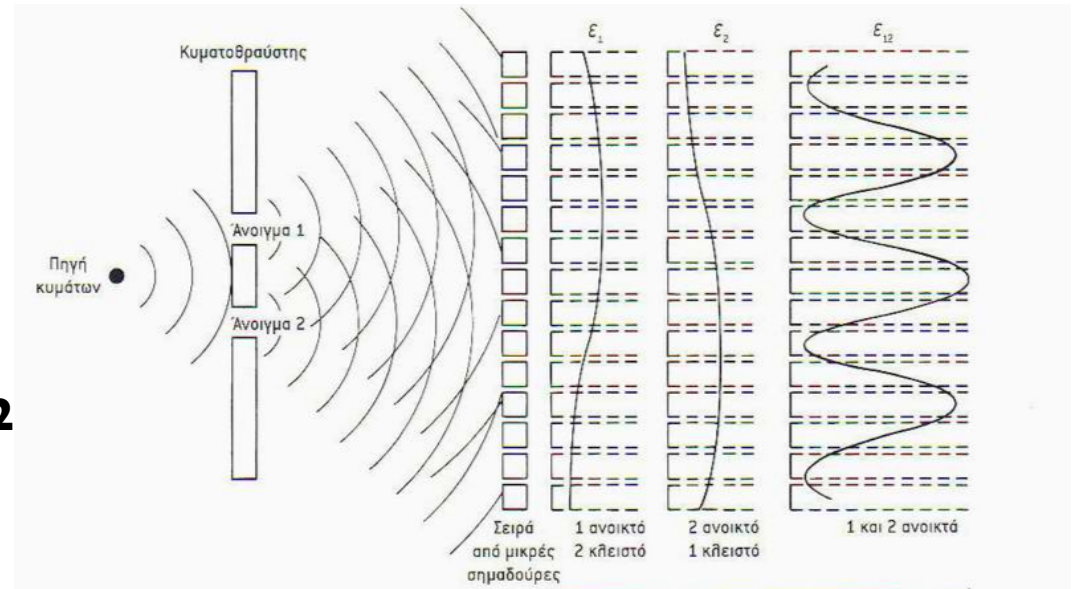
$$H = \lambda D / d$$

Interferência com duas fendas: ondas

Experiência da fenda dupla com ondas d'água, som etc:

h = altura da onda

I = intensidade da onda = h^2



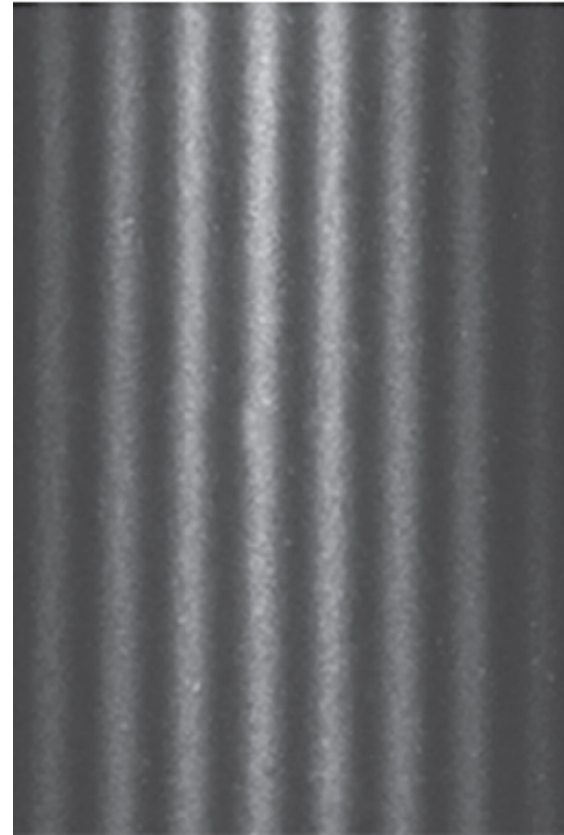
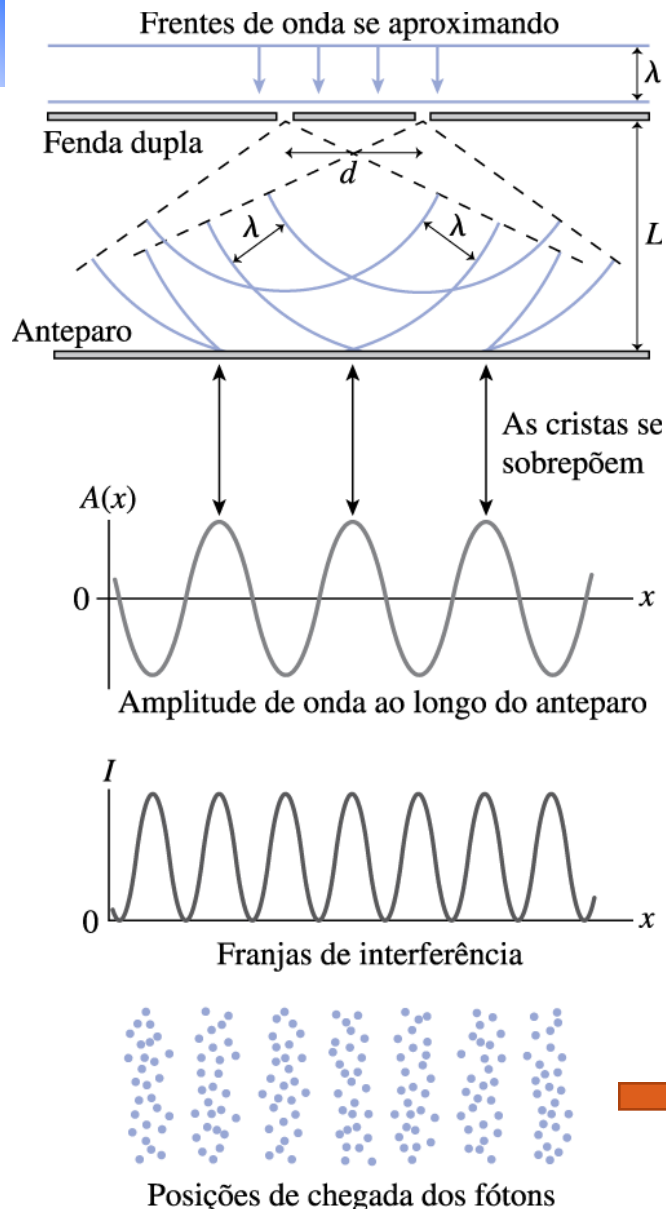
$$h_{12} = h_1 + h_2$$

$$I_{12} = h_{12}^2 = h_1^2 + h_2^2 + 2h_1h_2$$

$$I_{12} \neq I_1 + I_2$$

Interferência!

Duas fendas com partículas quânticas



Não sabemos prever onde cada partícula irá chegar – mas há regiões de maior e menor *probabilidade*

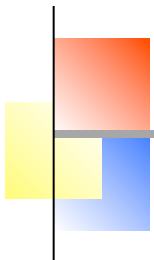
Revisão: Probabilidade

Em muitas situações não podemos prever o que irá ocorrer em um experimento, mas apenas estimar a *chance* de cada resultado possível

Ex 1: N resultados supostos igualmente plausíveis. Nesse caso a probabilidade de cada resultado é $1/N$



Ex: Se lançamos um dado supostamente justo de seis lados, a probabilidade de obter o valor 1 é $1/6$.



Probabilidade

Ex 2: qdo há mais de um resultado ‘desejável’

Ex: Quanto lançamos o dado, qual a probabilidade de obtermos 1 **ou** 3?

Seis resultados possíveis, dos quais dois desejáveis.

A probabilidade de sucesso é: $1/6 + 1/6 = 2/6 = 1/3$.

Em geral*, a palavra “**OU**” é um sinal para somar probabilidades:

*Desde que P_1 & P_2 se
refiram a resultados
mutuamente exclusivos
de um mesmo experimento

$$P_{1ou2} = P_1 + P_2$$

Probabilidade

Ex 3: combinando experimentos independentes

Simultaneamente lançamos um dado e uma moeda
Qual a probabilidade de obtermos 2 e Cara ?



- A) $2 / 3$
- B) $1 / 12$
- C) $1 / 2$
- D) $1 / 6$

Probabilidade

Ex 3: combinando experimentos independentes

Simultaneamente lançamos um dado e uma moeda
Qual a probabilidade de obtermos 2 e Cara ?



A) 2 / 3

B) 1 / 12

C) 1 / 2

D) 1 / 6

6 x 2 = 12 combinações de resultados,
todos igualmente plausíveis.

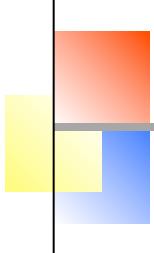
A probabilidade de uma dessas
combinações é portanto

$$1/12 = 1/2 \times 1/6$$

Em geral*, a palavra “E” é um sinal para multiplicar:

*Desde que P_1 & P_2 se refiram
a resultados de experimentos
independentes

$$P_{1e2} = P_1 \cdot P_2$$



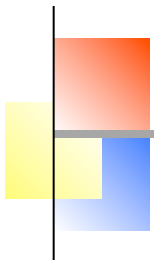
Probabilidade

Ex 4: combinando “E” e “OU”:

Jogue uma moeda 3 vezes.

Qual é a probabilidade de obter Cara duas vezes?

- A) $1/4$
- B) $3/8$
- C) $1/2$
- D) $3/4$



Probabilidade

Ex 4: combinando “E” e “OU”:

Jogue uma moeda 3 vezes.

Qual é a probabilidade de obter Cara duas vezes?

A) $1/4$

B) $3/8$

C) $1/2$

D) $3/4$

Prob[(C e C e c)
ou (C e c e C)
ou (c e C e C)]

$$= (1/2)^3 + (1/2)^3 + (1/2)^3$$

Probabilidade

Ex 5: distribuições não-uniformes

Há situações em que os diferentes resultados possíveis de um experimento não são igualmente plausíveis



Ex: Um dado 'viciado', com um dos lados mais pesado que os outros.

Nesse caso é possível ter, p. exemplo:

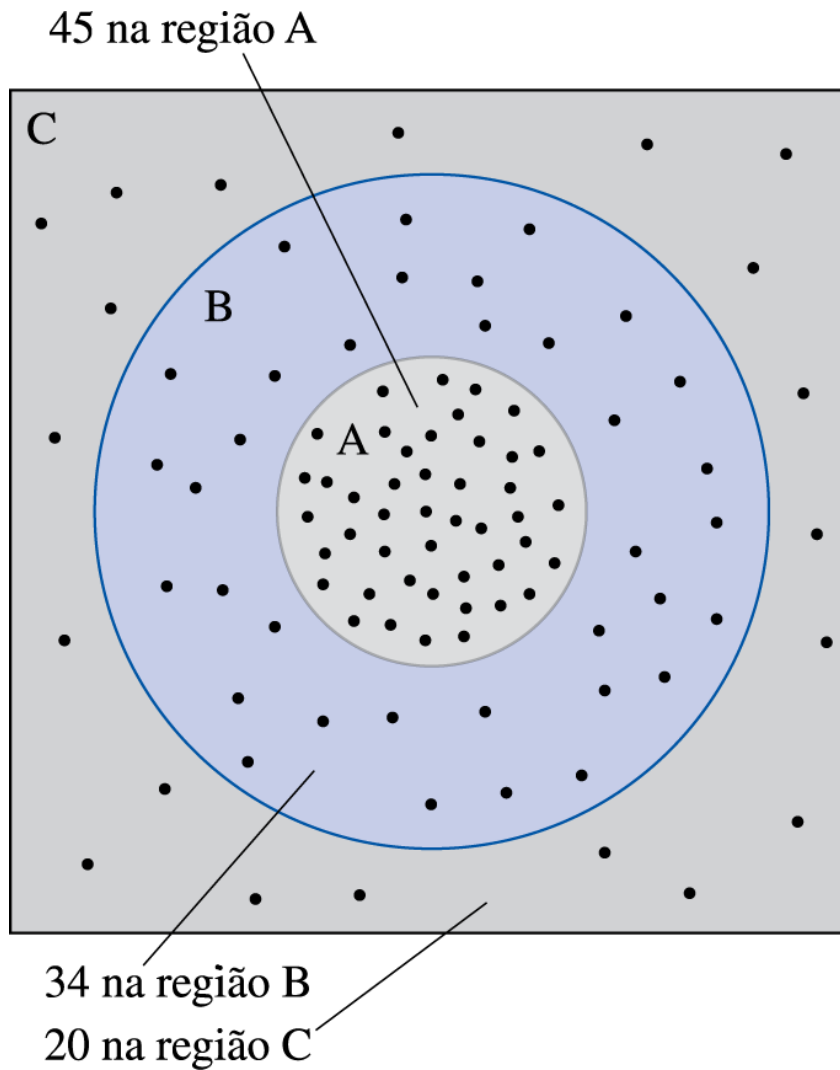
$$P[6] = 1/2,$$

$$P[2] = P[3] = P[4] = P[5] = 1/9$$

$$P[1] = 1/18$$

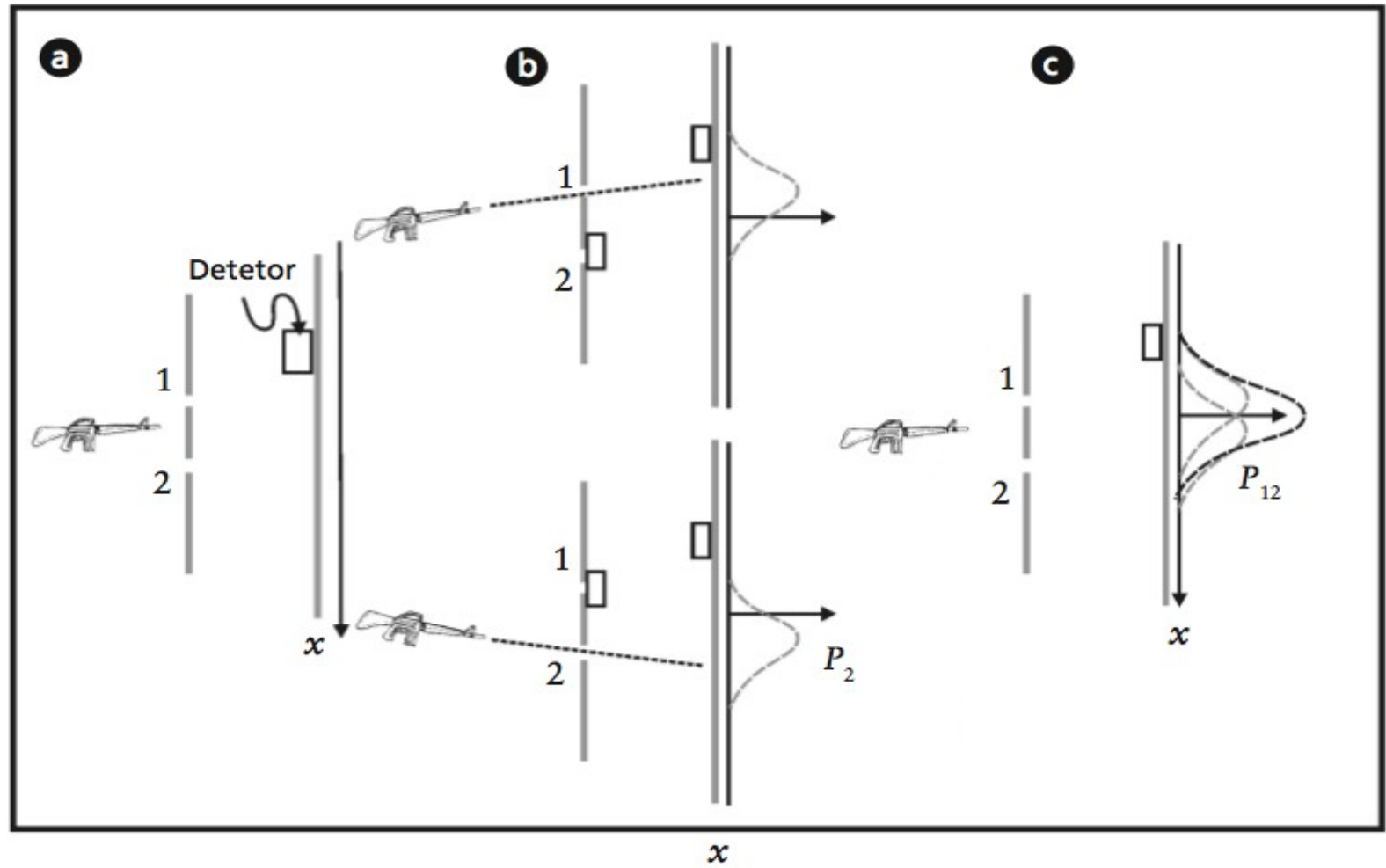
Condição [normalização]: soma das probs = 1 !

Probabilidade

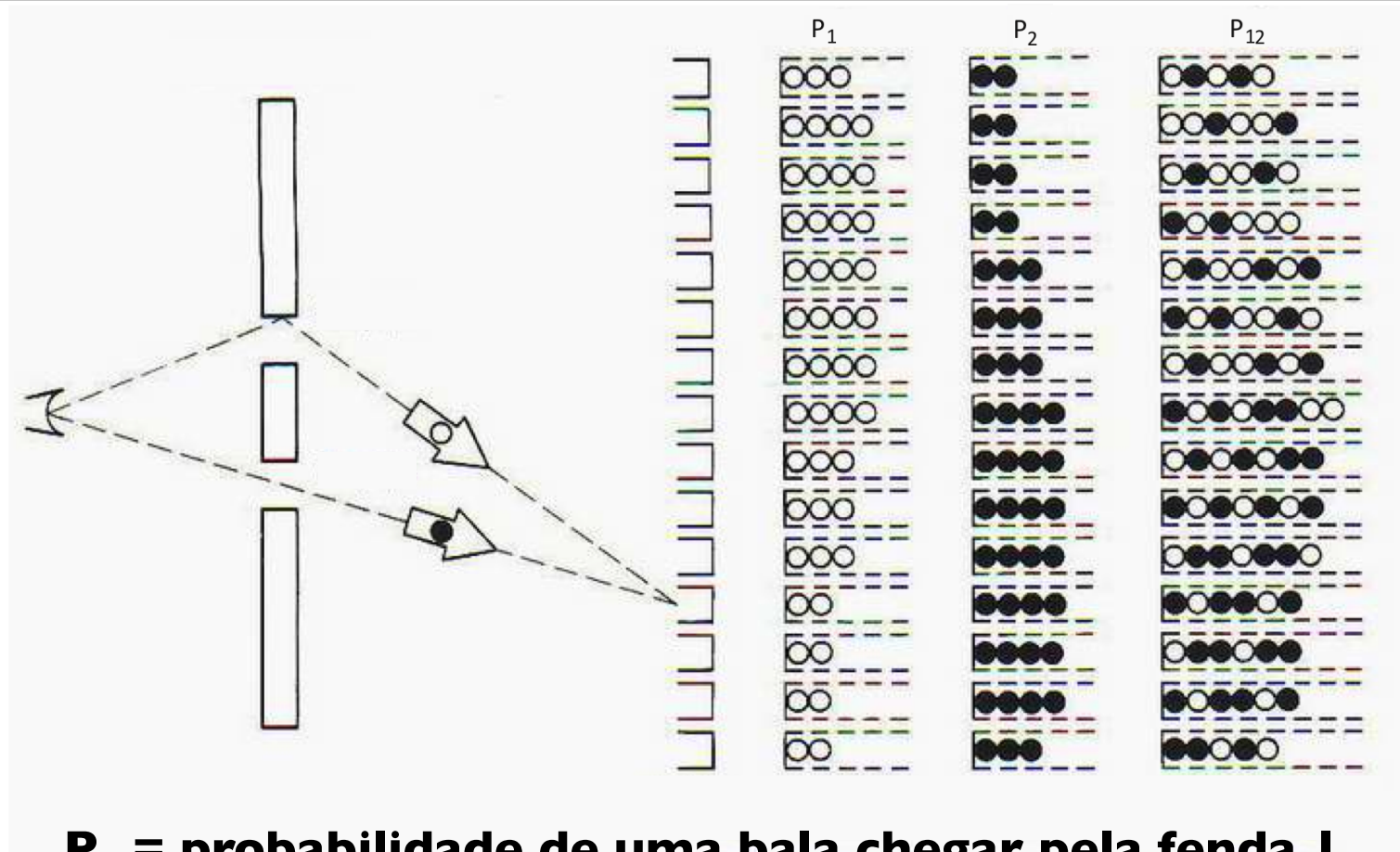


$$P_A = \lim_{N_{tot} \rightarrow \infty} \frac{N_A}{N_{tot}}$$

Duas fendas com projéteis clássicos



Duas fendas com projéteis clássicos



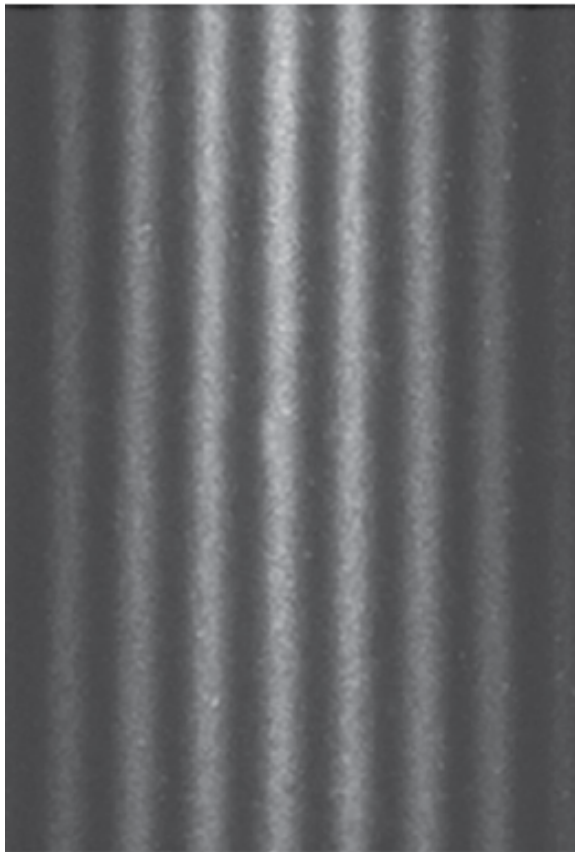
P_1 = probabilidade de uma bala chegar pela fenda 1

P_2 = probabilidade de uma bala chegar pela fenda 2

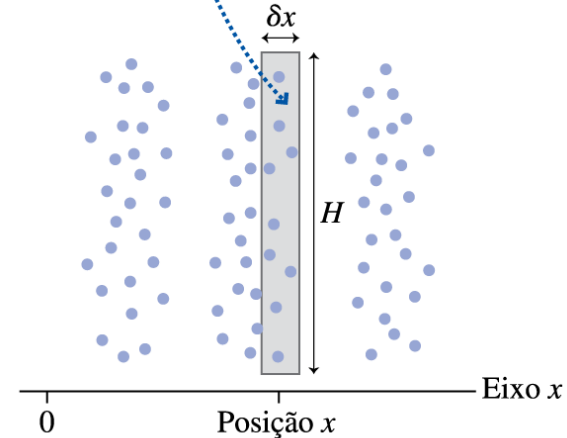
P_{12} = probabilidade de uma bala chegar por qualquer fenda

$$P_{12} = P_{1 \text{ ou } 2} = P_1 + P_2$$

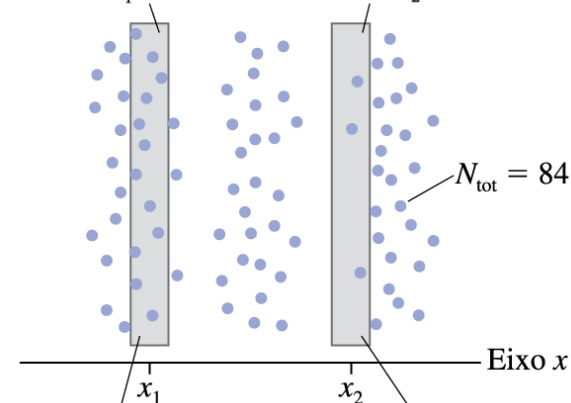
Duas fendas com partículas quânticas



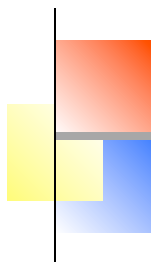
- (a) O número de fótons nesta faixa estreita, quando ela está na posição x , é N (com δx centrado em x).



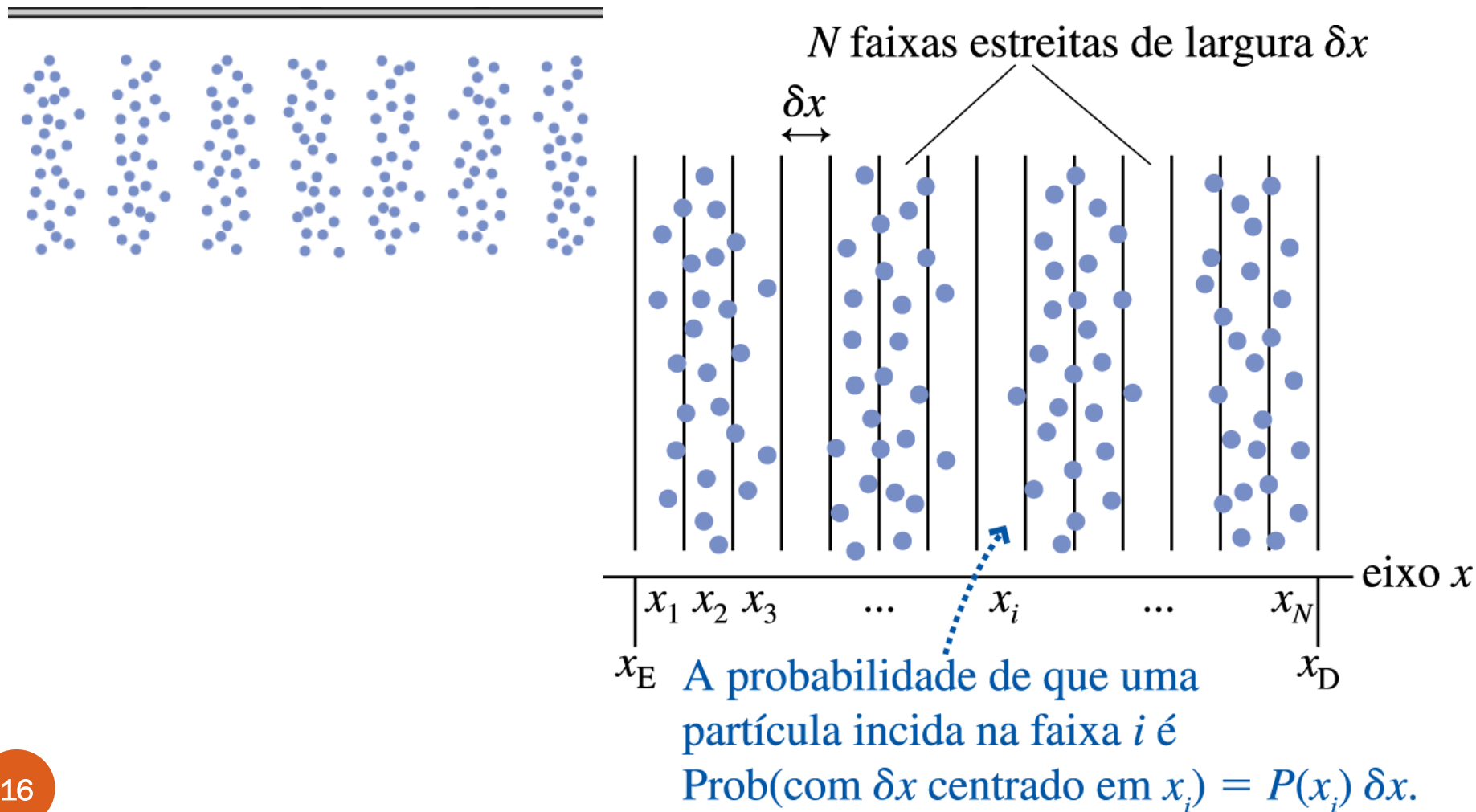
- (b) N (com δx centrado em x_1) = 12 N (com δx centrado em x_2) = 3



Prob (com δx centrado em x_1) $\approx 12/84$	Prob (com δx centrado em x_2) $\approx 3/84$
$= 4/28$	$= 1/28$



Duas fendas com partículas quânticas

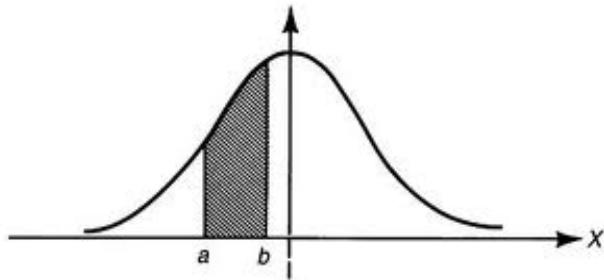


Densidade de probabilidade

- $P(x)$ é uma ***densidade de probabilidade*** (precisa ser multiplicada por uma distância para obter uma probabilidade).
- Ex: Podemos aproximar a probabilidade de obter $x = x_i$, dentro de uma faixa da largura Δx , usando:

$$Prob\left[x_i - \frac{\Delta x}{2} \leq x \leq x_i + \frac{\Delta x}{2}\right] \approx P(x_i) \cdot \Delta x$$

- Mais precisamente: a probabilidade de encontrar x numa dada faixa de valores é igual à área sob a curva de $P(x)$ naquela faixa:



$$Prob[a \leq x \leq b] = \int_a^b P(x) \, dx$$

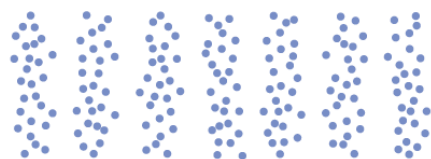
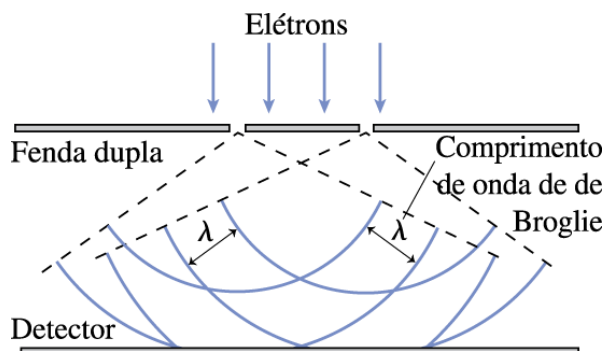
Valor Esperado

Def: o valor esperado (ou valor médio) de uma qtda aleatória x é a média dos seus valores possíveis, ponderada pelas respectivas probabilidades

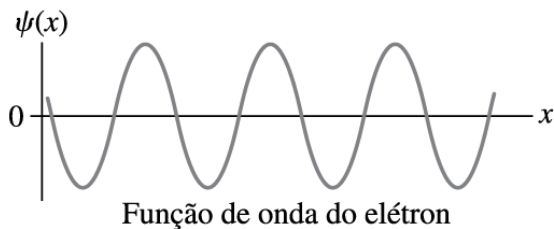
- Para $x_i = x_1, x_2, x_3 \dots x_n$ (valores discretos): $\langle x \rangle = \sum_{i=1}^n x_i P(x_i)$
 $\langle x \rangle =$ valor esperado (média ponderada) de x

- Para x contínuo: $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x P(x) dx$

Funções de onda



Posições de incidência de elétrons no detector



Como ocorre interferência: existe uma onda de amplitude $\psi(x)$, que vamos chamar de função de onda da partícula.

$\psi_1(x)$: amplitude para a partícula chegar no ponto x pela fenda 1

$\psi_2(x)$ amplitude para a partícula chegar no ponto x pela fenda 2.

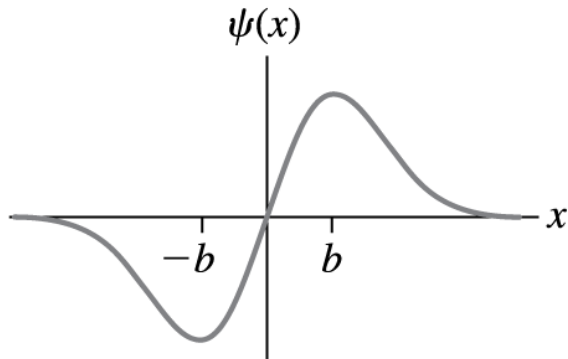
Quando ambas as fendas estão abertas, a amplitude total é a soma ou 'superposição' dessas duas:

$$\psi_{12}(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x)$$

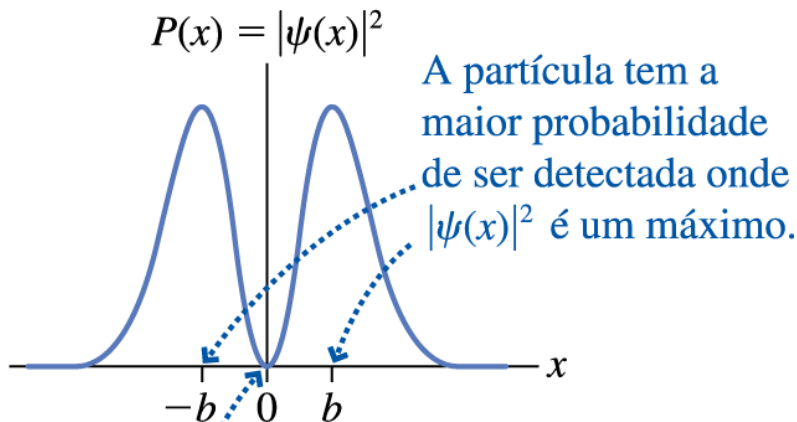
Do ponto de vista de partículas, a **probabilidade** de uma delas aparecer numa região ao redor do ponto x deve ser proporcional à intensidade da onda, portanto ao módulo quadrado $|\psi_{12}(x)|^2$

Função de onda: interpretação probabilística

(a) Função de onda



(b) Densidade de probabilidade

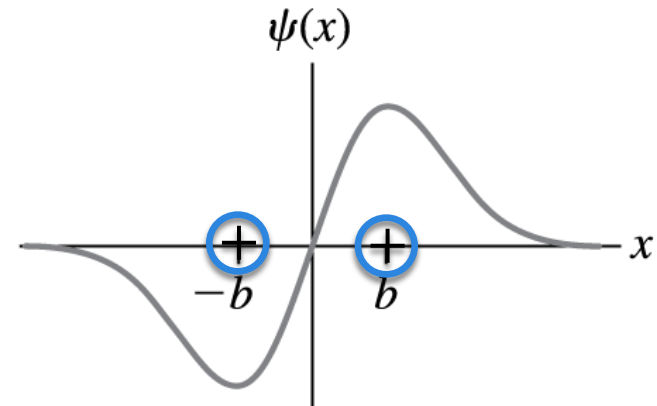


A partícula tem probabilidade nula de ser detectada onde $|\psi(x)|^2 = 0$.

A partícula tem a maior probabilidade de ser detectada onde $|\psi(x)|^2$ é um máximo.

Exemplo de interpretação física possível para esta função de onda:

Um elétron em uma **molécula diatômica** (ex: H_2)



O elétron está 'compartilhado' pelos dois núcleos (está simultaneamente a redor de *ambos*)



Teste conceitual

Áreas A e B são iluminadas por um mesmo feixe de luz.

A área A é 3 vezes maior que a área B, mas a luz que atinge B é duas vezes mais intensa que a que chega em A.

P: Se $P(A)$ e $P(B)$ são as probabilidades de cada área ser atingida por cada fóton do feixe, então

A) $P(A) = 3 / 2 \ P(B)$

B) $P(A) = 3 / 4 \ P(B)$

C) $P(A) = 1 / 2 \ P(B)$

D) $P(A) = 1 / 4 \ P(B)$



Teste conceitual

Áreas A e B são iluminadas por um mesmo feixe de luz.

A área A é 3 vezes maior que a área B, mas a luz que atinge B tem o dobro da amplitude que a que chega em A.

P: Se $P(A)$ e $P(B)$ são as probabilidades de cada área ser atingida por cada fóton do feixe, então

A) $P(A) = 3 / 2 \quad P(B)$

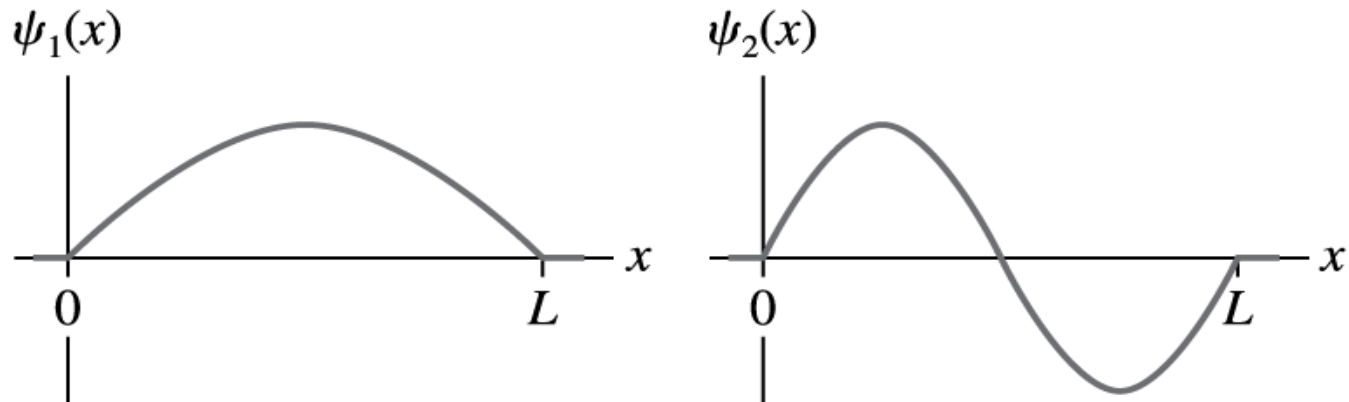
B) $P(A) = 3 / 4 \quad P(B)$

C) $P(A) = 1 / 2 \quad P(B)$

D) $P(A) = 1 / 4 \quad P(B)$

Teste conceitual

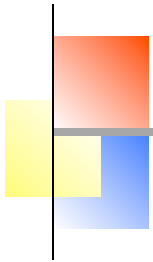
Um elétron está confinado em uma região finita do espaço, de comprimento L (uma 'caixa'). Duas funções de onda possíveis para ele estão representadas abaixo:



P: Em um dado momento a função de onda do elétron é a superposição $\Psi_3(x) = \Psi_1(x) + \Psi_2(x)$. Nesse caso, se procurarmos o elétron, a probabilidade de detectá-lo na metade esquerda da caixa é

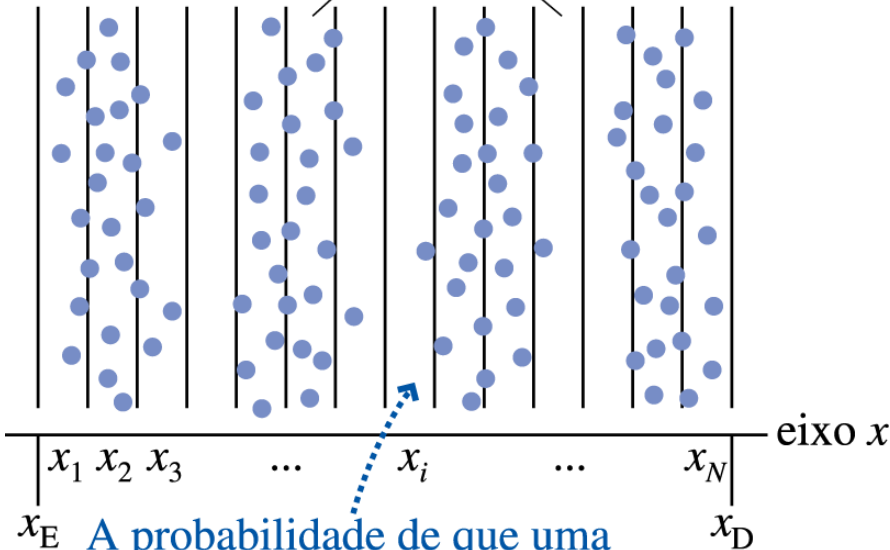
- A) Menor que a de detectá-lo do lado direito
- B) Maior que a de detectá-lo do lado direito
- C) Igual à probabilidade de detectá-lo do lado direito
- D) Incerta - não é possível afirmar se ela será maior, menor ou igual à probabilidade de detectá-lo do lado direito

Normalização

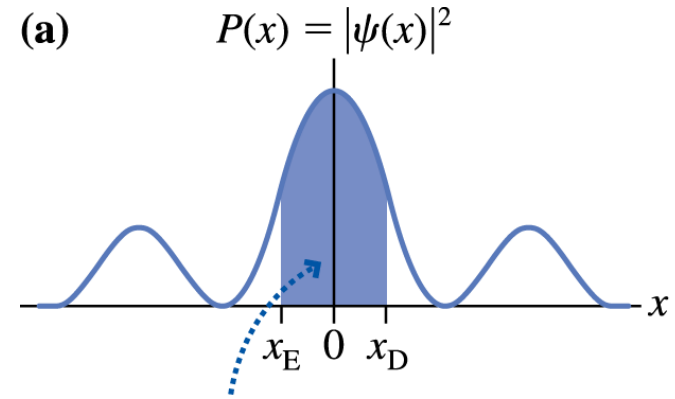


N faixas estreitas de largura δx

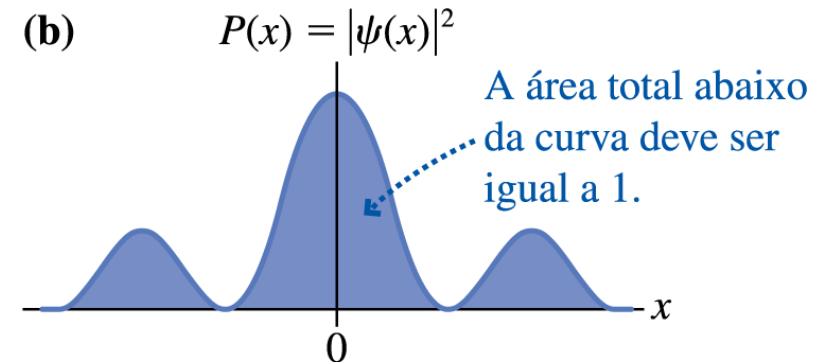
δx



A probabilidade de que uma partícula incida na faixa i é
 $\text{Prob}(\text{com } \delta x \text{ centrado em } x_i) = P(x_i) \delta x.$



A área abaixo da curva entre x_E e x_D é a probabilidade de encontrar a partícula entre x_E e x_D .



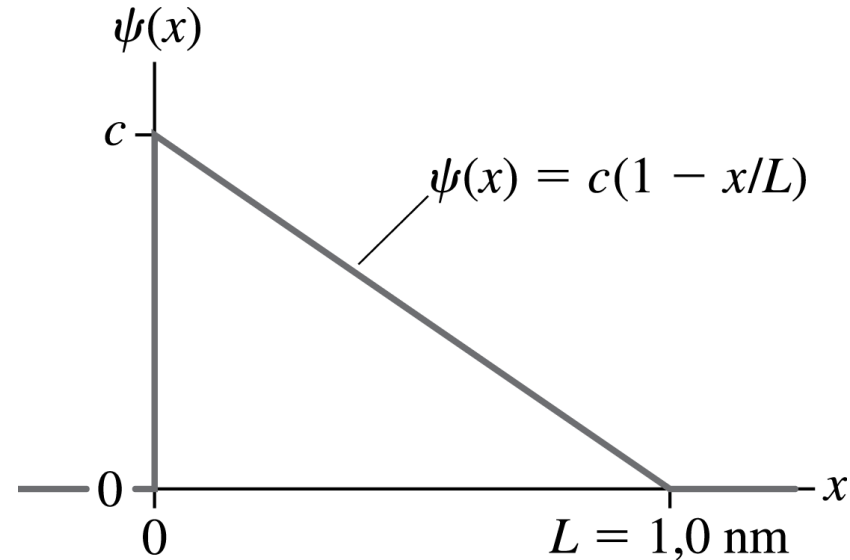
A área total abaixo da curva deve ser igual a 1.

Em todo intervalo de x : $-\infty$ até $+\infty$

Exercício de normalização

40.2 - A figura mostra a função de onda de um partícula confinada em uma região delimitado por $x = 0$ e $x = L = 1,0 \text{ nm}$. Fora dessa região, a função de onda é nula.

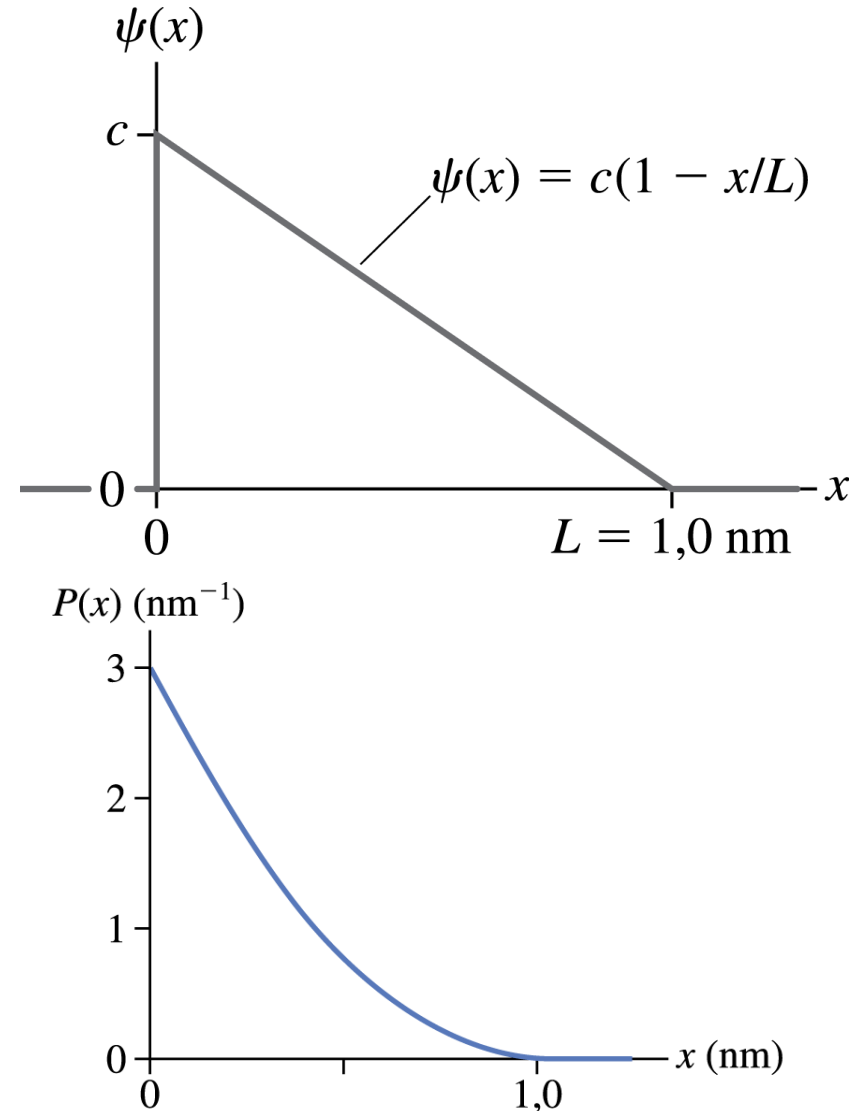
- Determine o valor de c .
- Desenhe o gráfico da densidade de probabilidade $P(x)$.
- Trace uma figura com pontos que indique onde as primeiras 40 ou 50 partículas podem se encontradas.
- Calcule a probabilidade de encontrar a partícula em uma região com largura $\delta x = 0,01 \text{ nm}$ centrada nas posições $x_1 = 0,05 \text{ nm}$, $x_2 = 0,5 \text{ nm}$ e $x_3 = 0,95 \text{ nm}$.



Exercício de normalização

40.2 - A figura mostra a função de onda de um partícula confinada em uma região delimitado por $x = 0$ e $x = L = 1,0$ nm. Fora dessa região, a função de onda é nula.

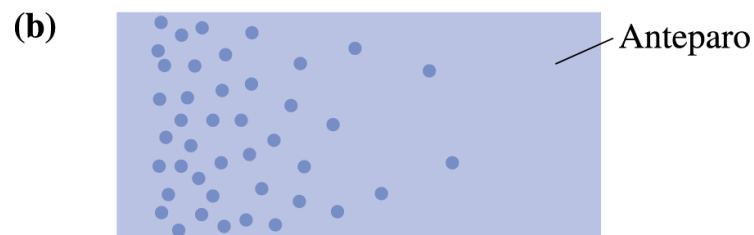
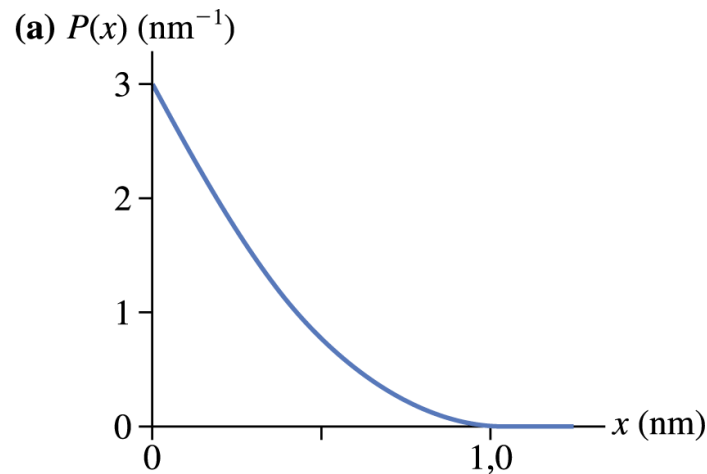
- Determine o valor de c .
- Desenhe o gráfico da densidade de probabilidade $P(x)$.
- Trace uma figura com pontos que indique onde as primeiras 40 ou 50 partículas podem se encontradas.
- Calcule a probabilidade de encontrar a partícula em uma região com largura $\delta x = 0,01$ nm centrada nas posições $x_1 = 0,05$ nm, $x_2 = 0,5$ nm e $x_3 = 0,95$ nm.

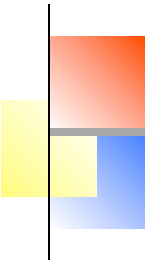


Normalização

A figura abaixo mostra a função de onda de um partícula confinada em uma região delimitado por $x = 0$ e $x = L = 1,0$ nm. Fora dessa região, a função de onda é nula.

c) Trace uma figura com pontos que indique onde as primeiras 40 ou 50 partículas podem se encontradas.





Exercício de normalização

40.3 – Uma determinada partícula é descrita pela função de onda

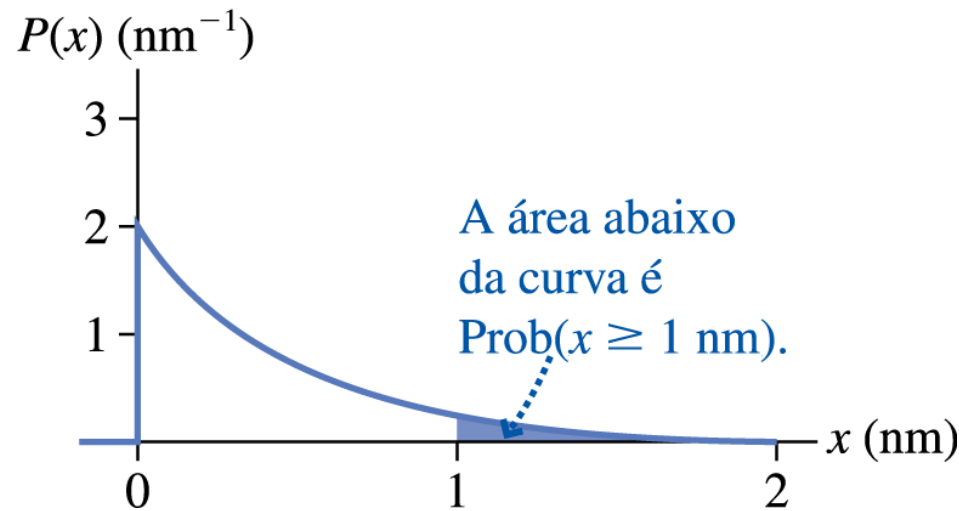
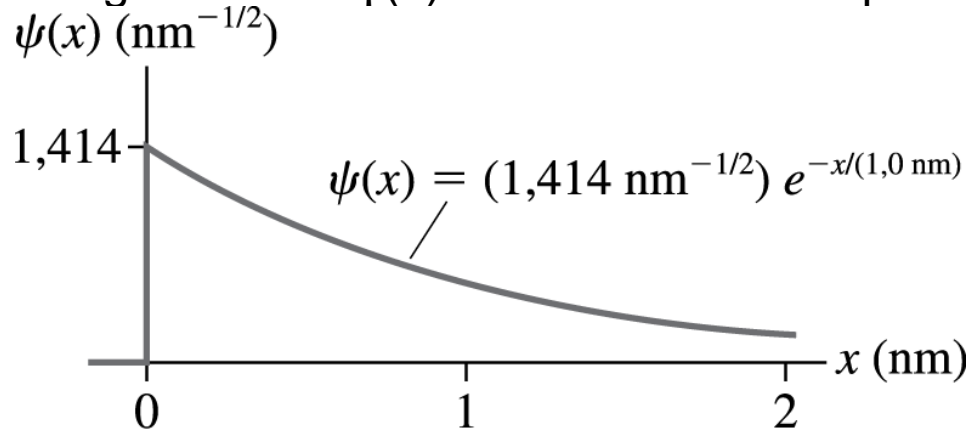
$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ ce^{-x/L} & x \geq 0 \end{cases} \quad \text{onde } L = 1 \text{ nm.}$$

- a) Determine o valor de c .
- b) Desenhe os gráficos de $\psi(x)$ e da densidade de probabilidade $P(x)$.
- c) Calcule a probabilidade de encontrar um partícula na região $x \geq 1 \text{ nm}$

Exercício de normalização

40.3 – Uma determinada partícula é descrita pela função de onda

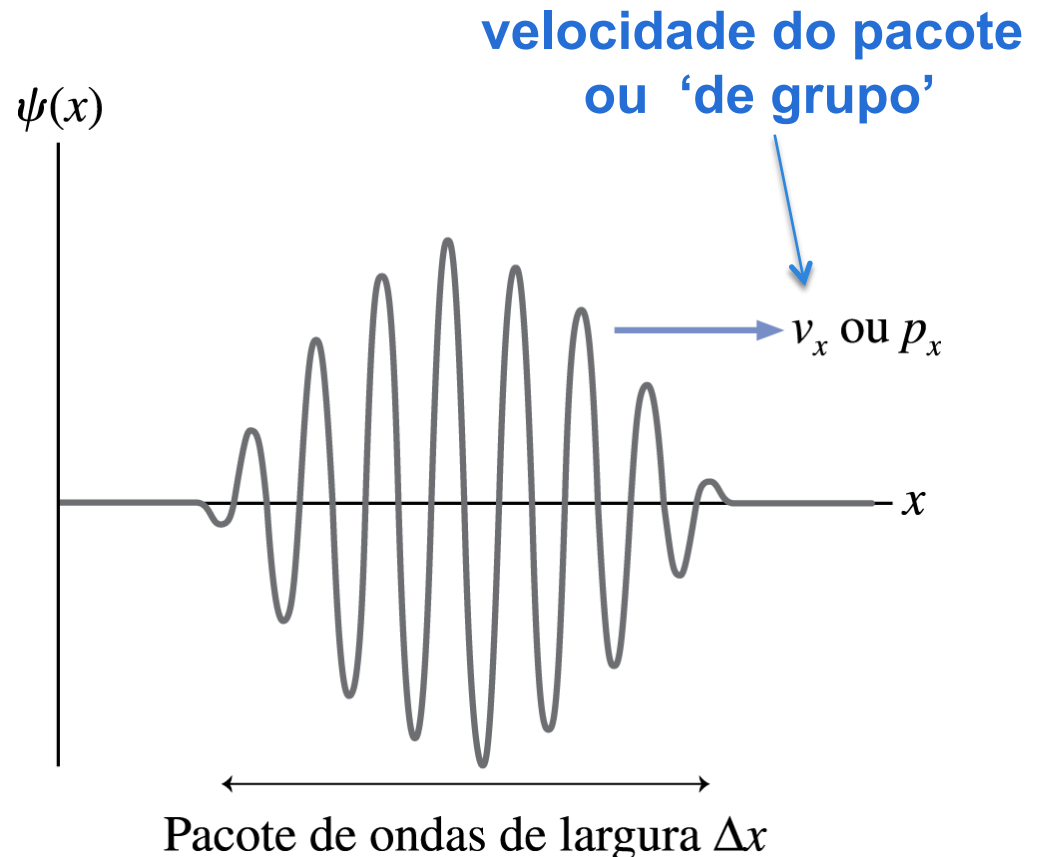
b) Desenhe os gráficos de $\psi(x)$ e da densidade de probabilidade $P(x)$.



Pacotes de onda

Combinando imagem de partícula e onda: onda localizada ou 'pacote'

Pacote visto em um ponto fixo do tempo, ao longo do espaço:



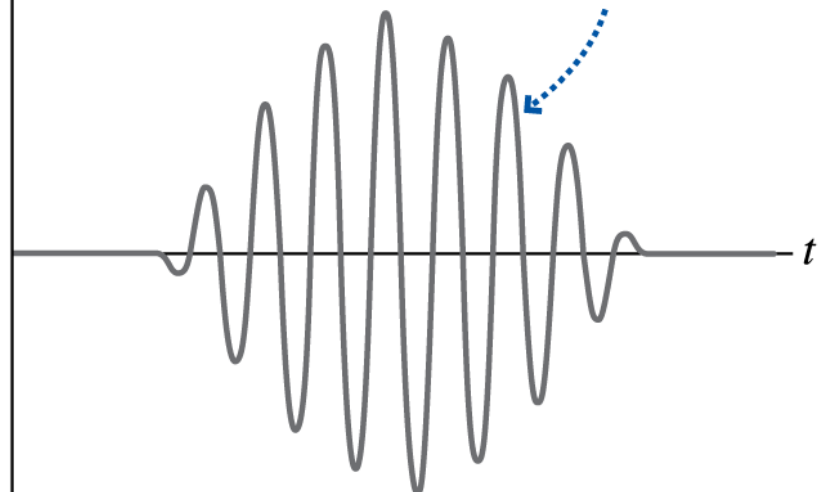
Pacotes de onda

Pacote visto em um ponto fixo do espaço, ao longo do tempo:

Um pacote de onda pode representar tanto uma partícula material (função de onda ψ) quanto um fóton (campo eletromagnético E).

ψ ou E

O pacote de onda oscila, o que é uma característica das ondas.



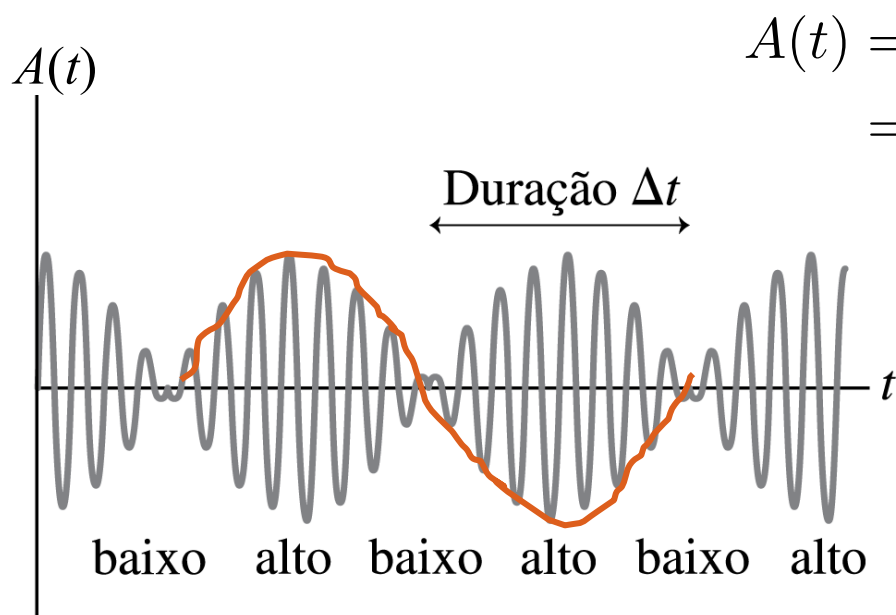
Duração do pacote de onda Δt

O pacote de onda é localizado, o que é uma característica das partículas.

Como montar um pacote (clássico ou quântico)

Precisamos combinar ondas com **diferentes frequências/comprimentos de onda**

Exemplo simples: **batimentos**



$$\begin{aligned} A(t) &= A_0 [\cos(2\pi f_1 t) + \cos(2\pi f_2 t)] \\ &= 2A_0 \underbrace{\cos(\pi(f_1 - f_2)t)}_{\text{Amplitude variando lentamente, com tempo } \Delta t = 1/(f_1 - f_2) = 1/\Delta f} \cos(\pi(f_1 + f_2)t) \end{aligned}$$

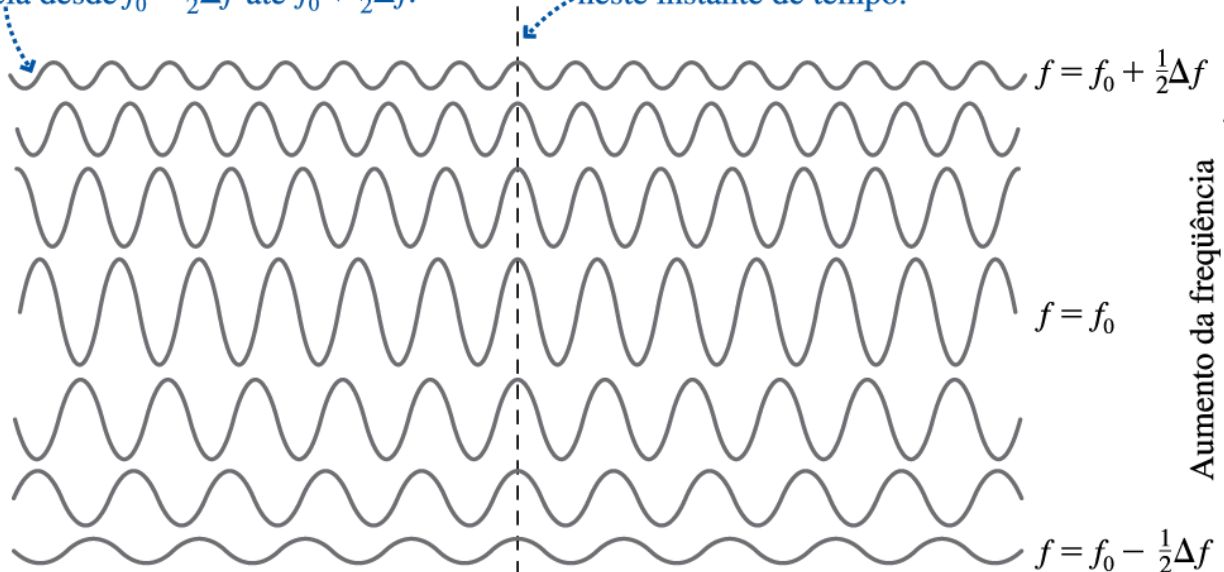
Amplitude variando lentamente, com tempo $\Delta t = 1/(f_1 - f_2) = 1/\Delta f$ (= meio período completo) entre 2 'pulsos' sucessivos

Como montar um pacote (clássico ou quântico)

Mais geralmente: qualquer formato de onda pode ser construído assim (Análise de Fourier)

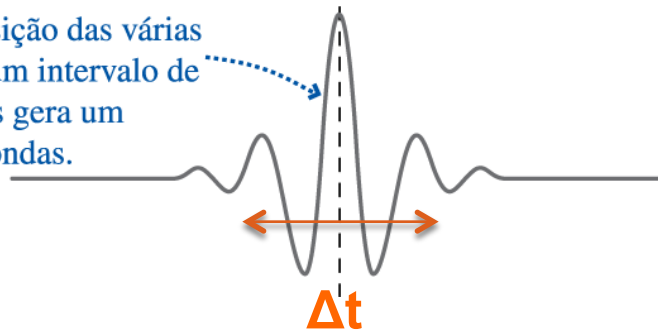
As ondas a serem adicionadas variam em frequência desde $f_0 - \frac{1}{2}\Delta f$ até $f_0 + \frac{1}{2}\Delta f$.

As ondas estão todas em fase neste instante de tempo.



Obs: vide applet 'Fourier' no site do curso

A superposição das várias ondas em um intervalo de frequências gera um pacote de ondas.



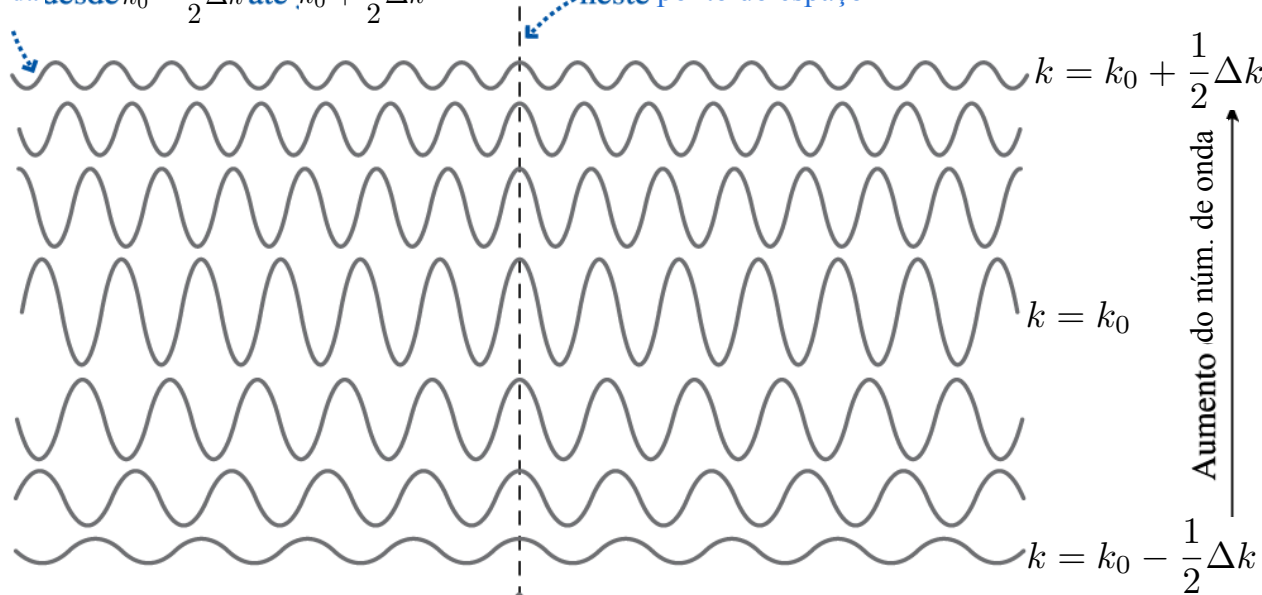
Teorema geral: sempre $\Delta t \Delta f \gtrsim 1$

Como montar um pacote (clássico ou quântico)

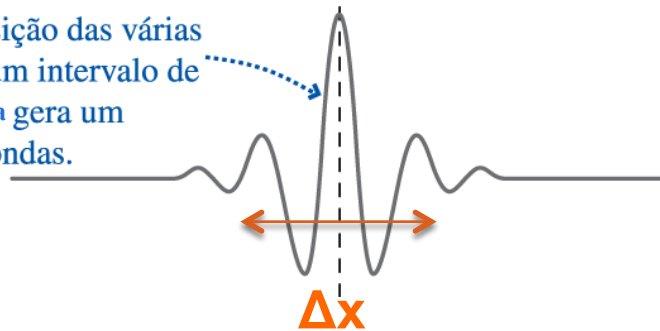
Podemos igualmente analisar pacotes no espaço, formados por ondas com diferentes comprimentos de onda λ , ou (equiv.) números de onda $k = 2\pi/\lambda$

As ondas a serem adicionadas variam em núm. de onda desde $k_0 - \frac{1}{2}\Delta k$ até $k_0 + \frac{1}{2}\Delta k$

As ondas estão todas em fase neste ponto do espaço

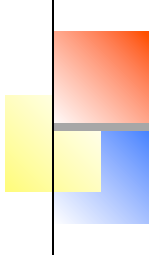


A superposição das várias ondas em um intervalo de núms. de onda gera um pacote de ondas.



Obs: vide applet 'Fourier' no site do curso

Teorema geral: sempre
 $\Delta x \Delta(1/\lambda) = \Delta x \Delta(k/2\pi) \gtrsim 1$



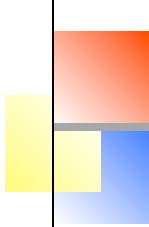
Relação de incerteza de Heisenberg

Em MQ: como $p = h / \lambda = h k / 2\pi = \hbar k$, obtemos

$$\Delta x \Delta p = \hbar \Delta x \Delta k \gtrsim h$$

Em palavras: uma partícula quântica não pode ter valores de posição e momento arbitrariamente bem definidos ao mesmo tempo. Se há uma incerteza Δx na sua posição, seu momento deve ter *no mínimo* incerteza $\Delta p \sim h/\Delta x$, e vice-versa.

Exemplo: não podemos ter uma partícula perfeitamente em repouso ($\Delta p = 0$) em um determinado local ($\Delta x = 0$)



Relação de incerteza de Heisenberg

Em MQ: como $p = h / \lambda = h k / 2\pi = \hbar k$, obtemos

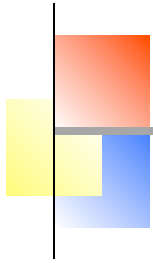
$$\Delta x \Delta p = \hbar \Delta x \Delta k \gtrsim h$$

Obs: Dependendo do significado técnico das ‘incertezas’, o lado direito desta desigualdade pode aparecer multiplicado ou dividido por uma constante como 2, ou π .

O importante é a **ordem de grandeza** desse limite mínimo, regido pela constante h

Ex: o Randall obtém (por outro argumento):

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar$$



Onda Plana vs. Pacote de onda

$$\Psi(x, t) = A \cos(kx - \omega t)$$



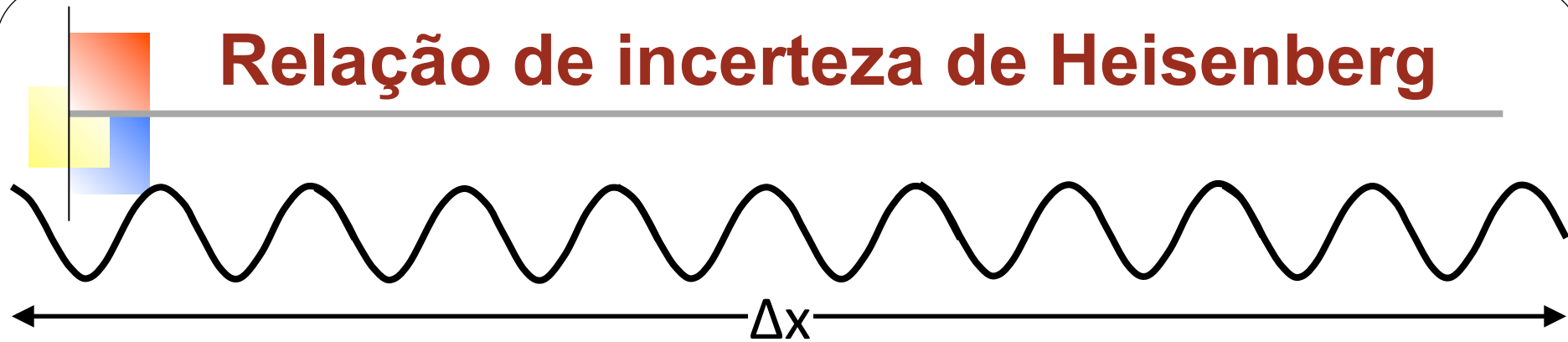
$$\Psi(x, t) = \sum_n A_n \cos(k_n x - \omega_n t)$$



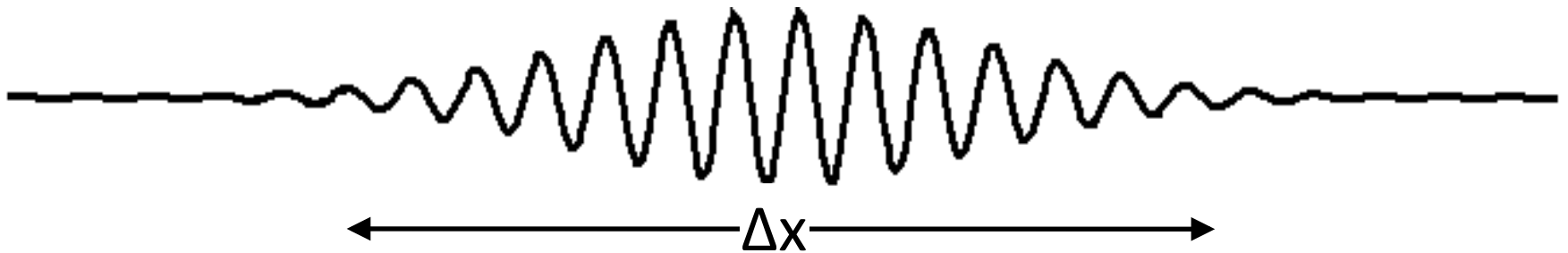
Para qual desses tipos de funções de onda a posição (x) e o momento (p) da partícula quântica estão mais bem-definidos?

- A) x mais bem-definido para onda plana, p mais bem-definido para pacote.
- B) p mais bem-definido para onda plana, x mais bem-definido para pacote.
- C) p mais bem-definido para onda plana, x igualmente bem-definido p / ambos.
- D) p igualmente bem-definido p / ambos, x mais bem-definido para pacote

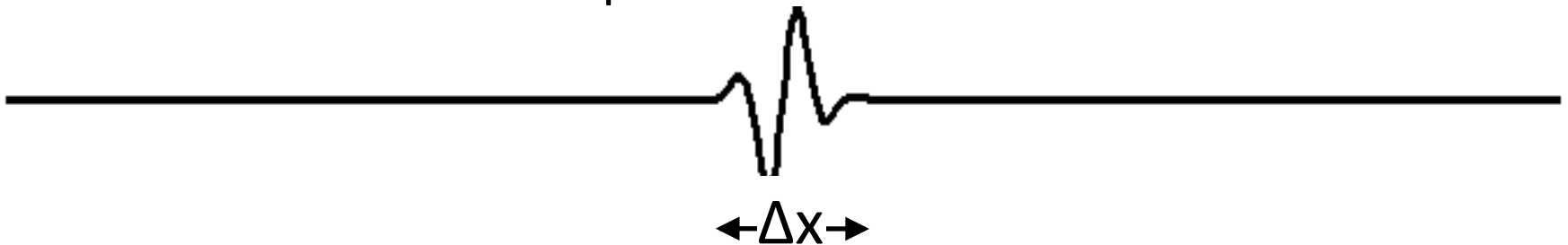
Relação de incerteza de Heisenberg



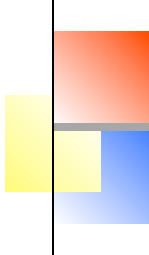
Δp pequeno – apenas um comprimento de onda



Δp médio – pacote de onda composto de ondas de diversos comprimentos



Δp grande – pacote de onda composto de **muitas** ondas, incluindo uma larga faixa de comprimentos distintos



Relação de incerteza de Heisenberg

$$\Delta x \Delta p \gtrsim h$$

P: qual das afirmações abaixo é uma consequência lógica desta relação?

- A) Há um limite mínimo para a precisão com que é possível medir a posição de uma partícula
- B) Há um limite mínimo para a precisão com que é possível medir a velocidade de uma partícula
- C) Uma partícula pode estar em repouso no interior de uma caixa finita, desde que não saibamos com precisão sua posição exata.
- D) Para manter um partícula confinada numa região do tamanho de um núcleo atômico, é preciso uma energia de ligação muito maior do que numa região de tamanho atômico



Relação de incerteza de Heisenberg

Exemplo: Incerteza de uma partícula de poeira:

Ex. 40.5 - Uma partícula de poeira com $1,0 \mu\text{m}$ de diâmetro e massa $m = 10^{-15} \text{ kg}$ está confinada em uma caixa de $10 \mu\text{m}$ de comprimento. É possível que a partícula esteja em repouso? Em caso negativo, em que faixa de valores é mais provável que meçamos a velocidade da partícula?

Considerando a incerteza na posição como a largura da caixa: $\Delta x = 10^{-5} \text{ m}$, a incerteza na sua velocidade é $\Delta v_x = \Delta p_x / m \sim 10^{-14} \text{ m/s}$.

Valor totalmente desprezível, mesmo na escala de tamanho da própria partícula (levaria $\sim 10^9 \text{ s} \sim 30 \text{ anos}$ para percorrer seu próprio comprimento!)

Moral: a relação de incerteza praticamente não limita nosso entendimento intuitivo do movimento de uma partícula de poeira: podemos considerar sua velocidade = 0 e usar a física clássica nesse caso.



Relação de incerteza de Heisenberg

A incerteza de um elétron

Ex. 40.6 – Que faixa de velocidades pode ter um elétron confinado em uma região de 0,1 nm de comprimento, o tamanho aproximado de um átomo?

Considerando a incerteza na posição como: $\Delta x = 0,1 \text{ nm}$, a incerteza mínima no seu momento é $\Delta p_x \sim 10^{-24} \text{ kg m/s}$. Devido à massa minúscula do elétron, porém, a incerteza na sua *velocidade* é $\Delta v_x \sim 10^6 \text{ m/s}$.

Em outras palavras o elétron pode ter qualquer velocidade dentro de uma faixa *enorme* de valores (por exemplo, entre $-5 \times 10^5 \text{ m/s}$ e $+5 \times 10^5 \text{ m/s}$).

Moral: **nesse caso o princípio da incerteza faz uma enorme diferença.** Não é possível imaginar o movimento de um elétron confinado num átomo como o de uma 'pequena esfera em órbita'.

Aplicação: estimando o tamanho de um átomo de Hidrogênio

Suposição: para um elétron próximo ao núcleo:
 $x \sim \Delta x$ e $p \sim \Delta p$

electron

proton

Por Heisenberg: se $\Delta x = a$, precisamos $\Delta p \gtrsim \hbar/a$

$$\text{Energia: } E = K + U = \frac{p^2}{2m_e} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \sim \frac{\Delta p^2}{2m_e} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{a}$$
$$\gtrsim \frac{\hbar^2}{2m_e a^2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{a}$$

E é minimizado ($dE/da = 0$) para $a = \frac{\epsilon_0 \hbar^2}{\pi m_e e^2} = a_B$ (raio de Bohr!)

$$\longrightarrow E = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a_B} = -13,6 \text{ eV}$$

Orbitais

Orbitais atômicos: regiões com probabilidade de encontrar elétrons com uma determinada energia.

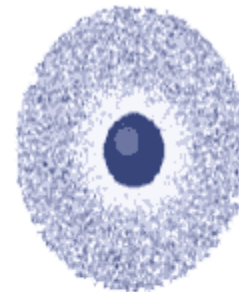
DENTRO DE UM ÁTOMO

ELÉTRON

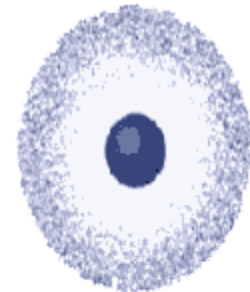
NÚCLEO

ORBITA

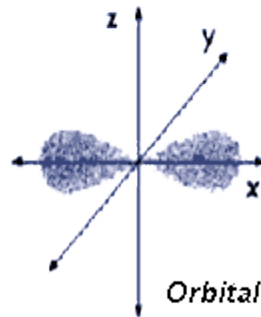
©2003 HowStuffWorks



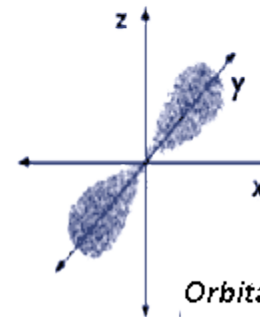
Orbital 1s



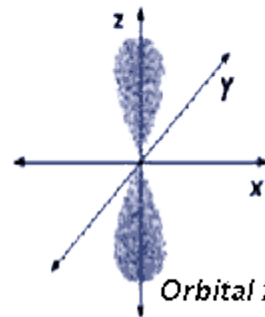
Orbital 2s



Orbital 2p



Orbital 2p



Orbital 2p

Orbitais

Orbitais atômicos: regiões com probabilidade de encontrar elétrons com uma determinada energia.

