Objetivo: introduzir o conceito de função de onda, que reconcilia (conecta) os aspectos ondulatórios e corpusculares da matéria e caracteriza as partículas microscópicas em termos da probabilidade de encontrá-las em diversas regiões do espaço
- usar ideias básicas sobre probabilidade
- usar a função de onda para calcular probabilidades de detecção de partículas
- reconhecer as limitações impostas ao conhecimento (à descrição com conceitos clássicos) impostas pelo princípio de incerteza de Heisenberg

Ondas, partículas e a experiência da dupla fenda
- depois de passar pelas fendas, a chegada de fótons, elétrons ou neutrons ao detetor é um evento corpuscular: eles geram coleção de pontos discretos no detetor.

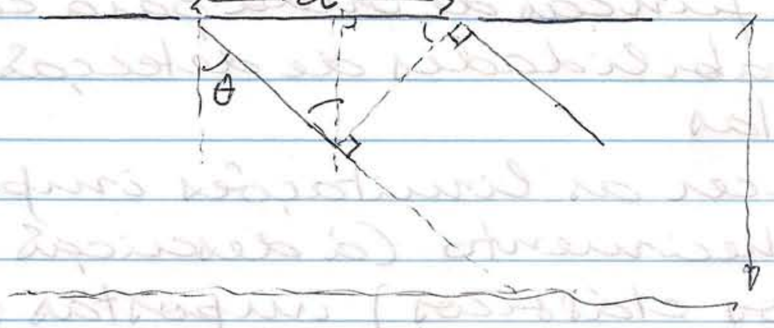
Análise ondulatória da interferência
- as ondas que trafegam das fendas até a tela são descritas por

$$D_1 = A \operatorname{sen}(kr_1 - \omega t) \quad e$$
$$D_2 = A \operatorname{sen}(kr_2 - \omega t),$$

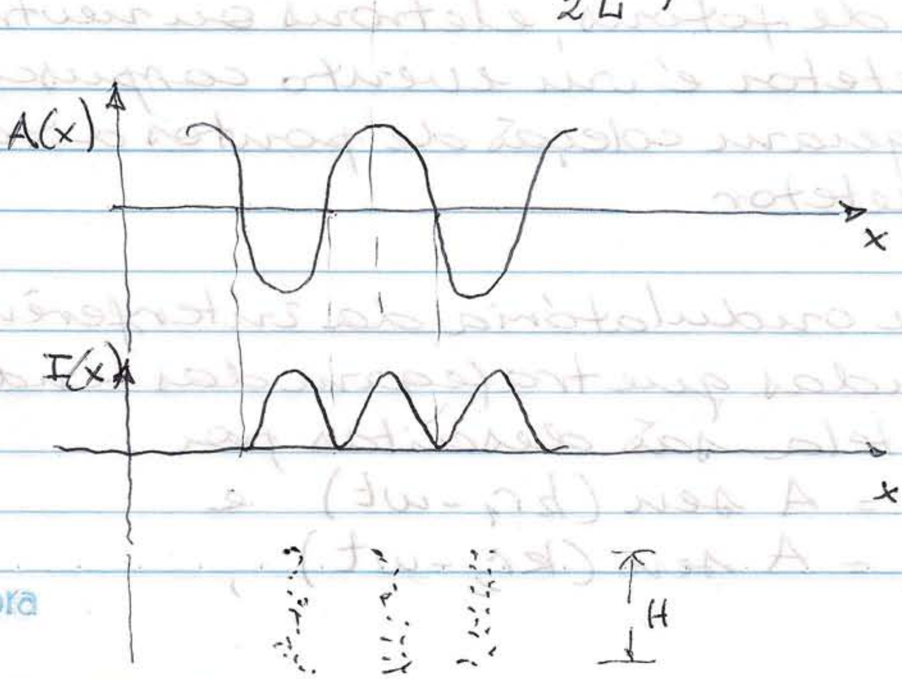
$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad e \quad \omega = 2\pi f$$

- a superposição das duas é $D = D_1 + D_2$
$= A\,(\text{sen}\,\alpha + \text{sen}\,\beta)$

- identidade trigonométrica:
$$\text{sen}\,\alpha + \text{sen}\,\beta = 2\cos\left[\frac{1}{2}(\alpha-\beta)\right]\text{sen}\left[\frac{1}{2}(\alpha+\beta)\right]$$
$$\Downarrow$$
$$D = 2A\cos\left[\frac{1}{2}k(r_1-r_2)\right]\,\text{sen}\left[\frac{1}{2}k(r_1+r_2)-\omega t\right]$$



$$r_1 - r_2 = d\,\text{sen}\,\theta$$
$$\text{sen}\,\theta \approx \text{tg}\,\theta = \frac{x}{L}$$
$$\Downarrow$$
$$A(x) = 2A\cos\left(k\frac{dx}{2L}\right) = 2A\cos\left(\frac{\pi dx}{\lambda L}\right)$$



amplitude

franjas (intensidade)

partículas

$$I(x) \propto A^2(x) = C\cos^2\left(\frac{\pi d x}{\lambda L}\right)$$

Probabilidade

Eventos A, B e C mutuamente exclusivos ocorreu N_A, N_B e N_C vezes. Sua frequência relativa é ($N = N_A + N_B + N_C$)

$$\frac{N_A}{N}, \frac{N_B}{N}, \frac{N_C}{N}$$

$$\Downarrow$$

$$P(A) = \lim_{N \to \infty} \frac{N_A}{N}$$

$$P(A \text{ ou } B) = P_A + P_B$$

$$P_A + P_B + P_C = 1$$

O valor esperado do número de ocorrências de A em M tentativas é $\langle N_A \rangle = M \times P(A)$, melhor previsão.

→ Exemplo: jogue um dado 30 vezes, quantas vezes você espera que saia 1 ou 6?

Análise da interferência de fotons

A posição em que chega um foton em particular é impossível de ser prevista, mas podemos apontar em que regiões sua chegada é mais provável.

N (em δx em x) é o número de fotons que chegam numa faixa de largura δx centrada em x.

$$\text{Prob (dentro de } \delta x \text{ em } x) = \lim \frac{N(\delta x \text{ em } x)}{N_{total}}$$

Conexão entre a visão ondulatória e o fóton

O diagrama de interferência mostra correlação entre $I(x)$ (intensidade) e a probabilidade de detetar fótons.

$$I = \frac{\text{potência}}{\text{área}}$$

$$\text{área} = H\,\delta x$$

$$\text{potência} = I(x)\,H\,\delta x$$

Se $N(\delta x \text{ em } x)$ é o número de fótons (de frequência f) que atinge a faixa de δx em x por segundo, temos

$$N(\delta x \text{ em } x) = \frac{H\,I(x)\,\delta x}{hf}, \text{ e}$$

$$\text{Prob}(\delta x \text{ em } x) = \frac{N(\delta x \text{ em } x)}{N_{tot}} = \frac{H}{hf N_{tot}}\, I(x)\,\delta x$$

que é a conexão entre os modelos ondulatório e corpuscular (fóton). Como $I(x) \propto |A(x)|^2$,

$$\text{Prob}(\delta x \text{ em } x) \propto |A(x)|^2\,\delta x$$

Densidade de probabilidade

A noção de densidade (de massa, de carga) é conhecida: em 1 dimensão, $\mu = \frac{m}{l}$, $\lambda = \frac{q}{l}$ em distribuições (de massa, carga) uniformes.

Se a densidade varia com x,

$m(\delta x \text{ em } x) = \mu(x)\,\delta x$

$q(\delta x \text{ em } x) = \lambda(x)\,\delta x$

Por analogia, escrevemos

$\text{Prob}(\delta x \text{ em } x) = P(x)\,\delta x$

$P(x)$ é uma densidade de probabilidade.

Pense: qual a dimensão de $P(x)$?

Por comparação direta,

$P(x) \propto |A(x)|^2$

(não depende de δx)

$\Downarrow$

A densidade de probabilidade de deteção de um foton é proporcional ao quadrado da amplitude da onda EM correspondente.

Exemplo: 6000 fotons (de um total de 600.000) são detetados numa faixa de 1,0 mm de largura em torno da posição $x = 50$ cm. Qual a densidade de probabilidade $P(x=50)$?

A função de onda

Na experiência da dupla fenda eletrons geram padrões de interferência como os dos fotons. Vamos, portanto, supor que possamos associar uma função de onda contínua a partículas materiais : $\Psi(x)$.

Sua conexão com o mundo real das medidas experimentais se dá em termos das (densidades de) probabilidade de detetar a partícula na (no entorno da) posição x :

$$\text{Prob}(\delta x \text{ em } x) = |\Psi(x)|^2 \delta x = P(x)\,\delta x$$

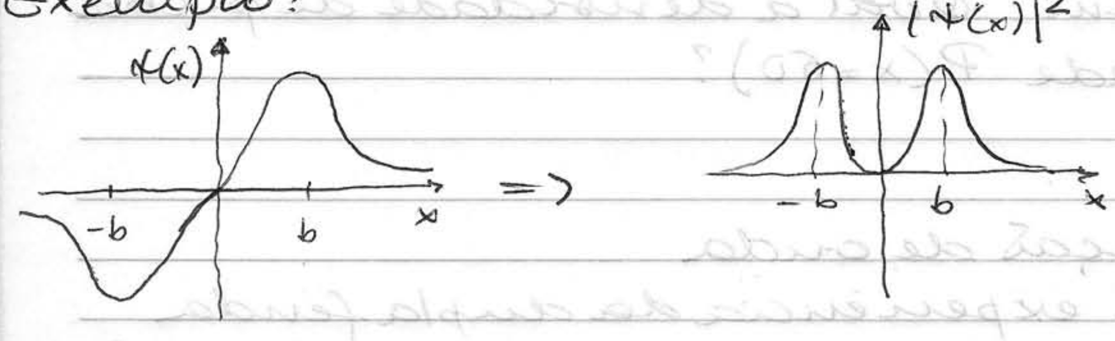
$$\Downarrow$$

$$P(x) = |\Psi(x)|^2$$

Esta equação propõe que a função de onda (de uma partícula material) exerça o mesmo papel que a amplitude $A(x)$ exerce para o foton. A única diferença é que, aqui, o sinal = substitui o $\propto$.

Nota: $|\Psi(x)|^2$ é determinada univocamente pela experiência, mas $\Psi(x)$ não. ($-\Psi(x)$ dá o mesmo resultado).

Exemplo:



Nota: não há nada material oscilando em conexão com $\Psi(x)$.

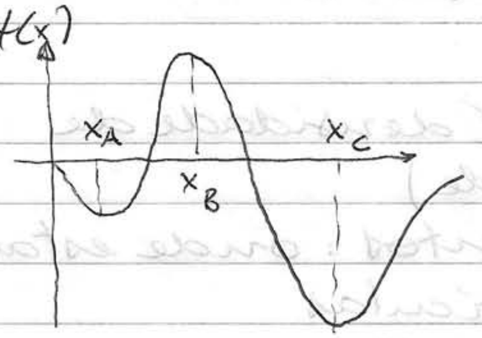
(Um pouco de) metodologia científica

Uma teoria física precisa de 2 ingredientes básicos:

1. um descritor: uma quantidade matemática usada para descrever nosso conhecimento sobre um objeto físico
2. uma (ou mais) lei(s) que determinem o comportamento do descritor

$\Psi(x)$ é o descritor de uma partícula na mecânica quântica: contém toda a informação que se pode obter sobre ela.

Pense:



função de onda de um neutron; perto de que valor de x é + provável encontrá-lo?

Normalização

Dividamos o segmento de valores possíveis de x em faixas de largura δx centradas em $x_1, x_2, \ldots, x_N$. Então,

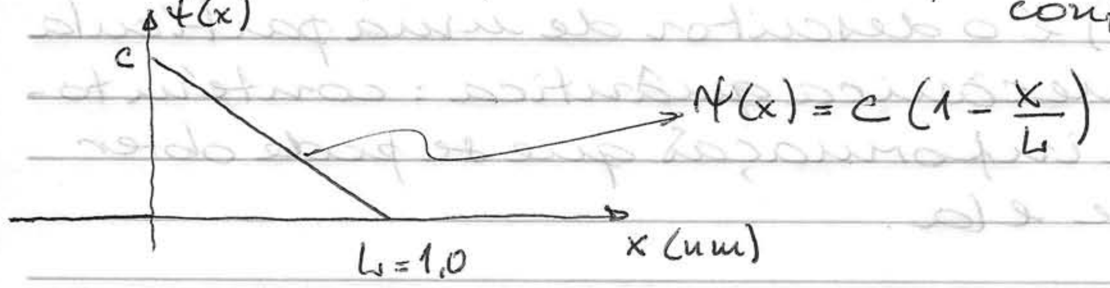
$$\text{Prob}(x_E \leq x \leq x_D) = \text{Prob}(\delta x \text{ em } x_1) + \text{Prob}(\delta x \text{ em } x_2) + \ldots = \sum_{i=1}^{N} P(x_i)\,\delta x = \sum_{i=1}^{N} |\Psi(x_i)|^2\,\delta x \Rightarrow$$

$$\text{Prob}(x_E \le x \le x_D) = \int_{x_E}^{x_D} P(x)\,dx = \int_{x_E}^{x_D} |\psi(x)|^2\,dx$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(x)\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2\,dx = 1$$

Esta é a condição de normalização que deve ser satisfeita por qualquer função de onda.

Exemplo: função de onda de partícula confinada



(a) $c = ?$
(b) gráfico de $P(x)$ (densidade de probabilidade)
(c) diagrama de pontos: onde estarão as 40 (ou 50) partículas
(d) $\delta x = 0{,}01$ nm ; Prob(δx em $x_1 = 0{,}05$ nm, $x_2 = 0{,}50$ nm, $x_3 = 0{,}95$ nm)

<u>modelo</u>: probabilidade de encontrar a partícula é determinada pela densidade de probabilidade $P(x) = |\psi(x)|^2$.

<u>solução</u>: $\psi(x) = 0$, $x < 0 \cup x > L$

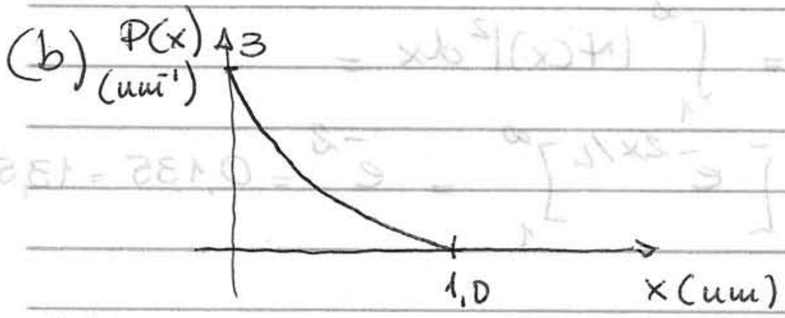
$$1 = \int_0^L |\psi(x)|^2\,dx = c^2 \int_0^L \left(1 - \frac{x}{L}\right)^2 dx$$

K39.9

$$1 = \frac{c^2}{3\left(-\frac{1}{L}\right)}\left[\left(1-\frac{x}{L}\right)^3\right]_0^L = \frac{c^2 L}{3}$$

$$\Rightarrow c = \sqrt{\frac{3}{L}} = 1{,}73\ nm^{-1/2} \qquad (a)$$

(b)



(d) $\text{Prob}(\delta x \text{ em } x) = P(x)\,\delta x = |\Psi(x)|^2 \delta x$

$\text{Prob}(\delta x \text{ em } x_1) = |\Psi(x_1)|^2 \delta x = 0{,}027$

$x_2 \qquad = 0{,}0075$

$x_3 \qquad = 0{,}00008$

Exemplo: partícula é descrita por

$$\Psi(x) = \begin{cases} 0, & x<0 \\ c e^{-x/L}, & x \geq 0 \end{cases}, \quad L = 1\ nm$$

(a) $c = ?$

(b) gráficos de $\Psi(x)$ e $P(x)$

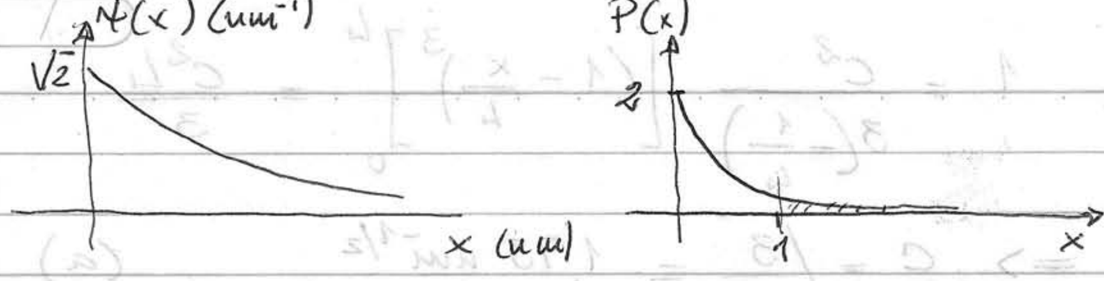
(c) probabilidade de encontrar a partícula em $x \geq 1$ nm

(a) $$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2 dx = c^2 \int_0^{\infty} e^{-2x/L} dx =$$

$$= \frac{c^2}{\left(-2/L\right)}\left[e^{-2x/L}\right]_0^{\infty} = \frac{c^2 L}{2}$$

$$\Rightarrow c = \sqrt{\frac{2}{L}} = 1{,}41\ nm^{-1/2}$$

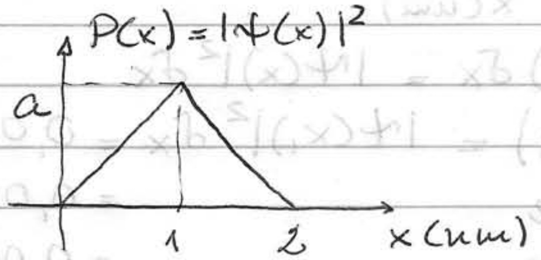
(b)



(c) $\text{Prob}\,(x \geq 1\,\text{nm}) = \int_1^{\infty} |\psi(x)|^2 dx =$

$$= \frac{2}{L}\,\frac{1}{-2/L}\left[e^{-2x/L}\right]_1^{\infty} = e^{-2} = 0{,}135 = 13{,}5\%$$

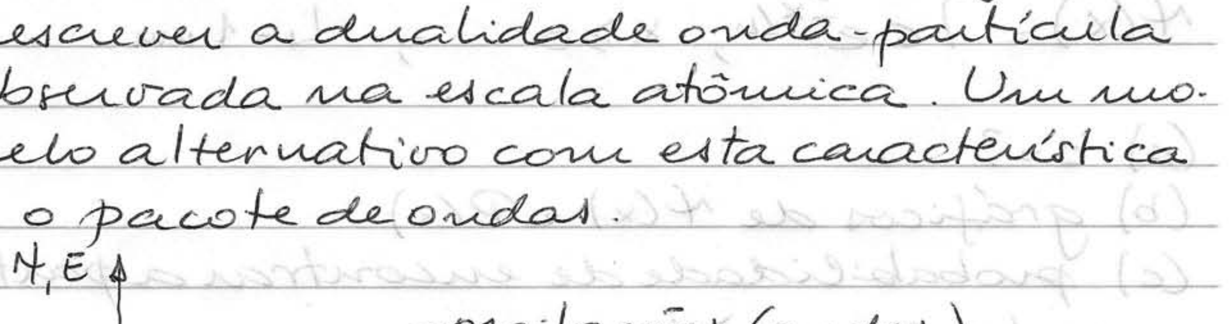
Pense:



$a = ?$

Pacotes de onda

Os modelos clássicos não conseguem descrever a dualidade onda-partícula observada na escala atômica. Um modelo alternativo com esta característica é o pacote de ondas.



Um pacote de ondas:

- tem oscilações e comprimento de onda → sofre interferência e difração

- é localizado, no espaço e no tempo
→ faz 'click' no detetor

Onda de luz: grande número de pacotes de onda movendo-se juntos
Feixe de elétrons: série de pacotes enfileirados

Não é modelo 'perfeito': precisamos da MQ completa para isso.

Pacote de ondas se parece com um ciclo de padrão de batimento.

Batimento: superposição de ondas com frequências f_1 e f_2 parecidas gera padrão com frequência $f_b = f_1 - f_2 = \Delta f$, a largura da faixa de frequências.
O período do batimento $T_b = \frac{1}{f_b} = \Delta t$

$\Rightarrow \Delta f \Delta t = 1$

A matemática do batimento: detetor na origem recebe superposição de
$A\,\text{sen}(\omega_1 t)$ e $A\,\text{sen}(\omega_2 t)$:
$A[\text{sen}(\omega_1 t) + \text{sen}(\omega_2 t)] =$
$= 2A\cos\left(\frac{\omega_b}{2} t\right)\text{sen}(\omega_{medio} t)$

Quando a separação entre as frequências diminui, a duração do ciclo aumenta.

O padrão de batimento é, obtido pela superposição de 2 frequências, se repete indefinidamente. É possível gerar padrão singular com a superposição de várias frequências próximas. Neste último caso, continua valendo a relação $\Delta f . \Delta t \simeq 1$

- a relação exata entre Δf e Δt depende da forma do pacote
- Δf e Δt não foram (ainda) definidos com precisão.

Exemplo: estação de ondas curtas emite em 10,0 MHz; qual a largura da faixa de frequências necessária para emitir pulsos de duração 0,8 μs?

Se $f = 10{,}0\,MHz$, $T = \frac{1}{f} = 0{,}1\,\mu s$
$\Rightarrow$ pulso contém 8 oscilações

$$\Delta f \simeq \frac{1}{\Delta t} = \frac{1}{0{,}8 \times 10^{-6}} = 1{,}25 \times 10^{6} = 1{,}25\ MHz$$

$$9{,}375 \leq f \leq 10{,}625\ MHz$$

Largura de Banda

A transmissão de informação digital é feita por pulsos de curta duração: pulsos de tom (linha telefônica), de rádio, de laser (fibras óticas), todos

tilibra

obedecendo à $\Delta f . \Delta t \approx 1$

Transmitir dados a altas taxas (i.e., mais pulsos por segundo) requer pulsos de duração menor (Δt pequeno) $\Rightarrow$ Δf tem que ser maior, e o meio através do qual os pulsos se propagam deve ser capaz (fisicamente) de transmitir toda a faixa de frequências.

A faixa de frequências que pode ser transmitida em um meio é chamada a largura de banda Δf_b deste meio. O menor pulso que pode ser nele transmitido tem duração $\Delta t \simeq \frac{1}{\Delta f_b}$

Este é um conceito extremamente importante em comunicação digital. Uma linha de telefone comum não tem largura de banda muito grande, por isso um modem não pode mandar mais do que $\sim$ 50.000 pulsos por segundo.

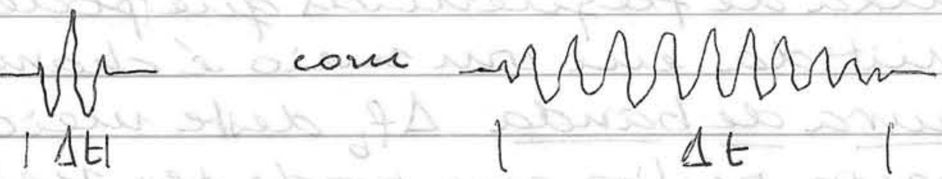
A fibra ótica é um meio de grande largura de banda, $\Delta f_b > 1\,GHz$ - pode transmitir pulsos com duração $\Delta t < 1\,ns$ $\Rightarrow$ mais de 10^9 pulsos/s. Redes de fibra ótica formam o esqueleto da internet!

Incerteza

Outra maneira de entender a relação $\Delta f . \Delta t \approx 1$: Δt é a incerteza na determinação do instante de chegada do pulso (pacote), Δf é a incerteza na frequência de suas oscilações.

Quanto mais precisamente conhecermos uma destas grandezas, menos precisamente conheceremos a outra.

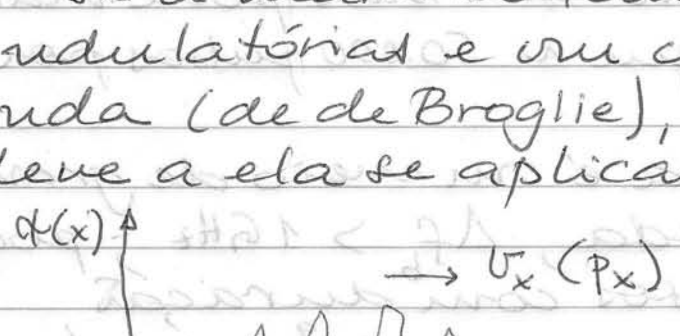
Compare



$\Delta f . \Delta t \approx 1$ é um limite inferior. Limitações técnicas impõem em geral $\Delta f . \Delta t \geq 1$

Princípio da incerteza de Heisenberg

Se a matéria tem características ondulatórias e um comprimento de onda (de de Broglie), a relação acima deve a ela se aplicar. Como?



$$\Delta x = v_x . \Delta t = \frac{p_x}{m} \Delta t \longrightarrow \Delta t = \frac{m}{p_x} \Delta x$$

$$\lambda f = v \Longrightarrow f = \frac{v}{\lambda} = \frac{p_x/m}{h/p_x} = \frac{p_x^2}{hm}$$

$$\Rightarrow \Delta f = \frac{2 p_x \Delta p_x}{hm}$$

$$\Downarrow$$

$$\Delta f . \Delta t = \frac{2}{h} \Delta x . \Delta p_x \geq 1$$

$$\Rightarrow \Delta x . \Delta p_x \geq \frac{h}{2}$$

(comentar o lado direito: definição clara de Δx e Δp_x)

O mesmo se aplica a todas as componentes (y e z)

Significado

É uma afirmação sobre nossa possibilidade de conhecimento das propriedades de uma partícula.

Discussão da medida: na física Newtoniana não há limite inerente à precisão das medidas.

Exemplo: partícula numa caixa