A função de onda e a equação de Schrödinger

1 O estado de uma partícula na Mecânica Clássica e na Mecânica Quântica

Partícula de massa m sob a ação de uma força conservativa, $F(x)$, cuja energia potencial é $V(x)$,

$$F(x) = -\frac{dV}{dx}(x).$$

O estado da partícula é fixado por um ponto no espaço de fase de coordenadas (x, p). A trajetória do sistema no espaço de fase é determinada pelas equações de Hamilton

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} \qquad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x}$$

onde $H(x, p)$ é a hamiltoniana do sistema,

$$H(x, p) = T + V = \frac{p^2}{2m} + V(x).$$

Dada a condição inicial, isto é, a posição e o momento da partícula no instante t_0, $(x(t_0), p(t_0))$ a localização da partícula no espaço de fase, no instante t, $(x(t), p(t))$ é determinada resolvendo-se as equações de Hamilton com a condição inicial acima. Na Mecânica Clássica o máximo de informação que temos sobre o sistema é sua localização no espaço de fase. Com esta informação podemos determinar o valor de qualquer variável dinâmica, $A(x, p, t)$.

Na Mecânica Quântica a descrição do estado da partícula é inteiramente diferente. Neste caso o estado da partícula é fixado pela função de onda, $\Psi(x, t)$, que é determinada resolvendo-se a equação de Schrödinger dependente do tempo

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

onde $h = 2\pi\hbar$ é a constante de Planck. Dada a condição inicial, isto é, a função de onda no instante t_0, $\Psi(x, t_0)$, a equação de Schrödinger dependente do tempo determina a função de onda no instante t, $\Psi(x, t)$.

Estabelecendo uma correspondência entre a Mecânica Clássica e Quântica vemos que a equação de Schrödinger dependente do tempo tem papel análogo aos das equações de Hamilton e a função de onda ao da localização no espaço de fase.

2 A interpretação estatística da função de onda

Perguntas:

- Exatamente o que é a função de onda?
- Qual é a informação que ela contem, uma vez determinada?

O significado físico da função de onda é dada pela interpretação probabilística de Born que diz que $|\Psi(x,t)|^2$ é a densidade de probabilidade de encontrar a partícula no ponto x no instante t. Mais precisamente $|\Psi(x,t)|^2\,dx$ é a probabilidade de encontrar a partícula entre os pontos x e $x+dx$ no instante t.

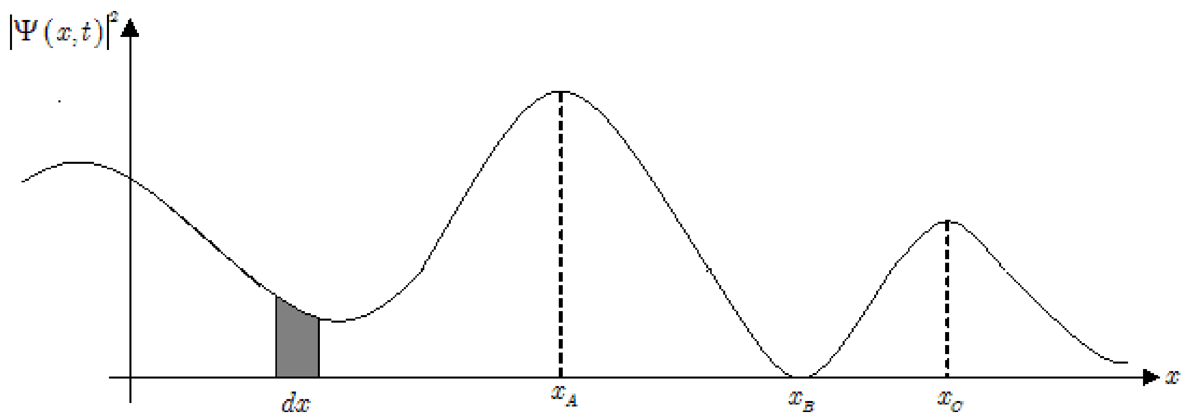

Figura 1: Gráfico da densidade de probabilidade da partícula como função da posição.

A interpretação estatística introduz uma indeterminação na Mecânica Quântica pois mesmo conhecendo a função de onda no instante t não é possível prever o resultado de uma medida da posição da partícula. Tudo que a Mecânica Quântica pode fazer é dar uma informação estatística acerca dos possíveis resultados das medidas. Desse modo, a Mecânica Quântica prevê o resultado de medidas da posição num número grande de sistemas idênticos. Essa indeterminação é muito perturbadora e isso levou a muitos debates sobre se ela é uma peculiaridade da natureza ou uma deficiência da teoria. Até o presente as experiências estão de acordo com a primeira hipótese.

Para exemplificar considere que meço a posição da partícula e acho que ela está no ponto x_c no instante t_c. Pergunta: qual é a posição da partícula pouco antes de se fazer a medida? Do ponto de vista da Mecânica Clássica a partícula se encontra na vizinhança de x_c. Quanticamente a partícula pode se encontrar em qualquer ponto. Foi o ato da medida que localizou a partícula no ponto x_c no instante t_c. Mas o que acontece se medirmos a posição da partícula imediatamente após a primeira medida. Nesse caso tanto a Mecânica Clássica quanto a Mecânica Quântica prevêm o mesmo resultado: a partícula se encontra na vizinhança do ponto x_c.

Como a Mecânica Quântica esse resultado? A primeira medida perturba abruptamente a função de onda de tal modo que, após a medida, ela está concentrada na vizinhança do ponto x_c, isto é,

$$\Psi\left(x,t\right)\stackrel{1^{\text{a}}\ \text{medida}}{\longrightarrow}\Phi\left(x,t\right)$$

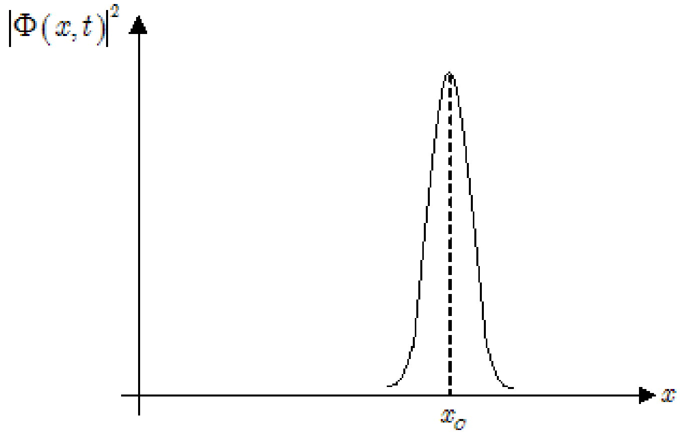

Figura 2: Após a primeira medida, a função de onda $\Psi\left(x,t\right)$ colapsa para a função de onda $\Phi\left(x,t\right)$, concentrada na vizinhança do ponto x_c.

Dizemos que a função de onda $\Psi\left(x,t\right)$ **colapsa** após a primeira medida para a função de onda $\Phi\left(x,t\right)$, concentrada na vizinhança do ponto x_c, no instante t_c.

Vemos então que existem dois processos distintos de variação da função de onda: um onde a função de onda varia continuamente com o tempo, de acordo com a equação de Schrödinger dependente do tempo, e outro onde a função de onda varia abrupta e descontinuamente quando fazemos uma medida da posição da partícula. Essa interpretação do processo de medida é a advogada pela chamada Escola de Copenhagen liderada por Bohr. Os críticos dessa interpretação afirmam que a Mecânica Quântica é uma teoria incompleta, que é necessário informações adicionais, conhecidas como variáveis escondidas, para termos uma descrição completa do estado da partícula.

3 Normalização da função de onda

Da interpretação estatística da função de onda segue que

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\rho\left(x,t\right)dx=\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\left|\Psi\left(x,t\right)\right|^2dx=1 \tag{1}$$

para qualquer instante t, pois a probabilidade da partícula se encontrar em algum ponto é 1. Entretanto esta condição coloca um problema pois a função de onda $\Psi\left(x,t\right)$ deve satisfazer a equação de Scrödinger dependente do tempo,

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}\left(x,t\right)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\left(x,t\right)+V\left(x\right)\Psi\left(x,t\right), \tag{2}$$

e precisamos verificar se essas duas equações são consistentes. Mas antes disso note que somente soluções que satisfazem (1), soluções normalizáveis, podem representar estados de uma partícula.

Primeiramente vamos mostrar que a equação de Schrödinger preserva a normalização da função de onda, isto é, a normalização é independente do tempo. Para mostrar isto vamos escrever a equação de Schrödinger e sua complexa conjugada

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t}(x,t) = \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}(x,t) - \frac{i}{\hbar}V(x)\Psi(x,t)$$

e

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

onde usamos o fato que $V(x)$ é uma função real. Então

$$\frac{\partial \Psi^\star}{\partial t}\Psi = -\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi^\star}{\partial x^2}\Psi + \frac{i}{\hbar}V|\Psi|^2$$

$$\Psi^\star\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\Psi^\star\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar}V|\Psi|^2.$$

Desse modo

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2 &= \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^\star\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^\star}{\partial x^2}\Psi\right) \\ &= \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^\star\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^\star}{\partial x}\Psi\right).\end{aligned} \tag{3}$$

Definindo a **densidade de corrente de probabilidade** pela equação

$$j(x,t) = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^\star(x,t)\frac{\partial \Psi}{\partial x}(x,t) - \frac{\partial \Psi^\star}{\partial x}(x,t)\Psi(x,t)\right)$$

podemos escrever a equação acima como uma **equação de continuidade para a probabilidade** (análoga a de um fluido)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(x,t) + \frac{\partial j}{\partial t}(x,t) = 0.$$

Integrando esta equação entre os pontos $x = a$ e $x = b$ temos

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_a^b \rho(x,t)\,dx + \int_a^b \frac{\partial j}{\partial t}(x,t)\,dx = 0$$

que é igual à

$$\frac{dP_{ab}}{dt}(t) = j(a,t) - j(b,t)$$

$\frac{dP_{ab}}{dt}(t)$ é a variação com o tempo da probabilidade da partícula se encontrar no intervalo $[a,b]$,

$$P_{ab}(t) = \int_a^b \rho(x,t)\,dx.$$

$j(x,t)$ é a densidade de corrente de probabilidade que flui na direção positiva de x.
$j(a,t)$ é a corrente de probabilidade entrando em a.
$j(b,t)$ é a corrente de probabilidade saindo em b.

Extendendo os limites de integração (3) para entre $-\infty$ e $+\infty$ vemos que

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2\,dx = -\left[j(+\infty,t) - j(-\infty,t)\right].$$

Para funções de onda normalizáveis $\Psi(x,t)$ tende a zero no infinito, correspondentemente $j(+\infty,t) = j(-\infty,t) = 0$, mostrando que

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2\,dx = 0.$$

Assim a norma da função de onda é uma constante do movimento, isto é, a norma da função de onda no instante t é igual a norma da função de onda no instante inicial

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t_0)|^2\,dx.$$

Como a equação de Schrödinger é linear, se $\Psi(x,t)$ é uma solução então $A\Psi(x,t)$ também é uma solução, onde A é uma constante. Desse modo sempre podemos escolher A de tal forma que a equação de Schrödinger seja compatível com a equação (1), isto é, se a função de onda no instante inicial é normalizada ela permanece normalizada em qualquer instante t.

Problema 1.7 (Griffiths): No instante $t=0$ a função de onda de uma partícula é

$$\Psi(x,0) = \begin{cases} \frac{Ax}{a} & 0 \le x \le a, \\ \frac{A(b-x)}{(b-a)} & a \le x \le b, \\ 0 & \text{nos outros casos.} \end{cases}$$

a) Normalize $\Psi(x,0)$.
b) Faça um gráfico de $|\Psi(x,0)|^2$. Qual é a posição mais provável da partícula?
c) Qual é a probabilidade de achar a partícula à esquerda de a?
d) Qual é o valor esperado de x?

Soluções:

a) $\int\limits_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,0)|^2 \, dx = 1$

$$\begin{aligned}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,0)|^2 \, dx &= \int\limits_{0}^{a} \frac{A^2 x^2}{a^2} dx + \int\limits_{a}^{b} \frac{A^2 (b-x)^2}{(b-a)^2} dx \\ &= \frac{A^2 a}{3} + \frac{A^2 (b-a)}{3} = \frac{A^2 b}{3} = 1.\end{aligned}$$

Logo:

$$A = \sqrt{\frac{3}{b}}.$$

b)

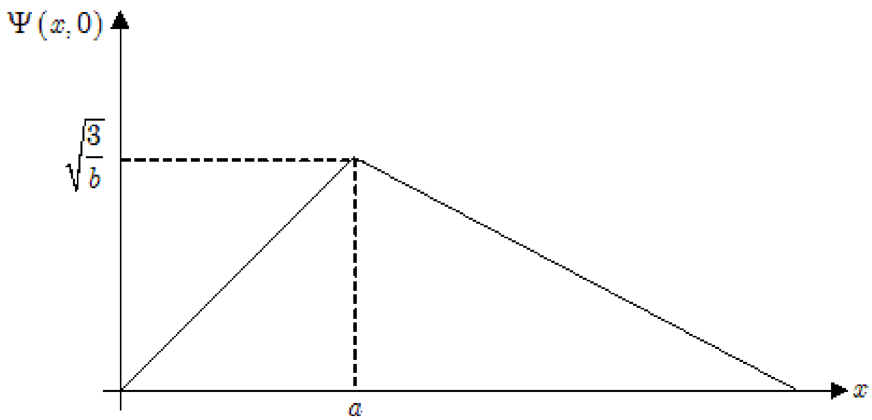

Figura 3:

$x = a$ é a posição mais provável.

c)

$$P(0,a) = \int\limits_{0}^{a} |\Psi(x,0)|^2 \, dx = \frac{a}{b}$$

d)

$$\begin{aligned}
\langle x\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} x\left|\Psi(x,0)\right|^2 dx \\
&= \int_0^a x\frac{3x^2}{ba^2}dx + \int_a^b x\frac{3(b-x)^2}{b(b-a)^2}dx \\
&= \frac{3}{4}\frac{a^2}{b} + \frac{1}{4}\left(b+2a-\frac{3a^2}{b}\right) = \frac{a}{2}+\frac{b}{4}.
\end{aligned}$$

4 Momento

Para uma partícula no estado $\Psi(x,t)$ o valor médio das medidas da posição da partícula é dado por,

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x\rho(x,t)\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x\left|\Psi(x,t)\right|^2 dx.$$

O valor médio $\langle x\rangle$ é a média de medidas num número grande de sistemas idênticos (*ensemble*) no nosso caso, a partícula no estado $\Psi(x,t)$. Resumindo o valor médio é a média de medidas realizadas num ensemble de sistemas preparados identicamente, não é o valor médio de medidas repetidas no mesmo sistema.

O valor médio $\langle x\rangle$ varia com o tempo. Calculando sua taxa de variação temos

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle x\rangle}{dt} &= \frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty} x\rho(x,t)\,dx \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} x\frac{\partial\rho}{\partial t}(x,t)\,dx \\
&= -\int_{-\infty}^{+\infty} x\frac{\partial j}{\partial x}(x,t)\,dx \\
&= \frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty} x\frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^\star\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \frac{\partial\Psi^\star}{\partial x}\Psi\right)dx.
\end{aligned}$$

Fazendo a integração por partes e lembrando que $\Psi(x,t)$ se anula nos extremos (função de onda normalizada) temos

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt}=-\frac{i\hbar}{2m}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\left(\Psi^{\star}\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\frac{\partial\Psi^{\star}}{\partial x}\Psi\right)dx.$$

Fazendo mais uma integração por partes, a expressão acima se reduz à

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt}=-\frac{i\hbar}{m}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\Psi^{\star}\frac{\partial\Psi}{\partial x}dx$$

ou

$$m\frac{d\langle x\rangle}{dt}=-i\hbar\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\Psi^{\star}\frac{\partial\Psi}{\partial x}dx.$$

Se $H=\frac{p^2}{2m}+V(x)$, temos classicamente que

$$m\frac{dx}{dt}=p.$$

Vamos postular que na Mecânica Quântica vale

$$m\frac{d\langle x\rangle}{dt}=\langle p\rangle$$

onde $\langle x\rangle$ é o valor médio das medidas da posição da partícula e $\langle p\rangle$ o valor médio das medidas do momento da partícula, dados explicitamente por

$$\langle x\rangle=\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\Psi^{\star}(x,t)\,x\Psi(x,t)\,dx$$

e

$$\langle p\rangle=\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\Psi^{\star}(x,t)-i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x}(x,t)\,dx.$$

Na Mecânica Quântica, variáveis dinâmicas clássicas são representadas por **operadores hermitianos**. Operadores são objetos que transformam uma função em outra função,

$$\hat{A}f(x)=g(x).$$

Baseado na expressão para os valores médios das medidas da posição e do momento, vamos postular que na Mecânica Quântica a posição x é representada pelo operador $\hat{x}$ tal que $\hat{x}\Psi(x,t)=x\Psi(x,t)$ e o momento pelo operador $\hat{p}$ tal que $\hat{p}\Psi(x,t)=-i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x}(x,t)$. Em geral uma variável dinâmica clássica $Q(x,p)$é representada na Mecânica Quântica pelo operador $\hat{Q}(\hat{x},\hat{p})$. O valor médio de medidas dessa variável dinâmica no estado $\Psi(x,t)$ é dado por

$$\left\langle \hat{Q}\left(\hat{x},\hat{p}\right)\right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^{\star}\left(x,t\right) Q\left(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi\left(x,t\right) dx.$$

Como um exemplo, a hamiltoniana $H\left(x,p\right)$ vem a ser o operador $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$, cuja ação no espaço das funções é igual a,

$$\hat{H}\Psi\left(x,t\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\left(x,t\right) + V\left(x\right)\Psi\left(x,t\right)$$

onde usamos que a ação do produto de dois operadores é definida como

$$\hat{A}\hat{B}f(x) = \hat{A}(\hat{B}f)(x).$$

CUIDADO: existe problemas de ordenamento nesta discussão pois para operadores pode acontecer que

$$\hat{A}\hat{B}f\left(x\right) \neq \hat{B}\hat{A}f\left(x\right).$$

Por exemplo,

$$\hat{x}\hat{p}f(x) = -i\hbar x\frac{\partial f}{\partial x}(x)$$

$$\hat{p}\hat{x}f(x) = -i\hbar f(x) - i\hbar x\frac{\partial f}{\partial x}(x).$$

5 Partícula livre

5.1 Ondas planas

Na Mecânica Clássica, a hamiltoniana de uma partícula livre é dada por

$$H = \frac{p^2}{2m}.$$

Na Mecânica Quântica, a hamiltoniana é representada pelo operador

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}.$$

Desse modo, a equação de Schrödinger dependente do tempo para uma partícula livre fica igual a,

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}\left(x,t\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\left(x,t\right).$$

Vamos procurar soluções separáveis, isto é, que sejam o produto de uma função de x com uma função de t (método da separação de variáveis)

$$\Psi(x,t) = F(t)\,\phi(x).$$

Da equação de Schrödinger temos

$$\frac{i\hbar}{F(t)}\frac{dF}{dt}(t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\phi(x)}\frac{d^2\phi}{dx^2}(x).$$

Como o lado esquerdo da igualdade é uma função apenas de t e o lado direito uma função apenas de x, para que a igualdade acima seja válida ambos tem que ser iguais à uma constante

$$\frac{i\hbar}{F(t)}\frac{dF}{dt}(t) = E, \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\phi(x)}\frac{d^2\phi}{dx^2}(x) = E.$$

Integrando a primeira equação temos que $F(t) = Ce^{-\frac{iEt}{\hbar}}$ mas como podemos absorver a constante C na função $\phi(x)$, sem perda de generalidade, tomaremos $F(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$.

A equação para $\phi(x)$ fica então igual à

$$\frac{d^2\phi}{dx^2}(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\phi(x)$$

onde $E > 0$ para que $|\phi(x)|$ não cresça indefinidamente para $x \to \pm\infty$. Escrevendo E como, $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, onde $p = \hbar k$, a equação para $\phi(x)$ se reduz à

$$\frac{d^2\phi}{dx^2}(x) = -k^2\phi(x)$$

cuja solução geral é uma combinação linear de $\cos kx$ e $\sin kx$, que pode ser escrita em forma exponencial

$$\phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

e, por conseguinte,

$$\Psi(x,t) = Ae^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)} + Be^{-i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)}.$$

Permitindo que k assuma valores negativos podemos escrever as soluções da equação de Schrödinger dependente do tempo para uma partícula livre como

$$\Psi(x,t) = A\psi_k(x,t) + B\psi_{-k}(x,t)$$

onde

$$\psi_k(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)}.$$

Os pontos de fase constante, $kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t = \text{constante}$,se movem com velocidade igual à *velocidade de fase*

$$v_{ph} = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{\omega(k)}{k}, \qquad \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

onde se $k > 0$, a frente de onda se move para a direita e se $k < 0$, ela se move para a esquerda. Note que a velocidade de fase é igual à metade da velocidade clássica

$$v_{ph} = \frac{v_{\text{clássica}}}{2}, \qquad v_{\text{clássica}} = \frac{p}{m} = \frac{\hbar k}{m}.$$

À função de onda $\psi_k(x,t)$ podemos associar um comprimento de onda $\psi_k(x+\lambda,t) = \psi_k(x,t)$ com $\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{p}$, que é o comprimento de onda de de Broglie.

5.2 Pacotes de onda

Note que $\psi_k(x,t)$ não é normalizável

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_k(x,t)|^2 \, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\pi} dx = \infty,$$

assim soluções separáveis não podem descrever uma partícula livre. Mas isto não quer dizer que as soluções separáveis não sejam úteis! Veja que

$$\begin{aligned} \Psi(x,t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_k(x,t)\, \phi(k)\, dk \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(kx-\omega(k)t)} \phi(k)\, dk, \end{aligned} \tag{4}$$

com $\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$ sendo a relação de dispersão, é uma solução da equação de Schrödinger dependente do tempo para a partícula livre com

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} \phi(k)\, dk \tag{5}$$

onde introduzimos o fator $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ por conveniência. Mostre isto!

Dada a linearidade da equação de Schrödinger, se $\psi_k(x,t)$ é uma solução então qualquer combinação linear de $\psi_k(x,t)$ também é uma solução, no caso essa combinação linear é uma integral em k. Essa solução pode ser normalizada por uma escolha apropriada de $\phi(k)$ e ela envolve necessariamente um intervalo de valores de k. Essas soluções são denominadas de **pacotes de onda**. O problema genérico na Mecânica Quântica é dado $\Psi(x,0)$ achar $\Psi(x,t)$. Então pacotes de onda, equação (4), são soluções gerais da equação de Schrödinger dependente do tempo para a partícula livre se as funções de onda no instante inicial puderem ser representadas como em (5). Esse problema é um problema clássico em análise de Fourier. $\phi(k)$ é a transformada de Fourier de $\Psi(x,0)$ dada por

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

e $\Psi(x,0)$ é a transformada de Fourier inversa de $\phi(k)$. Naturalmente existem restrições sobre $\Psi(x,0)$ para que $\phi(k)$ exista. A condição necessária e suficiente para que $\phi(k)$ exista é que $\Psi(x,0)$ seja uma **função de quadrado integrável**, isto é, $\int\limits_{-\infty}^{+\infty}|\Psi(x,0)|^2\,dx$ finito, que é idêntica à condição que impusemos na função de onda para que ela possa ter a interpretação probabilística de Born. Assim, os pacotes de onda, equação (4), são as soluções mais gerais da equação de Schrödinger dependente do tempo para uma partícula livre. Vemos assim que as soluções separáveis, mesmo não sendo normalizadas, formam um **conjunto completo**, isto é, a solução mais geral pode ser escrita como uma combinação linear das soluções separáveis.

Vamos retornar agora ao problema da velocidade de fase ser a metade da velocidade clássica. Um pacote de ondas, equação (4), é uma função senoidal cuja amplitude é modulada por $\phi(k)$, consistindo de oscilações dentro de um envelope. O que corresponde à velocidade clássica não é a velocidade de fase mas a *velocidade de grupo* (a velocidade do envelope). Vamos supor que $\phi(k)$ seja um pico estreito em torno de um valor k_0 (condição para que a noção de velocidade de grupo seja válida). Como o integrando é desprezível exceto na vizinhança de k_0, podemos expandir $\omega(k)$ numa série de Taylor em torno de $k=k_0$

$$\omega(k)=\omega(k_0)+\frac{d\omega}{dk}(k_0)(k-k_0)+\mathcal{O}(k-k_0)^2.$$

Desprezando os termos de 2ª ordem, o pacote de onda $\Psi(x,t)$ é dado por

$$\Psi(x,t)\simeq e^{-i\left(\omega(k_0)-k_0\frac{d\omega}{dk}(k_0)\right)t}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}e^{ik\left(x-\frac{d\omega}{dk}(k_0)t\right)}\phi(k)\,dk.$$

No instante $t=0$ temos que

$$\Psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}e^{ikx}\phi(k)\,dk,$$

então

$$\Psi(x,t)\simeq e^{-i\left(\omega(k_0)-k_0\frac{d\omega}{dk}(k_0)\right)t}\Psi\left(x-\frac{d\omega}{dk}(k_0)\,t,0\right).$$

Exceto pelo fator de fase (que não afeta $|\Psi(x,t)|^2$) vemos que o pacote de onda se move com a velocidade de grupo

$$v_g=\frac{d\omega}{dk}(k_0)=\frac{\hbar k_0}{m}=v_{\text{clássica}}=2v_{ph}.$$

5.3 Representação das posições e dos momentos

Considerando o pacote de onda (4), ao invés de integrarmos em k vamos integrar nos momentos

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}\left(px - \frac{p^2}{2m}t\right)} \phi(p)\, dp$$

com $\phi(p) = \frac{1}{\hbar}\phi\left(\frac{p}{\hbar}\right)$. Em $t = 0$

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}px} \phi(p)\, dp.$$

Usando a fórmula da inversão da transformada de Fourier

$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}px} \Psi(x,0)\, dx$$

vamos calcular $\int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(p)|^2\, dp$

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} \phi^\star(p)\,\phi(p)\, dp &= \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^\star(p) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}px} \Psi(x,0)\, dx dp \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^\star(p)\, e^{-\frac{i}{\hbar}px} dp \right) \Psi(x,0)\, dx \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,0)|^2\, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2\, dx.
\end{aligned}$$

Do cálculo concluímos que a transformada de Fourier $\phi(p)$ e sua inversa $\Psi(x,0)$ tem a mesma norma, mais explicitamente, a normalização de uma delas implica na da outra.

Agora vamos calcular $\langle p \rangle$

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^\star(x,t) - i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x}(x,t)\, dx.$$

Definindo a função de onda $\phi(p,t)$

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}px} \phi(p,t)\, dp,$$

com $\phi(p,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t}\phi(p)$, temos

$$\phi(p,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}px}\Psi(x,t)\,dx.$$

Assim

$$\begin{aligned}
\langle p\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^\star(x,t)\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} pe^{\frac{i}{\hbar}px}\phi(p,t)\,dpdx \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} p\phi(p,t)\,dp\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\Psi^\star(x,t)}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}px}dx \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} p\left|\phi(p,t)\right|^2 dp = \int_{-\infty}^{+\infty} p\left|\phi(p)\right|^2 dp
\end{aligned}$$

que é independente do tempo.

Do mesmo modo vamos calcular $\langle x\rangle$

$$\begin{aligned}
\langle x\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^\star(x,t)\,x\Psi(x,t)\,dx \\
&= -i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^\star(x,t)\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\frac{\partial}{\partial p}e^{\frac{i}{\hbar}px}\right)\phi(p,t)\,dp \\
&= i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\Psi^\star(x,t)}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}px}dx\right)\frac{\partial\phi}{\partial p}(p,t)\,dp \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}\phi^\star(p,t)\,i\hbar\frac{\partial\phi}{\partial p}(p,t)\,dp.
\end{aligned}$$

Esses cálculos sugerem a seguinte interpretação física:

$\left|\Psi(p,t)\right|^2$ é a densidade de probabilidade da partícula estar no ponto x

$\left|\phi(p,t)\right|^2$ é a densidade de probabilidade da partícula ter momento igual à p

$\Psi(x,t)$ é a função de onda na representação das posições.

$\phi(p,t)$ é a função de onda na representação dos momentos

Na representação das posições:

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^\star(x,t)\,x\Psi(x,t)\,dx$$

e

$$\langle p\rangle = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \Psi^{\star}(x,t) - i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x}(x,t)\,dx.$$

No representação dos momentos:

$$\langle p\rangle = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \phi^{\star}(p,t)\,p\phi(p,t)\,dp$$

e

$$\langle x\rangle = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \phi^{\star}(p,t)\,i\hbar\frac{\partial\phi}{\partial p}(p,t)\,dp.$$

6 Resumindo

- A função de onda da partícula é determinada pela equação de Schrödinger dependente do tempo

  $$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}(x,t) = \hat{H}\Psi(x,t)$$

  onde $\hat{H}$ é o operador hamiltoniana

  $$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}).$$

  A equação de Scrödinger dependente do tempo é uma equação de primeira ordem no tempo que determina $\Psi(x,t)$ dado $\Psi(x,0)$.

- As funções de onda são funções de quadrado integrável.

- A densidade de probabilidade de achar a partícula no ponto x numa medida da posição é

  $$\rho(x,t) = |\Psi(x,t)|^2.$$

- Para uma partícula livre, a função $\phi(p,t)$ definida por

  $$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}px}\phi(p,t)\,dp$$

  é a função de onda na representação dos momentos e a densidade de probabilidade de encontrar a partícula com momento p é $|\phi(p,t)|^2$.

- A posição e o momento são operadores hermitianos na Mecânica Quântica

$$x \rightarrow \hat{x} \qquad\qquad p \rightarrow \hat{p}$$

tal que

$$\hat{x}\Psi(x,t) = x\Psi(x,t)$$

$$\hat{p}\Psi(x,t) = -i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x}(x,t)$$

ou

$$\hat{x}\phi(p,t) = i\hbar\frac{\partial\phi}{\partial p}(p,t)$$

$$\hat{p}\phi(p,t) = p\phi(p,t)\,.$$

7 Princípio da incerteza

Para funções que estão relacionadas por uma transformada de Fourier existe uma reciprocidade entre as "larguras" de $\Psi(x,t)$ na representação das posições e $\phi(p,t)$ na dos momentos: se $\Psi(x,t)$ é "localizada", $\phi(p,t)$ é "espalhada" ou vice-versa. Quantitativamente essa complementaridade é expressa pela relação

$$\sigma_x\sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$$

onde σ_x é o desvio padrão das medidas de posição e σ_p é o desvio padrão das medidas do momento. O desvio padrão é a raiz quadrada da dispersão

$$\sigma_x^2 = \left\langle x^2\right\rangle - \left\langle x\right\rangle^2$$

analogamente para o momento. Esquematicamente, um valor pequeno da dispersão indica uma distribuição de probabilidade concentrada na vizinhança da média, por outro lado, um grande, uma espalhada. Esse é o famoso **princípio da incerteza de Heisenberg** que provaremos adiante. Nós o mencionamos aqui para podermos testá-lo nos exemplos.

Problema 2.21 (Griffiths): Uma partícula livre está inicialmente localizada na região $-a < x < a$,

$$\Psi(x,0) = \begin{cases} A & -a < x < a \\ 0 & \text{nos outros casos,} \end{cases}$$

onde A e a são constantes positivas.

a) Determine A normalizando $\Psi(x,0)$.

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,0)|^2 \, dx = A^2 2a$$

$$A = \frac{1}{\sqrt{2a}}.$$

b) Determine $\phi(p)$.

$$\begin{aligned}
\phi(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}px} \Psi(x,0) \, dx \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-a}^{a} e^{-\frac{i}{\hbar}px} \frac{1}{\sqrt{2a}} dx \\
&= \sqrt{\frac{a}{\hbar\pi}} \frac{\hbar}{pa} \sin\frac{pa}{\hbar}
\end{aligned}$$

c) Comente o comportamento de $\phi(p)$ para valores pequenos e grandes de a. Qual é a relação com o princípio da incerteza?

Exercício: Uma partícula livre inicialmente no estado

$$\Psi(x,0) = \frac{A}{x^2 + a^2}.$$

a) Normalização

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{A^2}{(x^2+a^2)^2} dx = 1$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{x^2+a^2} dx = \frac{\pi}{a} \qquad\qquad \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(x^2+a^2)^2} dx = \frac{\pi}{2a^3}$$

$$A^2 \frac{\pi}{2a^3} = 1 \longrightarrow A = \sqrt{\frac{2a^3}{\pi}}.$$

Logo

$$\Psi(x,0) = \sqrt{\frac{2a^3}{\pi}} \frac{1}{x^2+a^2}.$$

b) Cálculo de $\phi(p)$.

$$\begin{aligned}\phi(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}px}\Psi(x,0)\,dx \\ &= \tfrac{a}{\pi}\quad\sqrt{\frac{a}{\hbar}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}px}\frac{1}{x^2+a^2}dx\end{aligned}$$

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}px}\frac{1}{x^2+a^2}dx = \begin{cases}\frac{\pi}{a}e^{-\frac{pa}{\hbar}} & p>0\\ \frac{\pi}{a}e^{\frac{pa}{\hbar}} & p<0\end{cases}$$

Logo

$$\phi(p) = \sqrt{\frac{a}{\hbar}}e^{-\frac{|p|a}{\hbar}}.$$

Verificação:

$$\begin{aligned}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}|\phi(p)|^2\,dp &= \frac{a}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{2|p|a}{\hbar}}dp \\ &= \frac{2a}{\hbar}\int\limits_{0}^{\infty}e^{-\frac{2pa}{\hbar}}dp = \int\limits_{0}^{\infty}e^{-y}dy = 1.\end{aligned}$$

c) Valores médios e desvios padrões

$$\begin{aligned}\langle p\rangle &= \frac{a}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}pe^{-\frac{2|p|a}{\hbar}}dp \\ &= \frac{a}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{0}pe^{\frac{2pa}{\hbar}}dp + \frac{a}{\hbar}\int\limits_{0}^{\infty}pe^{-\frac{2pa}{\hbar}}dp \\ &= 0\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\left\langle p^2\right\rangle &= \frac{a}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} p^2 e^{-\frac{2|p|a}{\hbar}}dp \\ &= \frac{a}{\hbar}\int_{-\infty}^{0} p^2 e^{\frac{2pa}{\hbar}}dp + \frac{a}{\hbar}\int_{0}^{\infty} p^2 e^{-\frac{2pa}{\hbar}}dp \\ &= \frac{2a}{\hbar}\int_{0}^{\infty} p^2 e^{-\frac{2pa}{\hbar}}dp = \frac{\hbar^2}{4a^2}\int_{0}^{\infty} y^2 e^{-y}dy \\ &= \frac{\hbar^2}{2a^2}\end{aligned}$$

$$\sigma_p = \frac{\hbar}{\sqrt{2}a}$$

$$\langle x\rangle = 0$$

$$\begin{aligned}\langle x\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \frac{2a^3}{\pi}\frac{1}{x^2+a^2}dx \\ &= \frac{2a^3}{\pi}\left(\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{x^2+a^2}dx - a^2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{\left(x^2+a^2\right)^2}dx\right) \\ &= \frac{2a^3}{\pi}\left(\frac{\pi}{a} - a^2\frac{\pi}{2a^3}\right) = a^2\end{aligned}$$

$$\sigma_x = a$$

PRODUTO: $\sigma_x\sigma_P = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} = \sqrt{2}\frac{\hbar}{2}$

$$\phi\left(p,t\right) = \sqrt{\frac{a}{\hbar}}e^{-\frac{|p|a}{\hbar}}e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t}$$

$$\Psi\left(x,t\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}px}\sqrt{\frac{a}{\hbar}}e^{-\frac{|p|a}{\hbar}}e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t}dp.$$