## 5.3 Terceiro Roteiro - Ilustração da interpretação probabilística de Born

### Introdução

Nesse roteiro será iniciada a abordagem de conceitos de física quântica, especificamente a interpretação probabilística de Born para a equação de Schrödinger, e o princípio da incerteza da mecânica quântica, fundamentado na função ondulatória da equação.

Será apresentada uma relação entre o tabuleiro de Galton e a densidade de probabilidade da função de onda da equação de Schrödinger. No tabuleiro, quando se tem uma posição bem definida de uma esfera, não há necessidade de se trabalhar com a distribuição binomial ou normal para estimar sua posição. Por outro lado, no caso de muitas esferas já lançadas, para se encontrar a posição de muitas esferas, só é possível estimar sua localização mais provável. Esse raciocínio se assemelha com o colapso da função de onda em uma observação, e será discutido ao longo do roteiro.

### Objetivos

- Usar o tabuleiro de Galton para conceituar princípios da interpretação estatística de Born para a equação de Schrödinger.
- Demonstrar como uma posição bem definida de uma esfera em um tabuleiro, exclui a necessidade de uma estimativa probabilística dela.
- Demonstrar como uma esfera sem posição bem definida, necessita de cálculos de probabilidade para estimar sua localização.
- Relacionar ambos os conceitos com a função de onda da equação de Schrödinger e o colapso de onda.

### Materiais utilizados

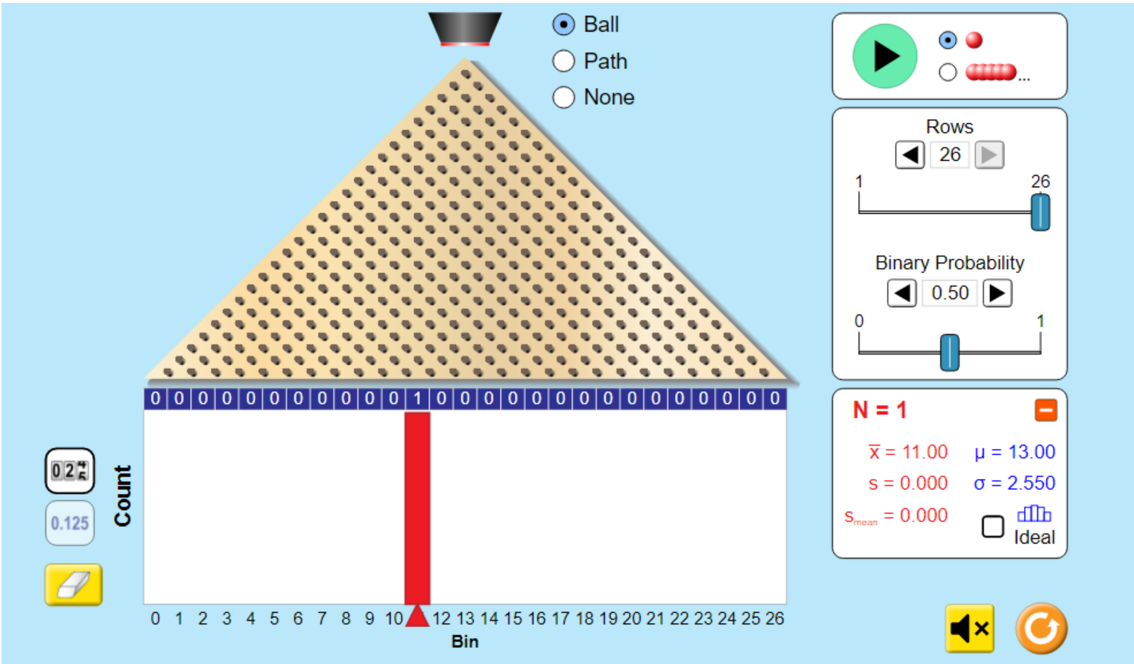
Simulador online do tabuleiro de Galton, disponível na plataforma PhET em: https://phet.colorado.edu/sims/html/plinko-probability/latest/plinko-probability_pt_BR.html.

## Desenvolvimento

Este roteiro pode ser usado em sequência com os roteiros anteriores, ou individualmente, desde que os assuntos abordados já tenham sido revisados em sala. A aplicação desse roteiro está prevista para uma aula de 100 minutos.

**Etapa 1:** Peça para os alunos abrirem o simulador, com 26 divisórias, e deixarem apenas uma esfera cair, como na Figura 1:

Figura 1 – Tabuleiro de Galton com 26 divisórias, e apenas uma esfera coletada.




Fonte: (PLINKO PROBABILITY, 2021).

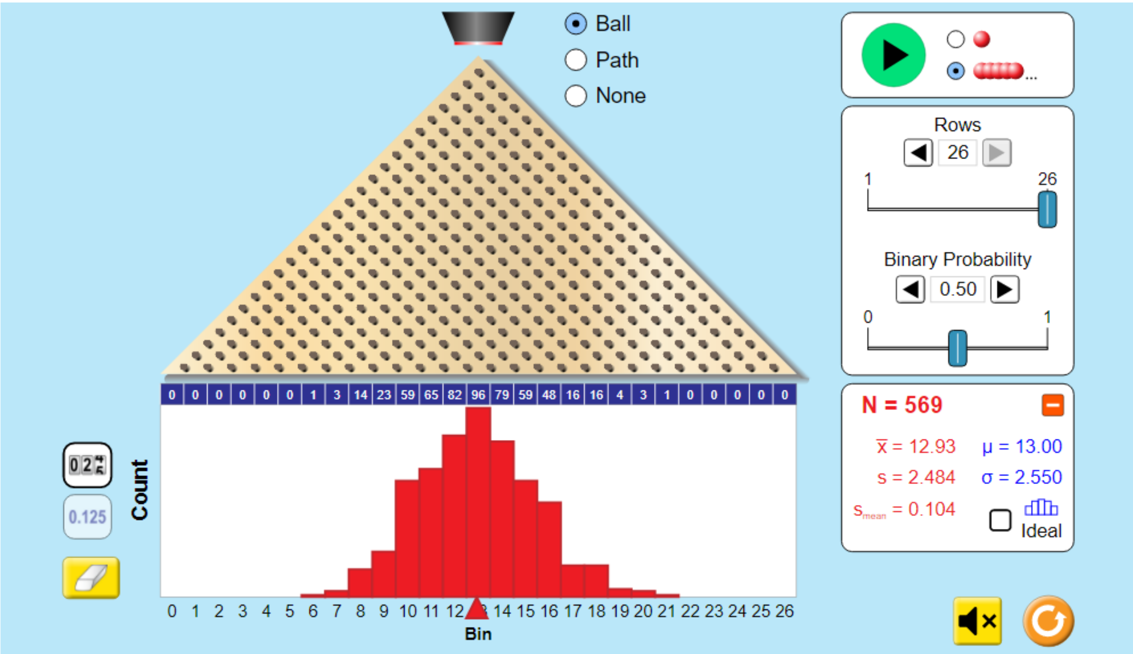
*Discuta com os alunos essa configuração do tabuleiro, caso fosse pedido a posição dessa esfera, seria respondido com precisão a divisória onde ela caiu, porém se fosse pedido a probabilidade binomial normal de onde ela está, não haveria necessidade, visto que sua localização já está bem estabelecida.*

**Etapa 2:** em seguida, com a mesma configuração, deixe uma grande quantidade de esferas caírem pelo tabuleiro, no caso da Figura 2, 569 esferas foram lançadas, como mostra o exemplo da Figura 2.

*Discuta com os alunos o caso em que se deseje encontrar uma única esfera entre as que foram lançadas, não há como determinar com precisão onde a esfera está, há um acúmulo de esferas no tabuleiro, cada esfera pode potencialmente ser a esfera que se procura.*

*Porém é possível fazer uma estimativa, é mais provável que a esfera esteja na divisória 13, que possui 96 esferas, do que na divisória 6, que só possui uma. O mesmo ocorre com a função de onda quântica, de acordo com a interpretação probabilística, ela descreve um conjunto de possibilidades, ou estados sobrepostos, de onde a partícula possa estar. Quando a posição da partícula é medida, os estados sobrepostos colapsam em um único estado possível, como se as esferas acumuladas na Figura 2 desaparecessem, deixando apenas a esfera procurada, como na Figura 1. Relembre que as distribuições de probabilidade facilitam a estimativa de onde é mais provável que a esfera ou uma partícula estejam, e por fim debata se essa incerteza implica erro experimental, ou apenas imprecisão.*

Figura 2 – Simulação do tabuleiro de Galton, com 26 divisórias, e 569 esferas lançadas.




Fonte: (PLINKO PROBABILITY, 2021).

**Etapa 3:** relacione as discussões sobre os casos acima, com a **Erro! Fonte de referência não encontrada.**, da função de onda da equação de Schrödinger, e sua interpretação probabilística, assim como a **Erro! Fonte de referência não encontrada.**, que ilustra o colapso da função de onda quando a posição da partícula é medida.

*Discuta com os alunos as duas principais correntes de interpretação do colapso de onda, na interpretação realista, a partícula se comporta como a esfera, ela sempre esteve em um ponto específico, e ao encontrá-la só determinamos onde ela está. Nesse caso a indeterminação da posição antes da medição representa uma falha na precisão da medição. Já na interpretação ortodoxa, a partícula não está em um ponto específico, ela está distribuída* *ao longo de toda a função de onda, é o ato de medir que força a partícula a tomar uma decisão (GRIFFITHS, 2011).*

*A corrente ortodoxa é a mais aceita atualmente, e essa interpretação, de que o ato de medir interfere no experimento, será abordada com mais detalhes no próximo roteiro.*

**Avaliação**

Esta avaliação consiste em um problema adaptado de Eisberg (1979), e como avaliação formativa, tem por finalidade facilitar a aprendizagem o aluno, reforçando o conteúdo já apresentado o conteúdo já apresentado no roteiro (HADJI, 1994). Os exercícios abordam a normalização de uma função de onda, e o cálculo da probabilidade envolvendo a localização de uma partícula, através da função $\Psi(x,t)$. Deve se destacar ao aluno como uma função de onda quântica fornecerá apenas uma estimativa da posição de uma partícula, e após essa estimativa, não temos mais uma onda distribuída, mas uma densidade de probabilidade em uma região no espaço.

Questão 1 – (EISBER, 1979) A função de onda $\Psi(x,t)$ para o estado de menor energia de um oscilador harmônico simples, constituído de uma partícula de massa $m$ sob ação de uma força restauradora linear cuja constante é $C$, pode ser expressa como:

$$\Psi(x,t) = A \cdot exp\left[-\frac{\sqrt{Cm}}{2h}x^2\right] \cdot exp\left[-\frac{i}{2}\sqrt{Cmt}\right]$$

onde a constante $A$ pode possuir qualquer valor real.

Calcule a densidade de probabilidade para a função de onda no estado de menor energia em um oscilador harmônico simples.

*O professor pode resolver esse exercício com os alunos, ou deixar que estes resolvam sozinhos, o importante é debater com os alunos os conceitos que serão abordados nessa questão. Sabendo que de acordo com a interpretação de Bohr, a probabilidade é calculada através do complexo conjugado da função de onda, portanto:*

$$P(x,t) = \Psi^*(x,t) \cdot \Psi(x,t)$$

*Logo:*

$$P(x,t) = \left\{A \cdot exp\left[-\frac{\sqrt{Cm}}{2h}x^2\right] \cdot exp\left[\frac{i}{2}\sqrt{Cmt}\right]\right\} \cdot \left\{A \cdot exp\left[-\frac{\sqrt{Cm}}{2h}x^2\right] \cdot exp\left[-\frac{i}{2}\sqrt{Cmt}\right]\right\}$$

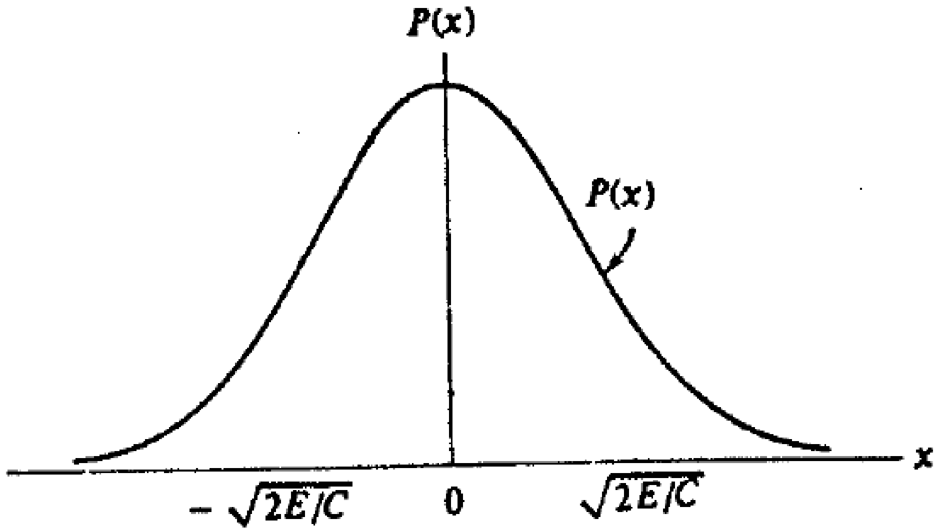
$$= A^2 exp\left[-\frac{\sqrt{Cm}}{2h}x^2 + \left(-\frac{\sqrt{Cm}}{2h}x^2\right)\right] \cdot exp\left[\frac{i}{2}\sqrt{Cmt} + \left(-\frac{i}{2}\sqrt{Cmt}\right)\right]$$

$$= A^2 exp\left[-\frac{2\sqrt{Cm}}{2h}x^2\right] \exp(0)$$

$$P(x,t) = A^2 exp\left(-\frac{\sqrt{Cm}}{h}x^2\right)$$

Questão 2 - Analise o gráfico dado pela probabilidade acima com uma função de $P(x)$, e disserte sobre a similaridade com a distribuição normal, e o tabuleiro de Galton:

Figura 3 – Representação gráfica de probabilidade P(x)




Fonte: (EISBERG, 1979).

*É fácil notar a semelhança com a distribuição normal de probabilidade e o tabuleiro de Galton. Os alunos devem associar as probabilidades de se encontrar x em determinado ponto do oscilador, de acordo com a curva do gráfico, sendo o ponto de equilíbrio em* $x = 0$, *há maior probabilidade de encontrar a partícula neste ponto.*

*O interessante no gráfico é destacar que a curva não toca o eixo x, portanto a probabilidades pequenas de que a partícula seja encontrada distante do oscilador, o professor pode ressaltar essa semelhança com as divisórias das extremidades de um tabuleiro de Galton com muitas divisórias, há uma probabilidade de uma partícula cair nessas divisórias, mesmo sendo pequena.*

Questão 3 (adaptado de TAMVAKIS, 2005) – Uma partícula possui a função de onda

$$\Psi(r) = Ne^{-\alpha r}$$

onde N é o fator de normalização e $\alpha$ é um parâmetro real conhecido.

a) Calcule o fator N, e explique seu significado.

*A partícula estará em algum lugar do espaço, então ao integrarmos em um volume de uma esfera, temos valores de raio desde* $-\infty$ *até* $+\infty$*, a probabilidade de encontrar a partícula é 1. Assim:*

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(\vec{r})d^3r = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(r) \cdot \Psi(r)d^3r = 1$$

*O termo* $d^3r$ *é o diferencial de volume da esfera que está se considerando. Logo:*

$$d^3r = 4\pi r^2 dr$$

*Então,*

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (Ne^{-\alpha r})(Ne^{-\alpha r})4\pi r^2 dr = 1$$

*Como* $N$ *e* $4\pi$ *são constantes, podem sair da integral:*

$$4\pi N^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\alpha r} d^3r = 1$$

*Como é difícil realizar essa integral de* $-\infty$ *até* $+\infty$*, dividimos ela em duas partes: uma de* $-\infty$ *até 0, e outra de 0 até de* $+\infty$*:*

$$4\pi N^2 \left\{ \int_{-\infty}^{0} r^2 e^{-2\alpha r} dr + \int_{0}^{+\infty} r^2 e^{-2\alpha r} dr \right\} = 1$$

*A primeira integral diverge, logo =0, do Manual de Fórmulas da coleção de Schaun, integral 18.76* (SPIEGEL, 2011)*, temos:*

$$\int_0^{+\infty} x^n e^{-ax} dx = \frac{\Gamma(n+1)}{a^{n+1}}$$

*onde* $\Gamma(n+1)$ *é a função gama e* $\Gamma(n+1) = n!$

*Fazendo a correspondência com a nossa integral:* $a = 2\alpha, n = 2$ *e* $x = r$. *Logo:*

$$4\pi N^2 \left(\frac{\Gamma(2+1)}{(2\alpha)^{2+1}}\right) = 1$$

$$\Rightarrow \frac{4\pi N^2 2!}{8\alpha^3} = 1$$

$$= \frac{\pi N^2}{\alpha^3} = 1$$

$$\Rightarrow N = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}}$$

*A constante N se trata de uma constante de normalização, utilizando o valor desta constante na função de onda, é efetuado o processo chamado de normalização, e a função de onda resultante é chamada de normalizada* (EISBERG, 1979). *A normalização tem o efeito de fixar a amplitude, ao fixar o valor da constante multiplicativa.*

b) Sendo a incerteza $(\Delta r)^2 = \frac{3}{(2\alpha)^2}$ calcule a probabilidade de encontrar a partícula na região $r > \Delta r$.

*A probabilidade de encontrar a partícula na região* $\Delta r < r < \infty$ *é*

$$P(\vec{r}) = \int_{\Delta r}^{\infty} \Psi^*(r,t) \cdot \Psi(r,t) d^3r$$

*Como* $\Delta r = \sqrt{\frac{3}{(2\alpha)^2}} = \frac{\sqrt{3}}{2\alpha}$ *temos:*

$$P(\vec{r}) = \int_{\frac{\sqrt{3}}{2\alpha}}^{\infty} (Ne^{-\alpha r})(Ne^{-\alpha r})(4\pi r^2 dr)$$

$$= 4\pi N^2 \int_{\frac{\sqrt{3}}{2\alpha}}^{\infty} e^{-2\alpha r} r^2 dr$$

*Para realizar essa integral, é necessário fazer uma mudança de variável. Vamos chamar* $y = 2\alpha r$, $dy = 2\alpha dr \Rightarrow dr = \frac{dy}{2\alpha}$ *e* $y^2 = 4\alpha^2 r^2 \Rightarrow r^2 = \frac{y^2}{4\alpha^2}$ *. Mas o limite de integração também muda, se* $y = 2\alpha \frac{\sqrt{3}}{2\alpha} \Rightarrow y = \sqrt{3}$.

$$P(\vec{r}) = 4\pi N^2 \int_{\sqrt{3}}^{\infty} e^{-y} \frac{y^2}{4\alpha^2} \frac{dy}{2\alpha}$$
$$= 4\pi N^2 \frac{1}{8\alpha^3} \int_{\sqrt{3}}^{\infty} e^{-y} y^2 dy$$

*Como* $N = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}}$ *e, da calculadora de integrais symbolab.com* (2021)*:*

$$\int_b^{\infty} x^2 e^{-x} dx = 2be^{-b} + 2e^{-b} + b^2 e^{-b}$$

*onde* $b = \sqrt{3}$.

$$P(\vec{r}) = \frac{\alpha^3}{\pi} 4\pi \frac{1}{8\alpha^3} \left(2\sqrt{3}e^{-\sqrt{3}} + 2e^{-\sqrt{3}} + (\sqrt{3})^2 e^{-\sqrt{3}}\right)$$
$$= \frac{1}{2}(0{,}61287 + 0{,}35384 + 0{,}53076)$$
$$P(\vec{r}) = \frac{1}{2} \cdot 1{,}49747 \approx 0{,}7487$$

*Logo, a probabilidade de que a partícula esteja na região estabelecida é de aproximadamente 74,874%.*

Questão 4 – Uma partícula está no nível de energia $n$ no estado $\Psi_n(x)$ em um poço de potencial infinito de largura L.

a) Determine a probabilidade $P_n(\frac{1}{a})$ de que a partícula esteja confinada na primeira $1/a$ largura da parede.

*A função de onda* $\Psi_n(x)$ *para uma partícula em um poço de potencial infinito com paredes de* $x = 0$ *até* $x = L$ *é:*

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

*A probabilidade* $P_n(\frac{1}{a})$ *que o elétron esteja entre de* $x = 0$ *e até* $x = L/a$ *no estado*$\Psi_n(x)$ *é:*

$$P_n\left(\frac{1}{a}\right) = \int_0^{\frac{L}{a}} \Psi^*(x,t) \cdot \Psi(x,t) dx$$

$$= \int_0^{\frac{L}{a}} \left[\sqrt{\frac{2}{L}} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\right]\left[\sqrt{\frac{2}{L}} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\right] dx$$

$$P_n\left(\frac{1}{a}\right) = \left(\sqrt{\frac{2}{L}}\right)^2 \int_0^{L/a} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx$$

*sabemos que* $\int_0^b \sin^2(ax)\, dx = \frac{1}{2}b - \frac{1}{4a}\sin(2ab)$, *temos que em nossa integral,* $b = \frac{L}{a}$ *e* $a = \frac{n\pi}{L}$.*Então:*

$$P_n\left(\frac{1}{a}\right) = \frac{2}{L}\left[\frac{1}{2} \cdot \frac{L}{a} - \frac{1}{4\left(\frac{n\pi}{L}\right)} \sin\left(2\frac{n\pi}{L}\frac{L}{a}\right)\right]$$

$$= \frac{2L}{2La} - \frac{2L}{4n\pi} \sin\left(2\frac{n\pi}{L}\frac{L}{a}\right)$$

$$P_n\left(\frac{1}{a}\right) = \frac{1}{a} - \frac{1}{2n\pi} \sin\left(\frac{2n\pi}{a}\right)$$

b) Comente a dependência de $P_n\left(\frac{1}{a}\right)$ e $n$.

*A probabilidade* $P_n\left(\frac{1}{a}\right)$ *da partícula estar no estado* $\Psi_n(x)$ *está limitada à primeira* $\frac{1}{a}$ *largura do poço. O termo senoidal dependente de* $n$ *diminui quando* $n$ *aumenta, e tende a zero quando* $n$ *é muito grande.*

$$P_n\left(\frac{1}{a}\right) \to \frac{1}{a} \; quando \; n \to \infty$$

*O resultado* $P_n\left(\frac{1}{a}\right) = \frac{1}{a}$ *é um resultado clássico. A análise acima é consistente com o princípio da correspondência, que pode ser representado por:*

$$física\ quântica\ \to física\ clássica\ quando\ n \to \infty$$

*onde* $n$ *é qualquer número quântico típico.*

*No caso deste exemplo n é o nível de energia em que se encontra o elétron, se for tomado um valor para n muito grande, fora dos níveis assumidos para um elétron, o princípio da correspondência diz que há uma troca das leis da física quântica, pelas leis da física clássica. Por essa razão, fenômenos quânticos não podem ser observados em escala maior durante o dia a dia; quando qualquer número quântico assume valores de escala macroscópica, a física clássica pode ser usada no lugar da quântica.*

c) Para um elétron no estado fundamental, qual a probabilidade de se encontrar a partícula no primeiro $\frac{1}{4}$ de largura do poço?

*No nível fundamental,* $n = 1$*, logo:*

$$P\left(\frac{1}{4}\right) = \frac{1}{4} - \frac{1}{2 \cdot 1 \cdot \pi} \sin\left(\frac{2 \cdot 1 \cdot \pi}{4}\right)$$

$$P\left(\frac{1}{4}\right) = 0{,}25 - 0{,}159 = 0{,}091$$

Logo, a probabilidade de que um elétron no nível fundamental esteja no primeiro $\frac{1}{4}$ de largura do poço é de 9,1%.