Física Quântica I / Mecânica Quântica

Vítor M. Pereira

Departamento de Física | Universidade do Minho

2021/22 — 2º Sem

Lição 16

Trem de ondas da partícula livre (EN: *wavepackets*)

Reciprocidade entre funções de onda da posição e do momento

Trens de onda (wavepackets)

Evolução de um trem de onda livre

Corrente de probabilidade e a sua conservação

Resultados principais da discussão entre as lições 13 e 15

- Representações (bases) de posição e momento

$$|\psi\rangle = \int dx\, \psi(x)\, |x\rangle = \int dp\, \psi(p)\, |p\rangle.$$

- Ação dos operadores de posição e de momento sob funções de onda:

$$\hat{\mathrm{X}}: \quad \langle x|\hat{\mathrm{X}}|\psi\rangle = x\,\psi(x), \qquad\qquad \hat{\mathrm{P}}: \quad \langle x|\hat{\mathrm{P}}|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x).$$

- Relação de comutação e produto das incertezas

$$[\hat{\mathrm{X}},\, \hat{\mathrm{P}}] = i\hbar, \qquad \delta X\, \delta P \geq \frac{\hbar}{2}.$$

- Funções próprias do operador $\hat{\mathrm{P}}$

$$\langle x|p\rangle \equiv \psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}.$$

- Equação de Schrödinger na base de posição:

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{\mathrm{H}}\,|\psi(t)\rangle \qquad \longrightarrow \qquad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\,\psi(x,t).$$

- Dependência temporal das funções de onde (quando $\hat{\mathrm{H}}$ é constante no tempo)

$$\psi(x,t) = \sum_n \langle\varphi_n|\psi(0)\rangle e^{-iE_n t/\hbar}\,\varphi_n(x), \qquad \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\varphi_n(x) = E_n\,\varphi_n(x).$$

Reciprocidade nas densidades de probabilidade da posição e do momento

Recordemos a relação entre as incertezas que derivámos na L14:

$$[\hat{\mathrm{X}},\,\hat{\mathrm{P}}] = i\hbar \quad \Rightarrow \quad \delta X\,\delta P \geq \frac{\hbar}{2} \quad \Rightarrow \quad \delta X \propto \frac{1}{\delta P}.$$

Isto pode ver-se como decorrente da relação entre as duas densidades de probabilidade:

$$|\psi\rangle = \int dx\,\psi(x)|x\rangle = \int dp\,\psi(p)|p\rangle$$

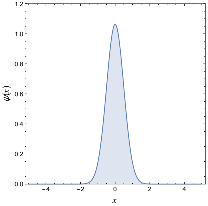
$$\downarrow$$

prob. posição: $\mathcal{P}(x) = |\psi(x)|^2$, prob. momento: $\mathcal{P}(p) = |\psi(p)|^2$

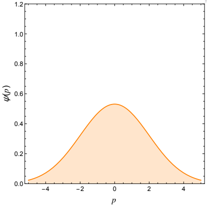
$$\downarrow$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(p)\, e^{ipx/\hbar}\, dp$$

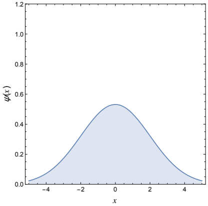
Posição $\psi(x)$



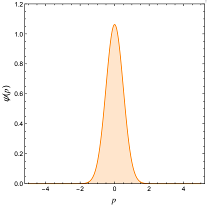
Momento $\psi(p)$



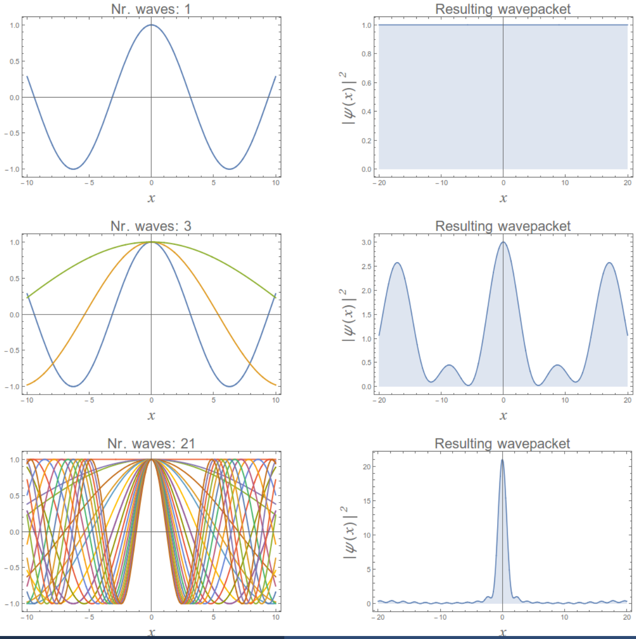
Posição $\psi(x)$



Momento $\psi(p)$



Como se constroi/consegue uma FdO localizada no espaço?



$$\psi(x) = 1$$

$$\psi(x) = e^{ik_1\,x} + e^{ik_2\,x} + e^{ik_3\,x}$$

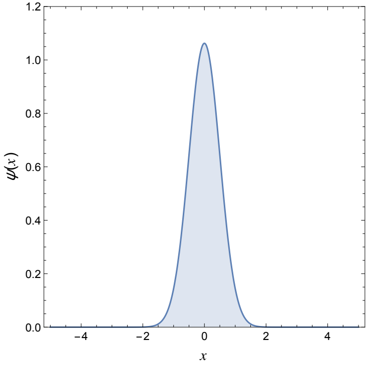
$$\psi(x) = \sum_n c_n\, e^{ik_n\,x}$$

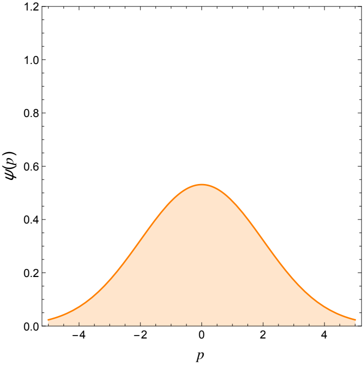
Trem de ondas – sobreposição contínua de ondas planas

Uma sobreposição linear contínua de ondas planas $\propto e^{ixp/\hbar}$,

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(p)\, e^{ipx/\hbar}\, dp,$$

em que a distribuição de momentos ($\psi(p)$) é normalizável resulta numa FdO para a posição que é localizada no espaço — é um trem de ondas. (EN: wavepacket)





As larguras das distribuições de probabilidade $|\psi(x)|^2$ e $|\psi(p)|^2$ estão relacionadas através de:

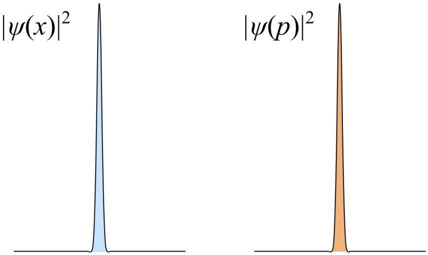
$$\delta P\, \delta X \sim \hbar$$

Porque não observamos efeitos quânticos à escala macroscópica?

$$\delta X\,\delta P \sim \hbar, \qquad \hbar \approx 10^{-34} \quad \text{(SI)}$$

Quais são as ordens de magnitude típicas (massas, velocidades, deslocamentos, tempos) de fenómenos macroscópicos?

- Não se trata de dois mundos diferentes...
- Na prática, os trens de onda são extremamente localizados (finos) à escala macroscópica!
- ...não obstante satisfazerem sempre a relação de incerteza de Heisenberg.



Em termos práticos numa situação macroscópica, as posições e momentos podem ser especificados com uma precisão muito elevada (mas nunca infinita).

Movimento de uma partícula livre

O problema

Como evolui no tempo um trem de ondas que começa como $\psi(x,t_0)$ em $t=t_0$?

Já sabemos bem que, em termos do operador de evolução,

$$|\psi(t)\rangle = \hat{\mathrm{U}}(t,0)|\psi(0)\rangle \qquad \longmapsto \qquad \psi(x,t) = \langle x|\hat{\mathrm{U}}(t,0)|\psi(0)\rangle.$$

Introduzindo duas resoluções da identidade na forma $\mathbf{1} = \int |p\rangle\langle p|\, dp$, temos

$$\psi(x,t) = \int dp \int dp' \,\langle x|p\rangle\langle p|\hat{\mathrm{U}}(t,0)|p'\rangle\langle p'|\psi(0)\rangle.$$

Agora, para uma partícula livre (potencial nulo) $\hat{\mathrm{H}} = \frac{1}{2m}\hat{\mathrm{P}}^2$, logo

$$\hat{\mathrm{U}}(t,0) = e^{-i\,\hat{\mathrm{H}}\,t/\hbar} = e^{-i\,\hat{\mathrm{P}}^2 t/2m\hbar} \quad \longrightarrow \quad \langle p|\hat{\mathrm{U}}(t,0)|p'\rangle = e^{-i\,p^2\,t/2m\hbar}\,\langle p|p'\rangle = e^{-i\,p^2\,t/2m\hbar}\delta(p-p').$$

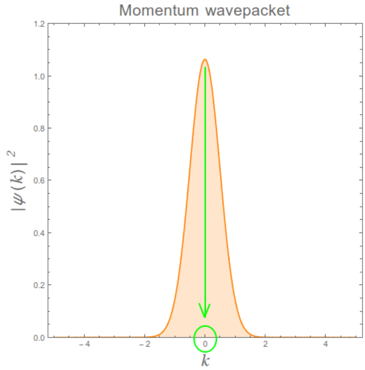
Portanto, substituíndo acima, a FdO no instante t fica

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dp\, e^{ipx/\hbar}e^{-ip^2 t/2m\hbar}\langle p|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dp\, e^{ipx/\hbar}e^{-iE_p t/\hbar}\psi(p,0), \qquad E_p \equiv \frac{p^2}{2m}.$$

Podemos notar que esta expressão é análoga à que derivamos para uma base discreta:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \langle\varepsilon_n|\psi(0)\rangle\, e^{-iE_n t/\hbar}|\varepsilon_n\rangle,$$ onde $|\varepsilon_n\rangle$ são os autoestados de energia: $\hat{\mathrm{H}}|\varepsilon_n\rangle = E_n|\varepsilon_n\rangle$.

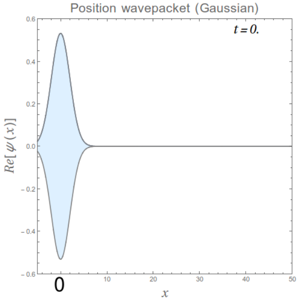
Trem de ondas livre 1 – momento médio nulo

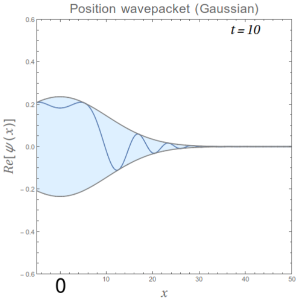


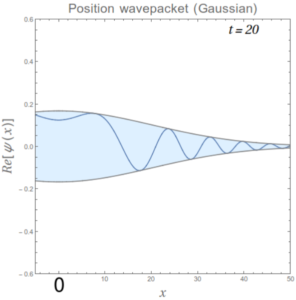
$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp\, e^{ipx/\hbar} e^{-iE_p t/\hbar} \psi(p,0)$$

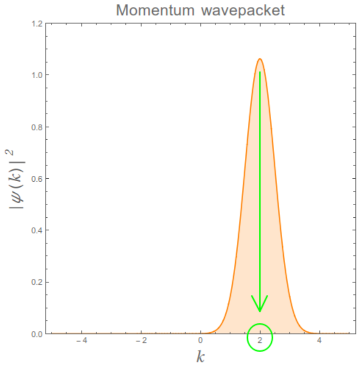
$\longleftarrow$ $|\psi(p)|^2$ em $t=0$, sendo que $\langle \hat{\mathrm{P}} \rangle_\psi = 0$.

parte real de $\psi(x,t)$ a diferentes t.
$\downarrow$





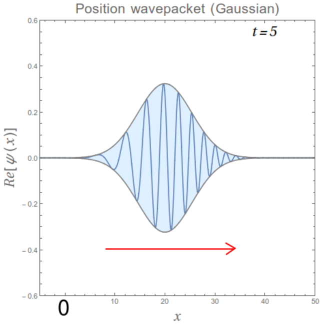


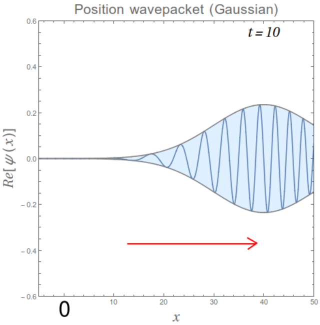


$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp\, e^{ipx/\hbar} e^{-iE_p t/\hbar} \psi(p,0)$$

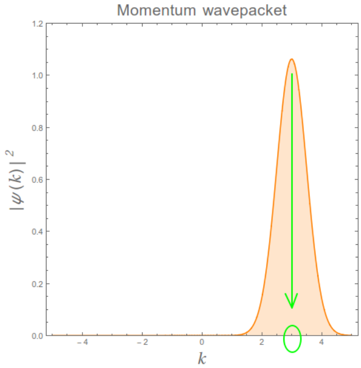
$\longleftarrow$ $|\psi(p)|^2$ em $t=0$, sendo que $\langle \hat{\mathrm{P}} \rangle_\psi \neq 0$.

parte real de $\psi(x,t)$ a diferentes t.
$\downarrow$





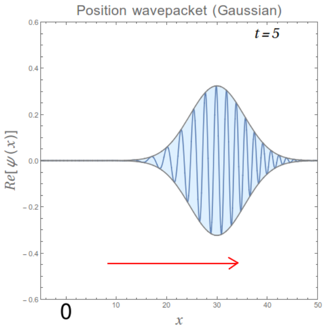
Trem de ondas livre 3 – momento médio maior do que o anterior

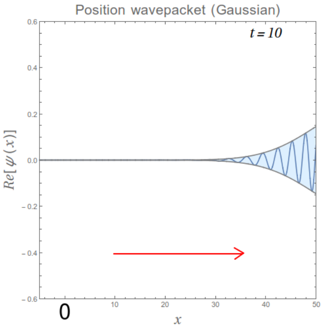


$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp\, e^{ipx/\hbar} e^{-iE_p t/\hbar} \psi(p,0)$$

$\longleftarrow$ $|\psi(p)|^2$ em $t = 0$, com $\langle \hat{\mathrm{P}} \rangle_\psi \neq 0$.

parte real de $\psi(x,t)$ a diferentes t.
$\downarrow$





Descrição aproximada do movimento do trem de ondas

O ponto de partida é a FdO exata que descreve o trem de ondas:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp\, e^{i(px - E_p t)/\hbar} \psi(p,0), \qquad E_p \equiv \frac{p^2}{2m}.$$

Consideremos o caso $\psi(p) \in \mathbb{R}$, e que o máximo de $\psi(p)$ ocorre em $p = p_0$:

$$px - E_p t \quad \xrightarrow[\text{em torno de } p_0]{\text{expansão de Taylor}} \quad p_0 x - E_{p_0} t + \left(x - \frac{\partial E_p}{\partial p} t\right)_{p=p_0} (p - p_0) + \ldots$$

Substituindo acima, ficamos com

$$\psi(x,t) \simeq \frac{e^{i(p_0 x - E_{p_0} t)/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp\, \exp\left[i\left(x - \frac{\partial E_p}{\partial p} t\right)(p - p_0)/\hbar \right] \psi(p,0).$$

Daqui, podemos ver que $|\psi(x,t)|^2$ terá o seu máximo na posição x_M dada por

$$x_M \equiv \frac{\partial E_p}{\partial p} t \quad \Rightarrow \quad \text{o trem de ondas move-se com uma velocidade de grupo } v_g \equiv \left.\frac{\partial E_p}{\partial p}\right|_{p=p_0}.$$

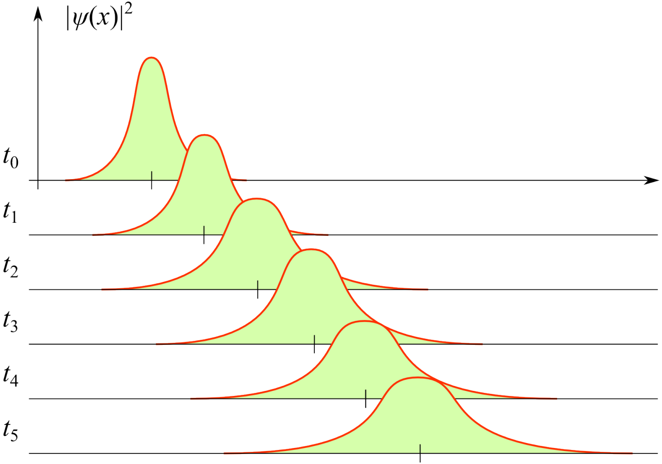
Ou seja, podemos escrever aproximadamente:

$$\psi(x,t) \simeq \frac{e^{i(x p_0 - E_{p_0} t)/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp\, e^{i(x - v_g t)(p - p_0)/\hbar} \psi(p,0), \qquad v_g \equiv \left.\frac{\partial E_p}{\partial p}\right|_{p=p_0} = \frac{p_0}{m}.$$

Descrição aproximada do movimento do trem de ondas

$$\psi(x,t) \simeq \frac{e^{i(xp_0 - E_{p_0}t)/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp\, e^{i(x - v_g t)(p-p_0)/\hbar} \psi(p,0), \qquad v_g \equiv \frac{p_0}{m}.$$

Esta evolução temporal tem o aspeto gráfico seguinte, em sucessivos instantes t:



Nota: além de se deslocar no espaço, a largura (dispersão) do trem vai aumentando com o tempo.

Distinção entre velocidade de grupo e velocidade de fase

Uma distinção subtil mas importante entre duas velocidades presentes num trem de ondas

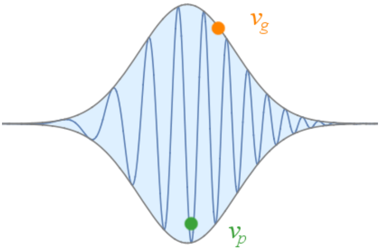
$$\psi(x,t) \simeq \frac{e^{ip_0(x-\frac{E_{p_0}}{p_0}t)/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp\, e^{i(x-v_g t)(p-p_0)/\hbar}\psi(p,0).$$

A velocidade de grupo carateriza a propagação do “envelope” envolvente da FdO:

$$v_g \equiv \frac{\partial E_p}{\partial p}\bigg|_{p=p_0} = \frac{p_0}{m}.$$

A velocidade de fase carateriza a propagação de cada onda que integra o trem:

$$v_p \equiv \frac{E_{p_0}}{p_0} = \frac{p_0}{2m}, \qquad \text{notar que } v_g \neq v_p \text{ em geral}$$



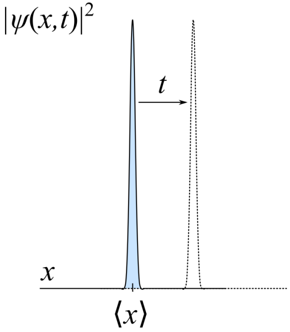
Revisitando o teorema de Ehrenfest

Teorema de Ehrenfest para 1 partícula (ver L15)

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{\mathrm{X}}\rangle_\psi = \frac{1}{m}\langle\hat{\mathrm{P}}\rangle_\psi \qquad \qquad \frac{dx}{dt} = \frac{p}{m}$$

$$\xrightarrow[\text{mov. clássicas}]{\text{análogo das eqs.}}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{\mathrm{P}}\rangle_\psi = -\big\langle V'(\hat{\mathrm{X}})\big\rangle_\psi \qquad \qquad \frac{dp}{dt} = -\mathcal{V}'(x) = F(x)$$



$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{\mathrm{X}}\rangle_\psi = v_g = \frac{p_0}{m} = \frac{1}{m}\langle\hat{\mathrm{P}}\rangle_\psi .$$

- O centro de trem de ondas $\psi(x)$ move-se com velocidade constante igual a v_g.
- A vel. clássica (Newtoniana) é apenas a velocidade de grupo do trem de ondas quântico.

A corrente (ou fluxo) de probabilidade

Vimos antes (L7) que a normalização do vetor de estado é preservada no tempo:

$$\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 0. \qquad \text{(conservação global da probabilidade)}$$

A equação de Schrödinger para a FdO $\psi(x,t)$,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \mathcal{H}\psi(x,t) \quad \Leftrightarrow \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \mathcal{V}(x)\right]\psi(x,t),$$

garante também a existência de uma lei de conservação local da densidade de probabilidade

$$\rho(x,t) \equiv |\psi(x,t)|^2 = \psi^*(x,t)\,\psi(x,t). \qquad \text{(densidade de probabilidade para a posição)}$$

Derivê-mo-la:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\rho(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}\Big[\psi^*(x,t)\,\psi(x,t)\Big] &= \psi^*(x,t)\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} + \psi(x,t)\frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial t} \\
&= \psi^*(x,t)\left[\frac{-i}{\hbar}\mathcal{H}\,\psi(x,t)\right] + \psi(x,t)\left[\frac{+i}{\hbar}\mathcal{H}\,\psi^*(x,t)\right] \\
&= -\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*(x,t)\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x} - \psi(x,t)\frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial x}\right)\right] \\
&= -\frac{\partial}{\partial x}\mathcal{J}(x,t) \qquad [\mathcal{J}(x,t):\ \text{corrente de probabilidade}]
\end{aligned}$$

A eq. Schrödinger implica conservação local da densidade de probabilidade

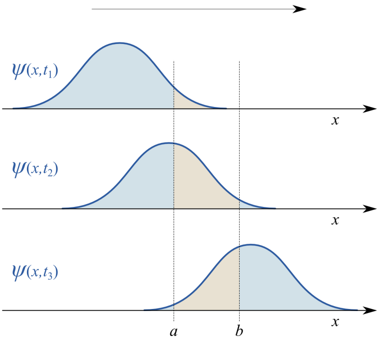
$$\frac{\partial\rho(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial\mathcal{J}(x,t)}{\partial x} = 0 \quad \xrightarrow[\text{no caso 3D}]{\text{generaliza-se}} \quad \frac{\partial\rho(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\mathcal{J}}(\boldsymbol{r},t) = 0$$

Interpretação da corrente de probabilidade (caso 1D)

densidade: $\rho(x,t) \equiv |\psi(x,t)|^2$, **corrente:** $\mathcal{J}(x,t) \equiv \frac{\hbar}{2im}\left[\psi^*(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t) - \psi(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\psi^*(x,t)\right].$

Conservação local da densidade de probabilidade

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial \mathcal{J}(x,t)}{\partial x} = 0$$



Em qualquer região do espaço, p. ex. $a \leq x \leq b$, temos

$$\int_a^b \frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t}\,dx + \int_a^b \frac{\partial \mathcal{J}(x,t)}{\partial x}\,dx \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\partial}{\partial t}\mathcal{P}(a \leq x \leq b) = \mathcal{J}(a,t) - \mathcal{J}(b,t).$$

A última equação significa: a taxa de variação da probabilidade (de encontrar a partícula numa dada região do espaço) é igual ao balanço do fluxo de probabilidade que entra nessa mesma região (corrente que entra menos corrente que sai).

Resumo – trens de ondas e partículas livres

- A dependência temporal exata de uma FdO é dada por

$$\psi(x,t) = \sum_n \langle \varepsilon_n | \psi(0) \rangle e^{-iE_n\, t/\hbar}\, \varphi_n(x), \qquad \text{em que} \quad \hat{\mathrm{H}} |\varepsilon_n\rangle = E_n\, |\varepsilon_n\rangle.$$

- No caso particular de uma partícula livre, $\hat{\mathrm{H}} = \frac{\hat{\mathrm{P}}^2}{2m}$, cujas funções próprias são

$$\hat{\mathcal{H}}\, \varphi_p(x) = E_p\, \varphi_p(x) \quad \Leftrightarrow \quad \left[-\frac{i\hbar}{2m} \frac{d}{dx} \right]^2 \varphi_p(x) = E_p\, \varphi_p(x) \quad \longrightarrow \quad \varphi_p(x) = \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}, \quad E_p = \frac{p^2}{2m}.$$

- Para a partícula livre, a FdO varia então no tempo segundo

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp\, e^{ipx/\hbar} e^{-iE_p t/\hbar} \psi(p,0), \qquad E_p \equiv \frac{p^2}{2m}.$$

- Um trem de ondas geral $\psi(x)$ consiste numa sobreposição contínua de ondas do tipo

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(p)\, e^{ipx/\hbar}\, dp \qquad \text{em que} \qquad \delta X \delta P \sim \hbar.$$

- O trem de ondas de uma partícula livre com $\langle \hat{\mathrm{P}} \rangle = p_0$ evolui aproximadamente segundo

$$\psi(x,t) \simeq \frac{e^{i(p_0 x - E_{p_0} t)/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp\, e^{i(x - v_g t)(p-p_0)/\hbar} \psi(p,0), \qquad v_g \equiv \left. \frac{\partial E_p}{\partial p} \right|_{p=p_0} = \frac{p_0}{m}.$$