UFABC - Física Quântica - Curso 2017.3

Prof. Germán Lugones

Aula 10

Valores Esperados

A função de onda $\boldsymbol{\psi}(x,t)$ contém **toda a informação** sobre o comportamento de uma partícula.

$\boldsymbol{\psi}(x,t)$ pode ser obtida a partir da equação de Schrödinger independente do tempo.

Resta ainda saber como podemos extrair a informação do sistema a partir da função de onda $\boldsymbol{\psi}(x,t)$.

Obter informações sobre:

- posição,
- momento,
- energia,
- e outras grandezas que caracterizam o movimento das partículas.

Valor esperado da posição

Suponha que preparamos vários sistemas idênticos (por exemplo, átomos de hidrogénio com o elétron no estado fundamental).

Se medimos a posição da partícula, a probabilidade de a probabilidade de encontrá-la entre x e x+dx é:

$$P(x,t)\,dx = \boldsymbol{\psi}^*(x,t)\boldsymbol{\psi}(x,t)dx$$

Se realizarmos uma série de medidas desses sistemas, no mesmo instante de tempo t, obteremos diferentes valores da posição x.

A média desses valores é:

$$\langle x \rangle = \int_0^\infty xP(x,t)dx = \int_0^\infty \Psi^*(x,t)x\Psi(x,t)dx$$

Em mecânica quântica, este valor médio é denominado **valor esperado da coordenada.**

O valor esperado de qualquer função pode ser calculado da mesma forma:

$$\langle x^2 \rangle = \int_0^\infty x^2 P(x,t)dx = \int_0^\infty \Psi^*(x,t)x^2\Psi(x,t)dx$$
$$\langle f(x) \rangle = \int_0^\infty f(x) P(x,t)dx = \int_0^\infty \Psi^*(x,t)f(x)\Psi(x,t)dx$$

Mesmo pode ser feito para uma função que dependa explicitamente do tempo, pois todas as medidas são realizadas no mesmo instante de tempo t:

$$\langle f(x,t) \rangle = \int_0^\infty f(x,t) P(x,t)dx = \int_0^\infty \Psi^*(x,t)f(x,t)\Psi(x,t)dx$$

Valor esperado do momento

O valor esperado do momento p de uma partícula é:

$$\langle p \rangle = \int_0^{\infty} pP(x,t)dx = \int_0^{\infty} \Psi^*(x,t)p\Psi(x,t)dx$$

Para calcular a integral anterior, precisamos escrever p em função de x e t.

No entanto, lembremos que pelo princípio de incerteza não é possível determinar x e p simultaneamente → não é possível escrever p=p(x,t); não há trajetórias em Física Quântica.

Para encontrar a uma relação entre x e p vamos considerar uma onda senoidal:

$$\Psi(x,t) = e^{i(kx-\omega t)}$$

Derivamos em relação a x:

$$\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} = \frac{\partial e^{i(kx-\omega t)}}{\partial x} = ike^{i(kx-\omega t)} = i\frac{p}{\hbar}\Psi$$

Portanto (usando –i = 1/i) temos:

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

Em Física Quântica, a variável dinâmica p é representada por um operador diferencial:

$$p = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

Esta associação foi obtida no caso particular de uma função de onda senoidal. No entanto, a relação é válida em geral.

Agora podemos calcular o valor esperado do momento:

$$\langle p \rangle = \int_0^\infty \Psi^*(x,t)[p\Psi(x,t)]dx = \int_0^\infty \Psi^*(x,t)\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t)\right]dx$$

Valor esperado da energia

O valor esperado da energia E de uma partícula é:

$$\langle E \rangle = \int_0^\infty E\, P(x,t)dx = \int_0^\infty \Psi^*(x,t) E \Psi(x,t) dx$$

Para obter E em função de x e t, vamos considerar novamente uma onda senoidal:

$$\Psi(x,t) = e^{i(kx-\omega t)}$$

Derivamos em relação a t:

$$\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial e^{i(kx-\omega t)}}{\partial t} = -i\omega e^{i(kx-\omega t)} = -i\frac{E}{\hbar}\Psi$$

Portanto (usando –i = 1/i) temos:

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

A variável dinâmica E é representada pelo operador diferencial:

$$E = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

Esta associação foi obtida no caso particular de uma função de onda senoidal, mas a relação é válida em geral.

O valor esperado da energia é:

Agora podemos calcular o valor esperado do momento:

$$\langle E \rangle = \int_0^\infty \Psi^*(x,t)[E\Psi(x,t)]dx = \int_0^\infty \Psi^*(x,t)\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)\right]dx$$

Valores esperados para a partícula livre

A função de onda de uma partícula livre é:

$$\Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$$

onde A é uma constante.

1) Onde está localizada uma partícula livre?

Para determinar a localização da partícula calculamos a densidade de probabilidade:

$$P(x,t) = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = A^* e^{-i(kx-\omega t)} A e^{i(kx-\omega t)} = A^* A$$

Como P(x, t) = A*A é uma constante para todo x, existe a mesma probabilidade de encontrar a partícula em qualquer lugar do espaço. Em outras palavras, a partículas livre está "**deslocalizada**".

2) Valor esperado do momento:

$$
\begin{aligned}
\langle p \rangle &= \int_0^\infty \Psi^*(x,t)[p\Psi(x,t)]dx = \int_0^\infty \Psi^*(x,t)\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t)\right]dx \\
&= \int_0^\infty A^* e^{-i(kx-\omega t)}\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}Ae^{i(kx-\omega t)}\right]dx \\
&= \int_0^\infty A^* e^{-i(kx-\omega t)}(-i\hbar)(ik)Ae^{i(kx-\omega t)}dx \\
&= \hbar k\int_0^\infty \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx = \hbar k
\end{aligned}
$$

O valor esperado do momento de uma partícula livre é $\hbar$k.

Temos assim, Δx=∞ e Δp=0, em concordância com o princípio de incerteza de Heisenberg.

Valores esperados para a partícula no poço infinito

Encontre os valores de expectação <p> e <p²> para função de onda do estado fundamental de uma partícula em um poço de potencial infinito.

A parte espacial da função de onda de uma partícula no estado fundamental de um poço infinito é:

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi x}{L}$$

No cálculo dos valores de expectação podemos ignorar a parte temporal da função de onda $\phi(t) = \exp(-iEt/\hbar)$ já que se anula ao fazermos $\phi^*\phi$.

Portanto, temos

$$\langle p \rangle = \int_0^L \left(\sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{nx}{L} \right) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{nx}{L} \right) dx$$

$$= \frac{\hbar}{i} \frac{2}{L} \frac{\pi}{L} \int_0^L \sin \frac{\pi x}{L} \cos \frac{\pi x}{L} dx = 0$$

O resultado anterior é fácil de entender. Existe a mesma probabilidade de que a partícula esteja se movimentando para esquerda ou para direita, portanto, o valor de expectação do momento é zero.

Para obter <p²> precisamos aplicar duas vezes o operador $-i\hbar\partial/\partial x$ ou equivalentemente $(\hbar/i)\,\partial/\partial x$:

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi = -\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -\hbar^2\left(-\frac{\pi^2}{L^2}\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{\pi x}{L}\right)$$

$$= +\frac{\hbar^2\pi^2}{L^2}\psi$$

Assim, obtemos:

$$\langle p^2 \rangle = \frac{\hbar^2\pi^2}{L^2}\int_0^L \psi^*\psi\, dx = \frac{\hbar^2\pi^2}{L^2}$$