Mecânica Quântica

Jhordan Silveira de Borba

14 de janeiro de 2025

sbjhordan@gmail.com

Sumário

1 Prefácio

Primeiramente, gostaria de mencionar que terminei minha graduação em Física em 2020 e fiz a disciplina de Mecânica Quântica em 2021. Portanto, já se passaram quase quatro anos desde que estudei o tema de forma mais aprofundada. Na verdade, de 2022 até o momento, cursei apenas uma disciplina de Teoria Eletromagnética, o que me deixou um pouco enferrujado. Este projeto tem como principal objetivo revisar o conteúdo de Mecânica Quântica, para que eu possa, posteriormente, adentrar nas discussões que realmente me interessam. Para isso, inicialmente, estarei utilizando o livro Introduction to Quantum Mechanics, de David J. Griffiths (3ª Edição), a fim de construir uma base sólida de compreensão na área. Em um segundo momento, abordarei o livro The Quantum Challenge, de Greenstein e Zajonc

O livro está dividido em duas partes: a primeira cobre o básico da teoria, enquanto a segunda trata de aplicações que envolvem diversas aproximações. Como minha prioridade é construir uma base sólida, nossa atenção estará voltada para a primeira parte (com exceção do 'afterword', que também será abordado devido ao meu interesse específico, e possivelmente o apêndice que trata da álgebra linear necessária). Quanto aos problemas, seguindo a discussão apresentada no prefácio, focaremos naqueles classificados com uma estrela, ou seja, os considerados 'essenciais', já que nosso objetivo é concentrar-nos explicitamente no que é fundamental.

Além disso, gostaria de traduzir e adaptar dois trechos do prefácio de Griffiths sobre a mecânica quântica:

> Não há um consenso geral sobre quais são seus princípios fundamentais, como ela deve ser ensinada ou o que realmente 'significa'. Todo físico competente pode 'fazer' mecânica quântica, mas as histórias que contamos a nós mesmos sobre o que estamos fazendo são tão variadas quanto os contos de Scheherazade, e quase tão implausíveis quanto... Contudo, existe um consenso de que não é possível discutir de forma inteligente o significado da mecânica quântica sem antes ter uma noção clara do que ela realmente faz.

Como regra geral, minhas anotações de estudo consistem em um resumo da parte conceitual e em uma solução detalhada da parte matemática, sendo recomendadas, portanto, apenas como literatura de apoio. Além disso, algumas ferramentas matemáticas mais avançadas são discutidas conforme sua necessidade. Como é mencionado no próprio prefácio, não queremos que a matemática obscureça a física; ela é, para nós, físicos, apenas uma ferramenta.

2 Conceitos Fundamentais

Ao contrário do que planejo para o resto do livro, esta deve ser a sessão mais longa em termos de discurso, pois por hora, não entraremos em matemática, enquanto para o restante do livro, espero me concentrar particularmente no aspecto matemático, uma vez que assim que o estudante domine a modelagem matemática da teoria, é mais fácil de assimilar os conceitos em qualquer livro de mecânica quântica mais tradicional. Faremos agora toda discussão prévia para preparar a mentalidade do estudante para o que está por vir. Para isso estou basicamente traduzindo o prefácio e introdução das notas do Cresser[1], com pequenas adições.

O mundo das nossas experiências cotidianas — o mundo do não muito grande (comparado a, digamos, uma galáxia) e do não muito pequeno (comparado a algo do tamanho e massa de um átomo) e onde nada se move muito rápido (comparado à velocidade da luz) — é o mundo que é mais diretamente acessível aos nossos sentidos. Este é o mundo geralmente mais do que adequadamente descrito pelas teorias da física clássica que dominaram o século XIX: as leis do movimento de Newton, incluindo sua lei da gravitação, as equações de Maxwell para o campo eletromagnético e as três leis da termodinâmica.

Essas teorias clássicas são caracterizadas, entre outras coisas, pela noção de que existe um mundo "real" lá fora, um que tem uma existência independente de nós mesmos, no qual, por exemplo, os objetos têm uma posição e momento definidos que poderíamos medir em qualquer grau de precisão, limitado apenas pela nossa engenhosidade experimental. De acordo com essa visão, o universo está evoluindo de uma forma completamente determinada por essas leis clássicas, de modo que se fosse possível medir as posições e os momentos de todas as partículas constituintes do universo, e soubéssemos todas as forças que atuavam entre as partículas, então poderíamos, em princípio, prever em qualquer grau de precisão que desejássemos, exatamente como o universo (incluindo nós mesmos) evoluirá. Tudo é predeterminado — não existe livre-arbítrio, não há espaço para o acaso. Qualquer coisa aparentemente aleatória só parece assim por causa da nossa ignorância de todas as informações que precisaríamos ter para poder fazer previsões precisas.

Essa visão foi sacudida no século XX, foi o começo desse século que viu a formulação, não tanto de uma nova teoria física, mas de um novo conjunto de princípios fundamentais que fornece uma estrutura na qual todas as teorias físicas devem se encaixar: a mecânica quântica. Em maior ou menor grau, todos os fenômenos naturais parecem ser governados pelos princípios da mecânica quântica, tanto que essa teoria constitui o que é, sem dúvida, a teoria mais bem-sucedida da física moderna. Uma das consequências cruciais da mecânica quântica foi o crescimento do questionamento sobre os limites do nosso conhecimento. A a mecânica quântica admite, por exemplo, a possibilidade de uma interconexão ou um "emaranhamento" entre sistemas físicos, mesmo aqueles possivelmente separados por grandes distâncias, algo que não tem análogo na física clássica, e que causa estragos em nosso senso comum, criando novos questionamentos que permanecem até então sem respostas.

A mecânica quântica é frequentemente considerada como a física do muito pequeno, como visto através de seus sucessos em descrever a estrutura e as propriedades de átomos e moléculas – as propriedades químicas da matéria – a estrutura dos núcleos atômicos e as propriedades das partículas elementares. Mas isso é verdade apenas na medida

[1] Me refiro ao Quantum Physics Notes, do professor J.D. Cresser (Macquarie University).

em que os efeitos peculiarmente quânticos são mais prontamente observados no nível atômico. Porém, mesmo no mundo cotidiano que normalmente vivenciamos, onde as leis clássicas de Newton e Maxwell parecem ser capazes de explicar tanto, rapidamente se torna aparente que a teoria clássica é incapaz de explicar muitas coisas, por exemplo, por que um sólido é "sólido", ou por que um objeto quente tem a cor que tem.

Mesmo em escalas muito grandes, os efeitos quânticos deixam sua marca de maneiras inesperadas: acredita-se que as galáxias espalhadas pelo universo sejam manifestações macroscópicas de inomogeneidades microscópicas induzidas por efeitos quânticos presentes logo após o nascimento do universo, quando o próprio universo era menor que um núcleo atômico e quase totalmente mecânico quântico. De fato, o casamento da mecânica quântica — a física do muito pequeno — com a relatividade geral — a física do muito grande — é considerado por alguns como o passo crucial na formulação de uma "teoria de tudo" geral que, esperançosamente, conterá todas as leis básicas da natureza em um pacote.

Os sucessos da mecânica quântica foram extraordinários. No entanto, apesar de tudo isso, e apesar do fato de que a teoria tem agora cerca de 100 anos, se a teoria de Planck sobre a radiação do corpo negro for considerada o nascimento da mecânica quântica, é tão verdade agora quanto era antes, que ninguém realmente entende a teoria, embora, recentemente, uma maior consciência tenha se desenvolvido sobre o que a mecânica quântica é: além de ser uma teoria física, também é uma teoria da informação, ou seja, é uma teoria sobre quais informações podemos obter sobre o mundo ao nosso redor — a natureza coloca limitações sobre o que podemos "saber" sobre o mundo físico, mas também nos dá maiores liberdades sobre o que podemos fazer com essas "informações quânticas" (em comparação com o que poderíamos esperar classicamente), conforme percebido pelos desenvolvimentos recentes em computação quântica, teletransporte quântico, criptografia quântica e assim por diante. O fato é que se alguém pretende obter alguma insight sobre a visão moderna do caráter do mundo físico, então algum conhecimento e compreensão da mecânica quântica é essencial.

2.1 A linguagem da mecânica quântica

Como mencionado anteriormente, a mecânica quântica fornece uma estrutura na qual todas as teorias físicas devem se encaixar. Assim, qualquer uma das teorias da física, como a teoria do campo eletromagnético de Maxwell, ou a descrição de Newton das propriedades mecânicas da matéria, ou a teoria relativística geral da gravidade de Einstein, ou qualquer outra teoria concebível, deve ser construída de uma forma que respeite os éditos da mecânica quântica. Esta é claramente uma tarefa muito geral e, como tal, está claro que a mecânica quântica deve se referir a alguma característica comum profundamente fundamental de todas essas teorias.

Essa característica comum é a informação que pode ser conhecida sobre o estado físico de um sistema físico. Claro, as teorias da física clássica são construídas sobre a informação obtida sobre o mundo físico, mas a diferença aqui é que a mecânica quântica fornece um conjunto de regras sobre a informação que pode ser obtida sobre o estado de qualquer sistema físico e como essa informação pode ser processada, que são bem distintas daquelas implícitas na física clássica. Essas regras nos dizem, entre outras coisas, que não é possível ter informações exatas sobre todo o sistema.

Para descrever as propriedades quânticas de qualquer sistema físico, uma nova linguagem matemática é necessária em comparação com a da mecânica clássica. Em seu cerne, a mecânica quântica é um assunto matematicamente abstrato expresso em termos da linguagem de espaços vetoriais lineares complexos — em outras palavras, álgebra linear. Na verdade, foi nessa forma que a mecânica quântica foi primeiramente elaborada, por Werner Heisenberg, na década de 1920, que mostrou como representar as propriedades fisicamente observáveis de sistemas em termos de matrizes. Mas não muito tempo depois, uma segunda versão da mecânica quântica apareceu, devido a Erwin Schrödinger. Em vez de ser expressa em termos de matrizes e vetores, ela foi escrita em termos de ondas propagando-se através do espaço e do tempo (pelo menos para um único sistema de partículas). Essas ondas eram representadas pela chamada função de onda $\Psi(x,t)$ e a equação que determinava a função de onda em qualquer circunstância era conhecida como equação de Schrödinger.

Esta versão da teoria quântica era, e ainda é, chamada de "mecânica ondulatória". É totalmente equivalente à versão de Heisenberg, mas porque é expressa em termos da então mais familiar linguagem matemática de funções e equações de onda, e como era geralmente muito mais fácil resolver a equação de Schrödinger do que trabalhar com (e entender) a versão de Heisenberg, ela rapidamente se tornou "o jeito" de fazer mecânica quântica, e permaneceu assim durante a maior parte do resto do século XX, assim como ainda é frequentemente a primeira formulação da mecânica quântica vista nos cursos superiores.

Sua aplicação mais usual é descrever a estrutura da matéria no nível atômico onde as posições das partículas são importantes, mas a mecânica quântica é muito mais do que a mecânica da função de onda, e sua aplicabilidade vai muito além da teoria atômica, molecular ou do estado sólido. Há uma teoria subjacente, mais geral, da qual a mecânica das ondas é apenas uma manifestação ou representação matemática. Em um sentido, a mecânica ondulatória está a um passo mais distante dessa teoria mais profunda, pois esta destaca a interpretação informacional da mecânica quântica. A linguagem dessa teoria mais geral é a linguagem dos espaços vetoriais. À medida que o assunto amadureceu nas últimas décadas do século XX e no século XXI, e com o desenvolvimento da interpretação da "informação quântica" da mecânica quântica, mais e mais a tendência é se afastar da mecânica das ondas para a versão mais abstrata da álgebra linear , principalmente expressa na notação devida a Dirac.

2.2 A descrição do mundo físico

Existem três teorias fundamentais sobre as quais a física moderna é construída: a teoria da relatividade, mecânica estatística/termodinâmica e mecânica quântica. Cada uma delas nos forçou a necessidade de considerar a possibilidade de que o caráter do mundo físico, como o percebemos e o entendemos no dia a dia, pode ser muito diferente do que tomamos como certo.

A teoria da relatividade especial, pelo simples fato de que nada pode ser observado viajando mais rápido que a velocidade da luz, nos forçou a reconsiderar a natureza do espaço e do tempo. A mecânica estatística/termodinâmica nos dá o conceito de entropia e a segunda lei: a entropia de um sistema fechado nunca pode diminuir. Introduzida pela primeira vez na termodinâmica, ela ajuda, entre outras coisas, para entender a 'direção no tempo' em que os processos naturais acontecem. E o que é entropia? A mecânica estatística nos disse que essa quantidade, entropia, não é uma substância em nenhum sentido. Em vez disso, é uma medida do grau de desordem que um sistema físico pode possuir, e que a direção natural na qual os sistemas evoluem é na direção tal que, no geral, a entropia nunca diminui. Então o que a mecânica quântica faz por nós? Que visão preciosa do mundo é virada de cabeça para baixo pelos decretos desta teoria? Parece que a mecânica quântica nos entrega uma visão de mundo na qual:

- Há uma perda de certeza – uma aleatoriedade aparentemente inevitável e irremovível permeia o mundo físico. Parece até que o próprio processo de fazer uma observação pode afetar o sujeito dessa observação de uma forma incontrolavelmente aleatória (mesmo que nenhum contato físico seja feito com o objeto sob observação!).

- Os sistemas físicos parecem se comportar como se estivessem fazendo uma série de coisas mutuamente exclusivas simultaneamente. Por exemplo, um elétron disparado contra uma parede com dois buracos pode parecer se comportar como se passasse por ambos os buracos simultaneamente.

- Sistemas físicos amplamente separados podem se comportar como se estivessem emaranhados pelo que ficou conhecido como 'ação fantasmagórica à distância', de modo que eles são correlacionados de maneiras que parecem desafiar as leis da probabilidade ou as regras da relatividade especial.

Os três pontos acima são todos claramente desafiadores da nossa visão clássica do mundo, baseada nas teorias da física clássica, que andam de mãos dadas com uma visão particular do mundo, às vezes chamada de realismo objetivo. Aqui, na fronteira do conhecimento, é onde a comunidade científica diverge e eu sou obrigado a comentar a existência de uma certa má-fé em parte da comunidade. Eu nunca poderia negar que a mecânica quântica desafia nossa visão clássica do mundo, ela desafia diretamente o nosso senso comum, mas não há certeza sobre qual é a melhor interpretação dos resultados que a quântica nos apresenta. Apesar disso, frequentemente os pesquisadores apresentam sua interpretação como se fosse a única interpretação cientificamente plausível e fosse não apenas uma hipótese, mas já um fato comprovado e aceito pela comunidade científica em consenso, do qual se você discorda, você é um ignorante. Uma possível interpretação de onde nosso senso comum falha, e talvez a mais difundida hoje em dia, é exatamente sobre a existência de uma realidade objetiva, porém esta é apenas uma maneira de interpretar é uma maneira do qual eu discordo. Mas para discutirmos melhor sobre isso, é necessário que primeiro aprendamos mecânica quântica.

Por hora, é suficiente sabermos que é necessário desconfiar de discursos prontos que buscam apresentar interpretações fantásticas como fatos indiscutíveis e 'comprovados pela quântica', mesmo quando dado por membros da comunidade científica.

2.2.1 A física clássica

Antes de olharmos para o que a mecânica quântica tem a dizer sobre como devemos entender o mundo natural, é útil dar uma olhada na perspectiva da física clássica sobre isso. De acordo com a física clássica, pela qual queremos dizer física pré-quântica, é essencialmente dado como certo que existe um 'mundo objetivamente real' lá fora, um cujas propriedades, e cuja própria existência, é totalmente indiferente a se existimos ou não. Essas ideias da física clássica não estão vinculadas a nenhuma pessoa e refletem uma compreensão intuitiva da realidade, pelo menos no mundo ocidental. Essa visão da física clássica pode ser chamada de 'realidade objetiva'.

Dentro dessa visão da realidade, podemos falar sobre uma partícula se movendo pelo espaço, como uma bola de tênis

voando pelo ar, como se ela tivesse, a qualquer momento, uma posição e velocidade definidas. Além disso, ela teria essa posição e velocidade definidas, quer houvesse ou não alguém ou algo monitorando seu comportamento. Afinal, essas são propriedades da bola de tênis, não algo atribuível aos nossos esforços de medição. Bem, essa é a maneira clássica de ver as coisas. Cabe a nós decidir se queremos ou não medir essa posição e velocidade pré-existentes. Ambas têm valores definidos em qualquer instante de tempo, mas é totalmente uma função da nossa engenhosidade experimental se podemos ou não medir esses valores, e o nível de precisão com que podemos medi-los. Há uma crença implícita de que, ao refinar nossos experimentos — por exemplo, medindo até a 100ª casa decimal, depois a 1000ª, depois a 10000ª — estamos chegando cada vez mais perto dos valores da posição e velocidade que a partícula 'realmente' tem. Não há lei da física, pelo menos de acordo com a física clássica, que diga que definitivamente não podemos determinar esses valores para tantas casas decimais quanto desejamos – a única limitação é, mais uma vez, nossa engenhosidade experimental. Também podemos, em princípio, calcular, com precisão ilimitada, o comportamento futuro de qualquer sistema físico resolvendo as equações de Newton, as equações de Maxwell e assim por diante. Na prática, há limites para a precisão da medição e/ou cálculo, mas em princípio não há tais limites.

Claro, reconhecemos, para um objeto macroscópico, que não podemos esperar medir todas as posições e velocidades de todas as partículas que compõem tal objeto. No caso de um litro de ar em uma garrafa em temperatura ambiente, há algo como 10^{26} partículas zunindo na garrafa, colidindo umas com as outras e com as paredes da garrafa. Não há como medir a posição e as velocidades de cada uma dessas partículas de gás em algum instante no tempo. Mas isso não nos impede de acreditar que cada partícula de fato possui uma posição e velocidade definidas em cada instante. Apenas acontece que é muito difícil obter a informação. De acordo com a física clássica, a informação está 'realmente lá' – nós simplesmente não conseguimos obtê-la.

O comportamento aleatório só parece aleatório porque não temos informações suficientes para descrevê-lo exatamente. Ele não é realmente aleatório pois acreditamos que se pudéssemos repetir um experimento sob condições exatamente idênticas, deveríamos obter o mesmo resultado todas as vezes, e, portanto, o resultado do experimento seria perfeitamente previsível. Compensamos a nossa incapacidade técnica de realizar estas medidas usando métodos estatísticos para calcular, por exemplo, as chances das partículas de gás se comportarem de várias maneiras possíveis. Por exemplo, é possível mostrar que as chances de todas as partículas de gás correrem espontaneamente para uma extremidade da garrafa é algo como 1 em 10^{10^6} – assustadoramente improvável.

O uso de métodos estatísticos para lidar com uma situação envolvendo ignorância de informações completas é uma reminiscência do que um apostador apostando em uma corrida de cavalos tem que fazer. Na ausência de informações completas sobre cada um dos cavalos na corrida, o estado de espírito dos jóqueis, o estado da pista, o que o clima fará na próxima meia hora e qualquer uma de uma miríade de outras possíveis influências no resultado da corrida, o melhor que qualquer apostador pode fazer é atribuir probabilidades para cada cavalo ganhar de acordo com as informações disponíveis e apostar de acordo. Se, por outro lado, o apostador soubesse de tudo de antemão, o resultado da corrida seria totalmente predeterminada na mente do apostador, então ele poderia fazer uma aposta que tivesse garantia de vitória.

De acordo com a física clássica, a situação é a mesma quando se trata, por exemplo, da evolução de todo o universo. Se soubéssemos em algum instante todas as posições e todas as velocidades de todas as partículas que compõem o universo, e todas as forças que podem atuar entre essas partículas, então deveríamos ser capazes de calcular toda a história futura do universo. Mesmo que não possamos realizar tal cálculo, o simples fato de que, em princípio, isso poderia ser feito, nos diz que o futuro do universo já está ordenado.

Essa perspectiva foi proposta pela primeira vez pelo físico matemático Pierre-Simon Laplace (1749-1827) e é, portanto, conhecida como determinismo laplaciano e, em algum sentido, representa a visão clássica do mundo levada aos seus limites mais extremos. Portanto, não existe tal coisa, na física clássica, como aleatoriedade verdadeira. Qualquer incerteza que vivenciamos é puramente uma consequência da nossa ignorância – as coisas só parecem aleatórias porque não temos informações suficientes para fazer previsões precisas. No entanto, nos bastidores, tudo está evoluindo de uma maneira inteiramente pré-ordenada – tudo é determinístico, não existe tal coisa como tomar uma decisão, o livre-arbítrio é meramente uma ilusão!!!

2.2.2 A física quântica

A visão de mundo clássica funciona bem no nível cotidiano (macroscópico) – grande parte da engenharia moderna depende disso – mas há coisas no nível macroscópico que não podem ser entendidas usando a física clássica, incluindo a cor de um objeto aquecido, a existência de objetos sólidos . . . . Então, onde a física clássica falha?

O comportamento não clássico é mais prontamente observado para sistemas microscópicos – átomos e moléculas, mas está de fato presente em todas as escalas. O tipo de comportamento exibido por sistemas microscópicos que são indicadores de uma falha da física clássica são:

- Aleatoriedade intrínseca
- Fenômenos de interferência (por exemplo, partículas agindo como ondas)
- Emaranhamento

Aleatoriedade Intrínseca: É impossível preparar qualquer sistema físico de tal forma que todos os seus atributos físicos sejam precisamente especificados ao mesmo tempo – por exemplo, não podemos fixar tanto a posição quanto o momento de uma partícula ao mesmo tempo. Se prendermos uma partícula em uma caixa minúscula, dando-nos assim uma ideia precisa de sua posição, e então medirmos sua velocidade, descobrimos, após muitas repetições do experimento, que a velocidade da partícula sempre varia de forma aleatória de uma medição para a próxima. Por exemplo, para um elétron preso em uma caixa de 1 mícron de tamanho, a velocidade do elétron pode ser medida para variar em pelo menos $\pm 50ms^{-1}$.

O refinamento do experimento não pode resultar na redução dessa aleatoriedade — ela nunca pode ser removida, e tornar a caixa ainda menor só piora a situação. De forma mais genérica, descobre-se que para qualquer experimento repetido sob condições exatamente idênticas sempre haverá alguma quantidade física, alguma propriedade física dos sistemas que compõem o experimento, que, quando medida, sempre produzirá resultados aleatoriamente variáveisde uma execução do experimento para a próxima. Isso não é porque fazemos um trabalho ruim ao configurar o experimento ou realizar a medição. A aleatoriedade é irredutível: ela não pode ser totalmente removida por melhorias na técnica experimental.

O que isso está essencialmente nos dizendo é que a natureza coloca limites em quanta informação podemos reunir sobre qualquer sistema físico. Aparentemente não podemos saber com precisão tanto sobre um sistema como pensávamos que poderíamos de acordo com a física clássica. Isso nos leva a questionar se essa informação ausente ainda está lá, mas meramente inacessível para nós por algum motivo. Por exemplo, uma partícula cuja posição é conhecida também tem um momento preciso (ou velocidade), mas nós simplesmente não podemos medir seu valor? Essa é uma questão em aberta. Muitos físicos têm a tendência de responder que esta informação não está lá em primeiro lugar, interpretando então a aleatoriedade não como um reflexo de nossa ignorância de algumas informações, mas um comportamento aleatório "sem causa". Como mencionado anteriormente, este é um dos pontos que não há de fato ainda nenhuma interpretação que possamos bater o martelo, ainda que esteja seja uma possibilidade plausível de acordo com os resultados experimentais, também é plausível que de fato, a natureza probabilística da mecânica quântica seja uma medida da nossa ignorância. Há teorias da mecânica quântica que trabalham sob esta ideia.[2]

[2]Exemplo: teoria das variáveis ocultas não-locais

Interferência: Sistemas físicos microscópicos podem se comportar como se estivessem fazendo coisas mutuamente exclusivas ao mesmo tempo. O exemplo mais conhecido disso é o famoso experimento das dupla fendas, no qual elétrons são disparados, um de cada vez, em uma tela na qual há duas fendas estreitas. Os elétrons são observados atingindo uma tela de observação colocada além da tela com as fendas. O que se espera é que os elétrons atinjam essa segunda tela em regiões imediatamente opostas às duas fendas. O que se observa é que os elétrons que chegam a essa tela de observação tendem a chegar em locais preferidos que apresentam todas as características de um padrão de interferência semelhante a uma onda, ou seja, o padrão formado é o que seria observado se fossem ondas (por exemplo, ondas de luz) sendo direcionadas para as fendas.

A natureza detalhada do padrão de interferência é determinada pela separação das fendas: aumentar essa separação produz um padrão de interferência mais fino. Isso parece sugerir que um elétron, que, sendo uma partícula, só pode passar por uma fenda ou outra, de alguma forma tem "conhecimento" da posição da outra fenda. Se não tivesse essa informação, então é difícil ver como o elétron poderia chegar na tela de observação de tal maneira a produzir um padrão cujas características são diretamente determinadas pela separação da fenda! E ainda, se a fenda pela qual cada elétron passa for observada de alguma forma, o padrão de interferência desaparece – os elétrons atingem a tela em posições diretamente opostas às fendas! A conclusão desconfortável que nos é imposta é que se o caminho do elétron não for observado, então, em algum sentido, ele passa por ambas as fendas assim como as ondas, e finalmente cai na tela de observação de tal forma a produzir um padrão de interferência, mais uma vez, assim como as ondas. Aqui vale ressaltar que por observação, estamos falando do processo físico de observar um sistema, isto é, a realização de alguma medição, não necessariamente o processo humano de assistir conscientemente o fenômeno.

Essa propensão do sistema quântico se comportar como se pudesse estar em dois lugares ao mesmo tempo, ou mais geralmente em estados diferentes ao mesmo tempo, é denominada "superposição de estados" e é uma propriedade singular dos sistemas quânticos que leva à formulação de uma descrição matemática baseada nas ideias de espaços vetoriais.

Emaranhamento Suponha que, por razões que só você conhece, enquanto está sentado em um quarto de hotel em Sydney olhando para um par de sapatos que você realmente se arrepende de ter comprado, você decide enviar um par para um amigo em Brisbane, e o outro para um amigo em Melbourne, sem observar qual sapato foi para onde. Não seria uma surpresa ouvir que se o amigo em Melbourne descobrisse que o sapato que recebeu era um sapato esquerdo, então o sapato que chegou a Brisbane era um sapato direito, e vice-versa.

Se esse estranho hábito de dividir pares de sapatos perfeitamente bons e enviar um aleatoriamente para Brisbane e o outro para Melbourne fosse repetido muitas vezes, então, embora não seja possível prever com certeza o que o amigo em, digamos, Brisbane, observará ao receber um sapato, é, no entanto esperado observar o fato de que os resultados observados em Brisbane e Melbourne foram sempre perfeitamente correlacionados - um sapato esquerdo pareado com um sapato direito.

Experimentos semelhantes podem ser realizados com partículas atômicas, embora sejam os spins de pares de partículas que são pareados: cada um possui um spin oposto ao outro. As medições são então feitas do spin de cada partícula quando ela chega em Brisbane ou em Melbourne. Aqui a medição não é tão simples quanto o exemplo simples de sapato esquerdo ou direito, mas a ideia é, no entanto, medir as correlações entre os spins das partículas. Como foi mostrado por John Bell, é possível que as partículas com spin sejam preparadas em estados para os quais a correlação entre esses valores de spin medidos é maior do que o que a física clássica permite.

Os sistemas estão em um "estado emaranhado", um estado quântico que não tem análogo clássico. Esta é uma conclusão que é experimentalmente testável por meio das desigualdades de Bell e foi esmagadoramente confirmada. Entre outras coisas, parece sugerir que o nosso senso comum falha quando estamos lidando com a mecânica quântica. Apesar das interpretações mais otimistas de que este experimento demonstra isso ou aquilo especificamente, o que somos de fato obrigados a admitir é que a natureza é mais complicada do que os físicos pensavam há mais de um século atrás. Existe uma tendência de argumentar que esse resultado nos força a concluir que os sistemas físicos adquirem propriedades apenas por meio do ato de observação, por exemplo, uma partícula não tem 'realmente' uma posição específica até que seja medida, mas essa é apenas uma das possíveis interpretações

John Bell propôs a existência de variáveis ocultas, ou seja, grandezas que, se conhecidas, permitiriam prever com certeza os resultados de qualquer medida em mecânica quântica. Essa suposição é associada ao conceito de determinismo. Além disso, Bell formulou outra hipótese fundamental: que o resultado da medida em um sistema não pode influenciar instantaneamente o resultado de medidas em outro sistema espacialmente separado. Essa segunda hipótese é conhecida como localidade. Ambas as suposições refletem intuições oriundas da mecânica clássica.[3] Resultados experimentais indicaram que ao menos uma dessas hipóteses está errada: ou a natureza é não determinística, ou é não local. Isso significa que o senso comum inspirado pela mecânica clássica falha em descrever a realidade quântica. Contudo, com o nível de desenvolvimento científico atual, ainda não é possível afirmar categoricamente qual das duas suposições deve ser descartada.

Bell, em seus trabalhos, mostrou preferência por preservar o determinismo, mesmo à custa da localidade. Seus esforços deram origem a uma interpretação alternativa da mecânica quântica, conhecida como a teoria de de Broglie-Bohm, que é determinística, mas intrinsecamente não local. É importante destacar que o indeterminismo, conforme definido por Bell, não implica necessariamente a existência do livre-arbítrio. Algo genuinamente aleatório não oferece liberdade de escolha; ele simplesmente reflete a ausência de uma previsão determinística.

Acredita-se que os "comportamentos quânticos" vistos nos três casos discutidos acima sejam comuns a todos os sistemas físicos. Então, o que é mecânica quântica? Ela

[3]Uma aula interessante sobre esse tema, voltada para o nível de graduação, pode ser encontrada na aula 25 do professor Jonas Maziero (Universidade Federal de Santa Maria): Emaranhamento.

está dizendo algo sobre todos os sistemas físicos. A mecânica quântica não é uma teoria física específica para uma gama limitada de sistemas físicos, ou seja, não é uma teoria que se aplica apenas a átomos e moléculas e similares. É uma metateoria. Em seu cerne, a mecânica quântica é um conjunto de princípios fundamentais que restringem a forma das próprias teorias físicas, seja uma teoria descrevendo as propriedades mecânicas da matéria conforme dadas pelas leis do movimento de Newton, ou descrevendo as propriedades do campo eletromagnético, conforme contidas nas equações de Maxwell ou qualquer outra teoria concebível.

Outro exemplo de metateoria é a relatividade — tanto especial quanto geral — que coloca condições estritas nas propriedades do espaço e do tempo. Em outras palavras, espaço e tempo devem ser tratados em todas as teorias físicas (fundamentais) de uma forma que seja consistente com os éditos da relatividade. A que aspecto de todas as teorias físicas os princípios da mecânica quântica se aplicam? Os princípios devem se aplicar a teorias tão diversas quanto as Leis de Newton descrevendo as propriedades mecânicas da matéria, as equações de Maxwell descrevendo o campo eletromagnético, as leis da termodinâmica – qual é a característica comum? A resposta está em observar como uma teoria em física é formulada.

2.3 Observação, informação e teorias da física

As teorias físicas modernas não são alcançadas pelo pensamento puro. A característica comum de todas as teorias físicas é que elas lidam com as informações que podemos obter sobre sistemas físicos por meio de experimentos ou observação. Por exemplo, as equações de Maxwell para o campo eletromagnético são pouco mais do que um resumo sucinto das propriedades observadas de campos elétricos e magnéticos e quaisquer cargas e correntes associadas. Essas equações foram abstraídas dos resultados de inúmeros experimentos realizados ao longo dos séculos, juntamente com alguma interpolação inteligente por parte de Maxwell. Comentários semelhantes poderiam ser feitos sobre as leis do movimento de Newton ou termodinâmica. Os dados são coletados, seja por observação casual ou experimento controlado, por exemplo, no movimento de objetos físicos, ou na temperatura, pressão, volume de sólidos, líquidos ou gases e assim por diante. Dentro desses dados, são observadas regularidades que são melhor resumidas como equações:

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{F} &= m\boldsymbol{a} && -\text{Segunda lei de Newton;} \\
\nabla \times \boldsymbol{E} &= -\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} && -\text{Lei de Faraday (uma das equações de Maxwell);} \\
PV &= NkT && -\text{Lei dos gases ideais (não é realmente uma lei fundamental)}
\end{aligned}$$

O que essas equações representam são relações entre informações obtidas pela observação de vários sistemas físicos e, como tal, são uma maneira sucinta de resumir a relação entre os dados, ou as informações, coletadas sobre um sistema físico. As leis são expressas de uma maneira consistente com a forma como entendemos o mundo do ponto de vista da física clássica, em que os símbolos substituem precisamente valores conhecidos ou conhecíveis das quantidades físicas que representam.

Não há incerteza ou aleatoriedade como consequência de nossa ignorância de informações sobre um sistema implícito em qualquer uma dessas equações. Além disso, a física clássica diz que essas informações são uma representação fiel do que está 'realmente' acontecendo no mundo físico. Essas podem ser chamadas de as 'leis clássicas da informação' implícitas na física clássica

O que esses experimentadores pré-quânticos não sabiam era que as informações que eles estavam coletando não eram refinadas o suficiente para mostrar que havia limitações fundamentais na precisão com a qual eles podiam medir propriedades físicas. Havia algumas informações que eles poderiam ter tomado como certas de serem acessíveis, simplesmente tentando bastante, mas que nós agora sabemos que não poderiam ter sido obtidas de forma alguma! Havia em operação leis insuspeitas da natureza que colocavam restrições nas informações que poderiam ser obtidas sobre qualquer sistema físico.

Na ausência dos dados de qualquer evidência dessas leis da natureza, as informações que foram coletadas foram finalmente organizadas em declarações matemáticas que constituíam leis clássicas da física: as equações de Maxwell ou as leis do movimento de Newton. Mas no final do século XIX e no século XX, evidências experimentais começaram a se acumular sugerindo que havia algo seriamente errado com as leis clássicas da física: os dados não podiam mais ser ajustados às equações ou, em outras palavras, a teoria não conseguia explicar os resultados experimentais observados.

A escolha era clara: ou modificar as teorias existentes, ou formular novas. Foi a última abordagem que deu certo. No final das contas, o que foi formulado foi um novo conjunto de leis da natureza, as leis da mecânica quântica, que eram essencialmente um conjunto de leis relativas às informações que poderiam ser obtidas sobre o mundo físico.

Essas não são as mesmas leis implícitas na física clássica. Por exemplo, há limites para as informações que podem ser obtidas sobre um sistema físico. Se em um experimento medirmos a posição x de uma partícula com uma acurácia[4] de Δx, e então medirmos o momento p da partícula, descobriremos que o resultado para p varia aleatoriamente de uma execução do experimento para a próxima, espalhada por um intervalo Δp. Mas ainda há lei aqui. A mecânica quântica nos diz que

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2}\hbar \quad - \quad \text{Relação de incerteza de Heisenberg}$$

A mecânica quântica também nos diz como essa informação é processada, por exemplo, como um sistema evolui no tempo (a equação de Schrödinger) ou quais resultados

[4] A acurácia indica a proximidade do valor real, a precisão diz respeito à repetibilidade da medição, ou seja algo com maior acurácia é algo mais próximo do valor real, algo com maior precisão é algo que apresenta resultados mais próximos ao longo de várias medições.

podem ser obtidos em uma medição. A mecânica quântica é uma teoria da informação, teoria da informação quântica.

Quais são as consequências? Primeiro, temos uma nova disputa teórica dentro da física, quando chegamos a pensar que não haveria muito mais o que ser descoberto. Essas leis quânticas também significam que os sistemas físicos podem fazer muito mais dentro dessas restrições. Uma partícula com posição e momento incerto por quantidades Δx e Δp significa que não sabemos bem onde ela está, ou quão rápido ela está indo, e nunca podemos saber disso. Mas a partícula pode estar fazendo muito mais coisas "nos bastidores" em comparação com uma partícula clássica de posição e momento precisamente definidos. O resultado é uma física infinitamente mais rica, assim como novos debates sobre como devemos interpretar o mundo físico no qual estamos inseridos, e até mesmo quem sabe, o surgimento futuro de uma física ainda mais completa e fundamental.

Parte I
Teoria

3 A função de onda

3.1 Equação de Schrodinger

A equação de Schroedinger tem um papel análogo na mecânica quântica a segunda Lei de Newton na mecânica clássica[5]:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi \tag{1}$$

Onde $\hbar$ é a constante de Planck dividido por 2π. Ou seja, se temos uma partícula de massa m se movendo em um eixo x e queremos obter informações sobre a partícula em qualquer instante $x(t)$, a partir de uma condição inicial adequada (tipicamente $\Psi(x,0)$), a equação 1 determina a função de onda $\Psi(x,t)$ em todo tempo futuro, análogo a como a segunda lei de Newton determina $x(t)$ para todo futuro.

3.2 A interpretação estatística

A interpretação estatística de Born nos dá a probabilidade de encontrar uma partícula entre a e b no instante t:

$$P = \int_a^b |\Psi(x,t)|^2\, dx$$

[5]E na mecânica clássica quando partimos da segunda Lei de Newton, a discussão da sua origem, erros e acertos que fizemos até chegarmos nela fica de fora, então vou deixar de fora aqui também.

Tudo que a mecânica quântica consegue nos oferecer é uma informação estatística sobre possíveis resultados. Podemos adiantar uma questão de natura filosófica aqui: vamos supor que realizamos uma medida e encontramos a partícula em um dado ponto c. A partícula estava lá antes da medida? Temos três respostas:

- **Realista**: a partícula estava. Neste caso a mecânica quântica é uma teoria incompleta, e a indeterminação não é um fato da natureza, mas um reflexo da nossa ignorância, então é necessário a existência de alguma informação extra (uma variável oculta) para ter uma descrição completa da partícula.

- **Ortodoxo**: a partícula não estava realimente em lugar nenhum. Neste caso a medição forçou a partícula a estar em uma posição, então as observações não apenas afetam a medição, mas as produzem. Essa é a interpretação de Copenhagen.

- **Agnóstico**: se recusa a responder. Afinal se só podemos saber algo após a medição, se perguntar sobre algo antes da medição é um problema irrelevante que não pode ser respondido. Por décadas essa foi a fuga dos ortodoxos quando pressionados.

Porém, após alguns experimentos de John Bell que veremos adiante, o agnosticismo precisou ser abandonado, e hoje existe a disputa entre o realismo e a ortodoxia. E também podemos ver que existe um viés que busca afirmar que a ortodoxia foi 'comprovada', o que é exagero e idealismo. Foi comprovado que a realidade não obedece o senso comum, mas que ele é violado da forma que a ortodoxia afirma, é uma escolha de interpretação dentre outras possíveis, que inclusive, podem preservar o determinismo. Se esta definição de realismo é suficiente para estas outras posições igualmente válidas diante da evidências que temos ou precisa ser ajustada, é outra discussão, mas isso será retomado mais tarde.

Experimenta de dupla-fenda:Inicialmente, eu pretendia abordar apenas discussões matemáticas, mas preciso fazer um comentário importante. Quando uma onda passa por duas fendas, cada fenda gera uma nova frente de onda, e essas frentes interferem entre si, criando um padrão de interferência. O resultado curioso ocorre quando reduzimos o feixe de elétrons para disparar um único elétron por vez.

O elétron, como uma onda-partícula, atravessa as duas fendas ao mesmo tempo, como uma onda, criando interferência consigo mesmo. Quando o elétron atinge o detector, ele se comporta como uma partícula e deixa uma marca única. O interessante é que, mesmo disparando um único elétron por vez, se fizermos muitas medições, a distribuição dos pontos de impacto no detector forma um padrão de interferência, como se estivesse se comportando como uma onda. Isso mostra que o comportamento do elétron é governado por uma função de onda probabilística, e a interferência reflete a probabilidade de onde o elétron será detectado.

Aqui, podemos ter uma situação semelhante à discussão anterior. A física descreve a natureza, enquanto a interpretação desses fenômenos é, essencialmente, uma questão filosófica. Quando uma onda clássica passa por duas fendas, interpretamos que ela gera duas novas frentes de onda, que interferem entre si, criando um padrão de interferência. Mas como interpretar esse fenômeno quando a 'onda' é um elétron?

A função de onda descreve a distribuição de probabilidade das posições que o elétron pode assumir e é chamada assim porque sua evolução matemática segue as mesmas regras de uma onda. No experimento da dupla fenda, ao atravessar as fendas, a função de onda do elétron interfere consigo mesma, gerando um padrão de interferência que reflete uma nova distribuição de probabilidades para a posição do elétron.

Aqui, as interpretações quânticas divergem. Uma visão é que a função de onda reflete apenas nossa ignorância: o elétron já estaria em uma posição definida, mas não podemos conhecê-la até realizar a medição. Outra interpretação, no entanto, sugere que o elétron realmente está em múltiplas posições ao mesmo tempo antes da medição, como se existissem "réplicas" do elétron espalhadas pela distribuição de probabilidade. Segundo essa interpretação, a função de onda descreve não apenas a probabilidade de onde o elétron será detectado, mas onde ele está fisicamente antes de ser medido.

Quando realizamos a medição, a função de onda "colapsa", e o elétron é detectado em uma posição específica. Essa mudança abrupta levanta questões fundamentais: o que significa esse colapso? Como e por que o elétron "escolhe" uma posição? Ainda não temos respostas definitivas para essas perguntas, e elas dependem da interpretação adotada. A ideia de onda-partícula é, portanto, um conceito intrinsecamente quântico que desafia nossa intuição clássica. Embora a física forneça descrições matemáticas precisas da evolução das probabilidades, a questão sobre a natureza da função de onda – se é uma ferramenta matemática ou uma entidade física real – permanece um dos grandes mistérios da ciência.

Outra observação importante é que, devido à natureza probabilística da mecânica quântica, a validação de suas previsões requer a realização de um grande número de repetições do experimento. Isso ocorre porque as previsões quânticas não se referem ao comportamento de partículas individuais, mas sim às distribuições estatísticas de resultados quando o experimento é repetido muitas vezes.

3.3 Normalização

Como a partícula deve estar em algum lugar, então:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 \, dx = 1 \tag{2}$$

Retornando a equação de Schroedinger, se Ψ é uma solução, então A é uma solução, então podemos usar A para garantir que 2 seja respeitada, através do que chamamos de normalização. Se a solução é infinita ou zero, então é não normalizável, mas isso não representa nenhum estado físico possível então deve ser rejeitado. Vale destacar que q equação de Schoredinger preserva a normalização.

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

Fizemos a mudança $\frac{d}{dt} \rightarrow \frac{\partial}{\partial t}$ pois o resultado da integral depende apenas de t, mas a função sendo integrada depende também de x. E:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left|\Psi\right|^2 = \frac{\partial}{\partial t}\left|\Psi\right|^2 = \frac{\partial}{\partial t}\left(\sqrt{\Psi^*\Psi}\right)^2 = \frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi^*\Psi\right) = \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi$$

A equação de Schroedinger é:

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

E tomando o complexo conjugado:

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

Então:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\left|\Psi\right|^2 &= \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi \\
&= \Psi^*\left(\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar}V\Psi\right) + \left(-\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar}V\Psi^*\right)\Psi \\
&= \Psi^*\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\Psi \\
&= \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\Psi\right)
\end{aligned}$$

Então:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\Psi\left(x,t\right)\right|^2 dx &= \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial}{\partial t}\left|\Psi\left(x,t\right)\right|^2 dx \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\Psi\right)dx \\
&= \frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\Psi\right)dx
\end{aligned}$$

Olhando o primeiro termo, vamos aplicar integral por partes (prova):

$$\int_a^b f\left(x\right)g'\left(x\right)dx = f\left(x\right)g\left(x\right)\Big|_a^b - \int_a^b g\left(x\right)f'\left(x\right)dx$$

Onde também temos que $u = f\left(x\right)$ e $dv = f'\left(x\right)dx$. Então sendo $f = \Psi^*$ e $g = \Psi'$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi\left(x,t\right)^*\frac{\partial^2\Psi\left(x,t\right)}{\partial x^2}dx = \Psi^*\Psi'\Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi'\Psi^{*\prime}dx$$

De modo análogo temos pra segunda integral $f = \Psi$ e $g = \Psi^{*\prime}$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} dx = \Psi \Psi^{*\prime}\Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^{*\prime} \Psi^{\prime} dx$$

Então:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} \left|\Psi\left(x,t\right)\right|^2 dx &= \frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \Psi\right) dx \\
&= \frac{i\hbar}{2m} \left[\Psi^* \Psi^{\prime}\Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^{\prime} \Psi^{*\prime} dx - \Psi \Psi^{*\prime}\Big|_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^{*\prime} \Psi^{\prime} dx\right] \\
&= \frac{i\hbar}{2m} \left[\Psi^* \Psi^{\prime}\Big|_{-\infty}^{+\infty} - \Psi \Psi^{*\prime}\Big|_{-\infty}^{+\infty}\right] \\
&= \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \Psi^{\prime} - \Psi \Psi^{*\prime}\right)\Big|_{-\infty}^{+\infty}
\end{aligned}$$

Mas para ser um resultado válido na física a função de onda e as derivadas devem ir a zero no infinito[6], então:

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} \left|\Psi\left(x,t\right)\right|^2 dx = 0$$

Ou seja, como como o resultado da integral é constante, se a função está normalizada no instante $t = 0$, permanecerá normalizada. Aqui vamos resolver nosso primeiro problema (pulamos problemas de matemática pura). Temos a função de onda:

$$\Psi\left(x,t\right) = Ae^{-\lambda|x|} e^{-i\omega t}$$

Onde A, λ e ω são constantes reais e positivas. Sendo x um número real então:

[6]Existem construções matemáticas de funções de onda que podem ser normalizadas e não tendem exatamente a zero no infinito. Contudo, segundo Griffiths, tais funções não aparecem na física, pois a função de onda física deve refletir a probabilidade de encontrar uma partícula em algum lugar do espaço finito, enquanto funções não decrescentes no infinito não correspondem a estados físicos observáveis.

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 \, dx &= 1 \\
\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi\Psi^* dx &= \\
\int_{-\infty}^{+\infty} \left(Ae^{-\lambda|x|}e^{-i\omega t}\right)\left(Ae^{-\lambda|x|}e^{i\omega t}\right) dx &= \\
A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\lambda 2|x|} dx &= \\
A^2 \left(\int_{-\infty}^{0} e^{-\lambda 2(-x)} dx + \int_{0}^{+\infty} e^{-\lambda 2x} dx\right) &= \\
A^2 \left(\frac{1}{2\lambda}\int_{-\infty}^{0} e^{u} du + \frac{1}{-2\lambda}\int_{0}^{+\infty} e^{v} dv\right) &=
\end{aligned}
$$

Chamo atenção para a 5ª linha onde dividimos a integral para respeitar o módulo, usando a propriedade de aditividade da integral[7]. Onde no primeiro caso temos $u = 2\lambda x$ e no segundo caso $v = -2\lambda x$

$$
\begin{aligned}
A^2 \left(\frac{1}{2\lambda}\, e^{2\lambda x}\Big|_{-\infty}^{0} + \frac{1}{-2\lambda}\, e^{-2\lambda x}\Big|_{0}^{+\infty}\right) &= 1 \\
A^2 \left(\frac{\left(e^0 - \frac{1}{e^\infty}\right)}{2\lambda} + \frac{\left(\frac{1}{e^\infty} - e^0\right)}{-2\lambda}\right) &= \\
A^2 \left(\frac{1}{2\lambda} + \frac{1}{2\lambda}\right) &= \\
\frac{A^2}{\lambda} &= \\
A &= \sqrt{\lambda}
\end{aligned}
$$

O valor esperado para x é então:

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} x\, |\Psi(x,t)|^2 \, dx &= A^2 \left(\int_{-\infty}^{0} x e^{2\lambda x} dx + \int_{0}^{+\infty} x e^{-2\lambda x} dx\right) && (3) \\
&= \lambda \left(\int_{-\infty}^{0} \frac{1}{2\lambda}\frac{u}{2\lambda} e^{u} du + \int_{0}^{+\infty} \frac{1}{2\lambda}\frac{u}{2\lambda} e^{-u} du\right) && (4) \\
&= \frac{1}{4\lambda}\left(\int_{-\infty}^{0} u e^{u} du + \int_{0}^{+\infty} u e^{-u} du\right) && (5)
\end{aligned}
$$

[7] $\int_a^c f(x)\, dx = \int_a^b f(x)\, dx + \int_b^c f(x)\, dx$ onde $a \le b \le c$ (prova).

Onde usamos novamente que $u = 2\lambda x$. Poderíamos usar apenas o fato de que o integrando ser ímpar e termos limites simétricos[8]. Mas queremos resolver por completo. Sendo $f(u) = u$ e $g(u) = e^u$

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(u)\, g'(u)\, du &= f(u)\, g(u)|_a^b - \int_a^b g(u)\, f'(u)\, du \\
\int_{-\infty}^0 ue^u du &= ue^u|_{-\infty}^0 - \int_{-\infty}^9 e^u du \\
&= \lim_{u\to-\infty} (ue^u) - \int_{-\infty}^9 e^u du \\
&= \lim_{u\to\infty} \left(-\frac{u}{e^u}\right) - \left(e^0 - \frac{1}{e^\infty}\right) \\
&= \lim_{u\to\infty} \left(-\frac{u}{e^u}\right) - 1
\end{aligned}$$

Como temos uma indeterminação do tipo $-\infty/\infty$ podemos aplicar a regra de L'hopital[9]:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^0 ue^u du &= \lim_{u\to\infty} \left(-\frac{du/dt}{de^u/dt}\right) - 1 && (6) \\
&= \lim_{u\to\infty} \left(-\frac{du/dt}{de^u/dt}\right) - 1 && (7) \\
&= \lim_{u\to\infty} \left(-\frac{1}{e^u}\right) - 1 && (8) \\
&= -1 && (9)
\end{aligned}$$

E equivalente:

$$\begin{aligned}
\int_0^{+\infty} ue^{-u} du &= -ue^{-u}\Big|_0^{+\infty} + \int_0^{+\infty} e^{-u} du && (10) \\
&= -\lim_{u\to\infty} \left(ue^{-u}\right) - \left(\frac{1}{e^\infty} - 1\right) && (11) \\
&= -\lim_{u\to\infty} \left(\frac{u}{e^u}\right) + 1 && (12) \\
&= 1 && (13)
\end{aligned}$$

[8]Funções pares são funções que $f(-x) = f(x)$,temos então $\int_{-a}^a f(x)\, dx = 2\int_0^a f(x)\, dx$. Funções ímpares são funções que $f(-x) = -f(x)$, temos então $\int_{-a}^a f(x)\, dx = 0$ (prova e prova).

[9]$\lim_{x\to a} \frac{f(x)}{g(x)} = \lim_{x\to a} \frac{f'(x)}{g'(x)}$,quando temos uma indeterminação do tipo $0/0$ ou $\pm\infty/\pm\infty$ (prova).

Este é o mesmo limite que calculamos anteriormente aplicando a L'hopital e temos $\lim_{u\to\infty}\left(u/e^{u}\right)=0$. Então retomando a equação 5 temos:

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty} x\left|\Psi\left(x,t\right)\right|^{2}dx &= \frac{1}{4\lambda}\left(\int_{-\infty}^{0} ue^{u}du+\int_{0}^{+\infty} ue^{-u}du\right)\\ &= \frac{1}{4\lambda}\left(-1+1\right)\\ &= 0\end{aligned}$$

Temos algo análogo para o valor de esperado de x^2 onde vamos usar a mesma substituição $u=2\lambda x$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2}\left|\Psi\left(x,t\right)\right|^{2}dx = A^{2}\left(\int_{-\infty}^{0} x^{2}e^{2\lambda x}dx+\int_{0}^{+\infty} x^{2}e^{-2\lambda x}dx\right) \tag{14}$$

$$= \lambda\left(\int_{-\infty}^{0} \frac{1}{2\lambda}\left(\frac{u}{2\lambda}\right)^{2} e^{u}du+\int_{0}^{+\infty} \frac{1}{2\lambda}\left(\frac{u}{2\lambda}\right)^{2} e^{-u}du\right) \tag{15}$$

$$= \frac{1}{8\lambda^{2}}\left(\int_{-\infty}^{0} u^{2}e^{u}du+\int_{0}^{+\infty} u^{2}e^{-u}du\right) \tag{16}$$

Aplicando novamente a integração por partes mas sendo agora $f\left(u\right)=u^{2}$e $g\left(u\right)=e^{u}$ para a primeira integral:

$$\begin{aligned}\int_{a}^{b} f\left(x\right)g'\left(x\right)dx &= f\left(x\right)g\left(x\right)\Big|_{a}^{b}-\int_{a}^{b} g\left(x\right)f'\left(x\right)dx\\ \int_{-\infty}^{0} u^{2}e^{u}du &= u^{2}e^{u}\Big|_{-\infty}^{0}-2\int_{-\infty}^{0} ue^{u}du\\ &= \lim_{u\to\infty}\frac{u^{2}}{e^{u}}-2\int_{-\infty}^{0} ue^{u}due^{u}\end{aligned}$$

O resultado desta integral já foi encontrado na equação 9 e é -1. O limite podemos usar duas vezes l'opital, de forma que obtemos apenas:

$$\int_{-\infty}^{0} u^{2}e^{u}du=2 \tag{17}$$

Para a segunda integral temos:

$$\begin{aligned}\int_{a}^{b} f\left(x\right)g'\left(x\right)dx &= f\left(x\right)g\left(x\right)\Big|_{a}^{b}-\int_{a}^{b} g\left(x\right)f'\left(x\right)dx\\ \int_{0}^{+\infty} u^{2}e^{-u}du &= -\,u^{2}e^{-u}\Big|_{0}^{\infty}+2\int_{0}^{+\infty} ue^{-u}du\\ &= -\lim_{u\to\infty}\frac{u^{2}}{e^{u}}+2\int_{-\infty}^{0} ue^{-u}du\end{aligned}$$

De forma análoga podemos aplicar duas vezes l'hopital para resolver o limite e o resultado dessa integral foi obtido em 9 e vale 1. Temos então:

$$\int_0^{+\infty} u^2 e^{-u} du = 2 \tag{18}$$

Agora combinando os resultados 17 e 18 em 16:

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \left|\Psi(x,t)\right|^2 dx &= \frac{1}{8\lambda^2}\left(\int_{-\infty}^{0} u^2 e^{u} du + \int_0^{+\infty} u^2 e^{-u} du\right)\\ &= \frac{1}{8\lambda^2}(2+2)\\ &= \frac{1}{2\lambda^2}\end{aligned}$$

O desvio padrão de x é dado então por:

$$\sigma = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2}$$

Como $\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x\left|\Psi(x,t)\right|^2 = 0$ e $\langle x^2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2\left|\Psi(x,t)\right|^2 = 1/2\lambda^2$ então:

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{2\lambda^2} - 0} = \frac{1}{\sqrt{2}\lambda}$$

E por fim a probabilidade de não estar no intervalo entre $-\sigma$ e $+\sigma$ é dado por:

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{--\sigma} |\Psi|^2 dx + \int_{+\sigma}^{+\infty} |\Psi|^2 dx &= -\int_{-\sigma}^{--\infty} \left|\Psi(x,t)\right|^2 dx + \int_{+\sigma}^{+\infty} \Psi(x,t)^2 dx\\ &= \int_{+\sigma}^{+\infty} \Psi(-u,t)^2 du + \int_{+\sigma}^{+\infty} \Psi(x,t)^2 dx\end{aligned}$$

Onde usamos a propriedade sobre inverter os limites da integral[10], e fizemos a substituição $u = -x$, de forma que temos $du/dx = -1$ ou $du = -dx$ e os novos limites são

$$\lim_{x\to -v} u = \lim_{x\to -v} -x = v$$

No limite inferior $v = \sigma$e no limite superior $v = -\infty$. No nosso caso como $\Psi(x,t)$ é uma função par, iso é $\Psi(-x,t) = \Psi(x,t)$, pois x sempre aparece em módulo $|x|$ então:

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{--\sigma} |\Psi|^2 dx + \int_{+\sigma}^{+\infty} |\Psi|^2 dx &= \int_{+\sigma}^{+\infty} \Psi(u,t)^2 du + \int_{+\sigma}^{+\infty} \Psi(x,t)^2 dx\\ &= 2\int_{+\sigma}^{+\infty} \Psi(x,t)^2 dx\end{aligned}$$

[10] $\int_a^b f(x)\,dx = -\int_b^a f(x)\,dx$ (prova).

Onde temos o segundo resultado pois x e v são apenas símbolo para uma variável, que nos dois casos são a mesma variável na função Ψ, e temos consequentemente a mesma integral. Resolvendo então, essa é a mesma integral indeterminada resolvida no começo do exemplo, com a vantagem de que $0 < \sigma < \infty$, ou seja, os valores dentro dos limites da integral são sempre positivos de forma que dentro dessa faixa de valores podemos escrever que $|x| = x$.

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{--\sigma} |\Psi|^2 \, dx + \int_{+\sigma}^{+\infty} |\Psi|^2 \, dx &= 2 \int_{+\sigma}^{+\infty} \Psi\left(x,t\right)^2 dx \\
&= 2A^2 \int_{+\sigma}^{+\infty} e^{-\lambda 2|x|} dx \\
&= 2\lambda \int_{+\sigma}^{+\infty} e^{-\lambda 2x} dx \\
&= \frac{2\lambda}{-2\lambda} \left[\frac{1}{e^{\lambda 2x}}\right]_{+\sigma}^{+\infty} \\
&= -\left[\frac{1}{e^{\infty}} - \frac{1}{e^{\lambda 2\sigma}}\right]_{+\sigma}^{+\infty} \\
&= \exp\left[-\lambda 2\sigma\right] \\
&= \exp\left[-\frac{2\lambda}{\sqrt{2}\lambda}\right]
\end{aligned}
$$

Onde usamos o fato de que calculamos já A e σ. Temos então que a probabilidade é $\mathrm{e}^{-\sqrt{2}}$ou 0.2431, ou ainda $24,31\%$.

3.4 Momentum

3.5 A relação da incerteza

1.7

1.9

A Probabilidade

A.1 Variáveis Discretas

Vamos supor que temos uma sala com N pessoas de diferentes idades. Então $N\left(j\right)$ é o número de pessoas com a idade j. O número total de pessoas será:

$$N = \sum_{j=0}^{\infty} N\left(j\right)$$

Evidentemente a chance de selecionar um indivíduo aleatoriamente com a idade j é dada pela fração das pessoas com esta idade:

$$P(j) = \frac{N(j)}{N}$$

A probabilidade de selecionarmos alguém com uma idade A **ou** B seria asoma das probabilidades, é evidente então que a soma de todos deve ser:

$$\sum_{j=0}^{\infty} P(j) = 1$$

Ou seja, qualquer pessoa que selecionarmos terá alguma idade. A média de idades pode ser calculada então como:

$$\langle j \rangle = \sum \left[j \frac{N(j)}{N} \right] = \sum_{j=0}^{\infty} j P(j)$$

De modo análogo, definimos a média do quadrado como:

$$\left\langle j^2 \right\rangle = \sum \left[j^2 \frac{N(j)}{N} \right] = \sum_{j=0}^{\infty} j^2 P(j)$$

Podemos generalizar que o valor médio de uma função qualquer de j $(f_1(j) = j, f_2(j) = j^2, \ldots)$ pode ser escrito como:

$$\langle f(j) \rangle = \sum_{j=0}^{\infty} f(j) P(j)$$

Podemos ter uma medida do quão espalhado a distribuição está em torno da média, isso é, a variância:

$$\begin{aligned}
\sigma^2 &\equiv \left\langle (\Delta j)^2 \right\rangle \\
&= \left\langle (j - \langle j \rangle)^2 \right\rangle \\
&= \sum (j - \langle j \rangle)^2 P(j) \\
&= \sum \left[j^2 - 2j \langle j \rangle + \langle j \rangle^2 \right] P(j) \\
&= \sum j^2 P(j) - 2 \langle j \rangle \sum j P(j) + \langle j \rangle^2 \sum P(j) \\
&= \left\langle j^2 \right\rangle - 2 \langle j \rangle \langle j \rangle + \langle j \rangle^2 \\
&= \left\langle j^2 \right\rangle - \langle j \rangle^2
\end{aligned}$$

Podemos notar que $j - \langle j \rangle$ nos dá a diferença de um valor pra média. Mas se usássemos apenas $\langle \Delta j \rangle$ teríamos $\langle \Delta j \rangle = 0$, pela própria definição de média. E o desvio padrão se torna então:

$$\sigma = \sqrt{\langle j^2 \rangle - \langle j \rangle^2}$$

Pelas definições também temos que:

$$\left\langle j^2 \right\rangle \geq \langle j \rangle^2$$

E a igualdade existe apenas quando$\langle j^2 \rangle = \langle j \rangle^2 = 0$.

A.1.1 Variáveis contínuas

A generalização é direta. Tomando intervalos infinitesimais, a probabilidade de de obtermos um valor entre x e $x + dx$ é dado por $\rho(x)\, dx$ onde $\rho(x)$ é chamado de densidade de probabilidade. Ou então a probabilidade entre os intervalos a e b é dada por:

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

E as outras regras seguem a mesma ideia:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x)\, dx = 1$$

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

$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, \rho(x)\, dx$$

$$\sigma^2 \equiv \langle (\Delta x) \rangle = \left\langle x^2 \right\rangle - \langle x \rangle^2$$