

## 3 A Interpretação de $\Psi$

### 3.1 Os Postulados

A mecânica clássica baseia-se nas três leis de Newton e a mecânica quântica se deixa deduzir de 5 *postulados* ou axiomas. No centro da nova teoria está a equação de Schrödinger que não pode ser deduzida logicamente de outras equações mais fundamentais. As várias "deduções" que se deixam elaborar são só maneiras de ilustrar a equação utilizando argumentos plausíveis.

Schrödinger encontrou sua equação por meio de profundas análises de material experimental e por meio de conjeturas heurísticas bem-sucedidas.

Sua base de partida foi a teoria ondulatória de de Broglie. A função de onda da mecânica quântica é intrinsecamente complexa e não podemos dar-lhe um significado físico direto, como damos à função de onda na mecânica clássica. Uma grandeza complexa não pode ser medida por qualquer instrumento. Mas embora a função  $\psi$  não seja, em si mesma, uma grandeza mensurável (uma observável), todas as grandezas mensuráveis, como a energia e o momento da partícula, podem ser calculadas a partir do conhecimento de  $\psi$ . A ligação com o mundo real é estabelecida pelos dois últimos dos cinco postulados que vamos formular agora.

#### 1. Postulado

A todo sistema com um grau de liberdade pertence uma função de onda  $\Psi(x,t)$ .

#### 2. Postulado

$\Psi(x,t)$  satisfaz à Equação de Schrödinger

$$\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} - U(x,t) \Psi(x,t) = \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} \quad (1)$$

### 3. Postulado

$\Psi(x,t)$  e  $\partial \Psi(x,t)/\partial x$  devem ser finitas, contínuas e unívocas para todo  $x$ .

### 4. Postulado

$\Psi(x,t)$  deve ser normalizada: 
$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1 \quad (2)$$

### 5. Postulado

Uma variável dinâmica (= observável)  $Q$ , como posição, momento linear, energia etc. deve ser substituída por um operador  $Q_{op}$  correspondente:

Observável		Operador
$x$	$\rightarrow$	$x$
$F(x)$	$\rightarrow$	$F(x)$
$P_x$	$\rightarrow$	$\hbar/i \cdot d/dx$
$E$	$\rightarrow$	$-\hbar/i \cdot d/dt$

etc.

O valor esperado da variável  $Q$  é calculado pela integral

$$\langle Q \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* Q_{op} \Psi dx \quad (3)$$

## 3.2 Comentários

### 1. Postulado:

A presença de  $i = \sqrt{-1}$  na Eq. 1 implica que  $\Psi(x,t)$  é uma entidade complexa. Se escrevermos  $\Psi$  como

$$\Psi = f + ig$$

onde  $f$  e  $g$  são reais, e substituirmos essa expressão na Eq. 1, obteremos para  $f$  e  $g$  duas equações acopladas

$$-\hbar/m \cdot \partial^2 f(x,t)/\partial x^2 + U(x,t) f(x,t) = -\hbar \cdot \partial g(x,t)/\partial t$$

$$-\hbar/m \cdot \partial^2 g(x,t)/\partial x^2 + U(x,t) g(x,t) = +\hbar \cdot \partial f(x,t)/\partial t$$

o que indica que nenhuma das duas funções só é uma solução da Eq. 1. Temos que usar uma função complexa como solução.

Para formar a conjugada complexa  $\Psi^*(x,t)$  de  $\Psi(x,t)$  substituímos o  $i$  da equação original por  $-i$ :  $\Psi^*(x,t) = f - ig$ .

A grandeza  $\Psi^*(x,t) \cdot \Psi(x,t)$  é sempre real e positiva:

$$\Psi^*(x,t) \cdot \Psi(x,t) = |\Psi|^2 = (f-ig)(f+ig) = f^2 + g^2$$

## 2. Postulado:

Se a energia potencial  $U(x,t)$  só depender da posição, a função  $\Psi(x,t)$  pode ser escrita como produto:  $\Psi(x,t) = \psi(x) \cdot \varphi(t)$ . A função que só depende de  $x$  deve satisfazer a equação

$$\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + (E - U(x))\psi(x) = 0 \quad (3)$$

Esta equação é chamada de Equação de Schrödinger independente do tempo, pois a variável temporal  $t$  não aparece nela.

$E$  = energia total do sistema

$$\varphi(t) \text{ deve satisfazer a equação } \frac{d\varphi(t)}{dt} = -\frac{2\pi i}{h} E \cdot \varphi(t) \quad (4)$$

$h = 6,626 \cdot 10^{-34}$  Js; (constante de Planck)

$\hbar := h/2\pi$ ; foi introduzido por Dirac e lê-se "agá cortado" ou "agá barra".

$$\text{A solução da Eq. 4 é } \varphi = \varphi_0 \cdot e^{-iEt/\hbar} \quad (5)$$

### 3. Postulado:

Na realidade, este postulado se baseia no comportamento de uma onda clássica. Consideremos o caso de uma corda esticada. O deslocamento  $u(x,t)$  desta corda em todos os pontos  $x$  no intervalo  $0 \leq x \leq L$  é obviamente finito, unívoco e contínuo. As mesmas propriedades temos que esperar com as funções de onda na mecânica quântica. Vamos chamar uma função de "bem comportada" se satisfizer o postulado 3. (Existem, porém, casos tão patológicos como por exemplo um poço de potencial com paredes infinitamente altas que só com muita boa vontade podem ser chamados de "bem comportados". Uma maneira de proteger-se contra tais situações seria mudar o postulado, por exemplo:

$\Psi(x,t)$ : unívoca (abstraindo-se de uma fase), finita e contínua para todo  $x$

$\partial\Psi/\partial t, \partial\Psi/\partial x$ : finita e contínua (a menos que  $U(x,t) \rightarrow \pm \infty$ )

$\partial^2\Psi/\partial x^2$ : finita (a menos que  $U(x,t) \rightarrow \pm \infty$ )

Além disso, para poder aplicar a Equação de Schrödinger (3), independente do tempo, precisa-se calcular  $d^2\psi/dx^2$ , o que somente funciona sem problemas, se  $d\psi/dx$  for contínua -o que só é possível, se  $\psi$  for contínua.

No caso de uma partícula numa caixa impenetrável há descontinuidades na primeira derivada. Elas ocorrem nas paredes da caixa e surgem do fato de ser o sistema uma idealização, na qual se supõe que as paredes da caixa sejam completamente impenetráveis, qualquer que seja a energia da partícula.

Consideremos o caso de um "degrau de potencial" como mostra a seguinte figura 1. Vamos demonstrar que, neste caso, a primeira derivada de  $\psi$  com respeito a  $x$  é contínua, e isso significa que  $\psi$  próprio é contínua.

Vamos integrar a Equação de Schrödinger (3) na região de  $x = 0 - \epsilon$  até  $x = 0 + \epsilon$ , supondo que  $U(x)$  tem um salto abrupto mas finito em  $x = 0$ .

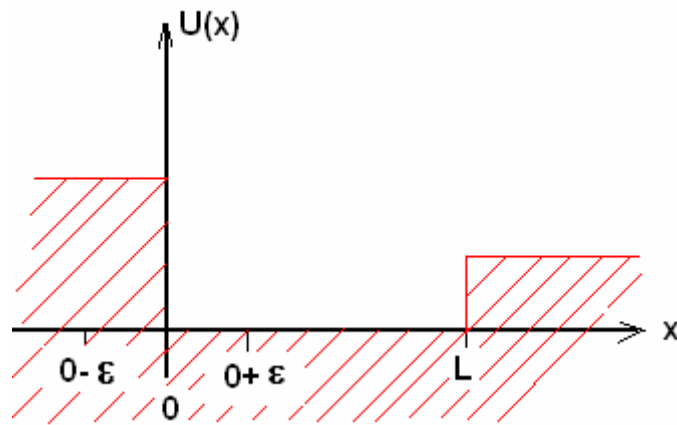


Fig. 1

A integral  $\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + (E - U(x)) = 0$  avaliamos usando a relação

$$\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} dx = \left[ \frac{d\psi(x)}{dx} \right]_{0-\varepsilon}^{0+\varepsilon} = \frac{d\psi(+\varepsilon)}{dx} - \frac{d\psi(-\varepsilon)}{dx}$$

Resulta

$$\frac{d\psi(+\varepsilon)}{dx} - \frac{d\psi(-\varepsilon)}{dx} = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} (E - U(x))\psi(x) dx = 0$$

A integral à direita tende a zero com  $\varepsilon \rightarrow 0$  e ficamos com  $d\psi(+\varepsilon)/dx = d\psi(-\varepsilon)/dx$ , ou seja, a primeira derivada da função  $\psi(x)$  é contínua em  $x = 0$ , e com isso  $\psi(x)$  também é contínua.

Analogamente demonstramos que  $\psi$  e  $d\psi/dx$  são contínuas em  $x = L$ .

#### 4. Postulado:

A grandeza  $p(x,t) := \Psi^*(x,t) \cdot \Psi(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$  é chamada *densidade de probabilidade*.

Já em 1926, Max Born formulou a seguinte explicação do significado de  $p(x,t)$ , veja Zeitschr. f. Physik, **37**,863 (1926):

Se  $\Psi(x,t)$  representa uma única partícula, então,  $|\Psi(x,t)|^2 \cdot dx$  é a probabilidade de encontrar ela no intervalo  $(x, x+dx)$  no instante  $t$ .

Uma vez que a partícula deve estar num ponto qualquer de eixo- $x$ , a soma das probabilidades sobre todos os valores de  $x$  deve ser igual a um. (Se a probabilidade total fosse nula, a partícula não existiria.)

Qualquer função de onda que satisfaça à Eq. 2 se diz *normalizada*. A normalização é a simples afirmação de a partícula estar num instante qualquer num certo ponto.

$\int_a^b |\Psi|^2 dx$  é a probabilidade de encontrar a partícula no intervalo  $a \leq x \leq b$ .

(Observe:  $|\Psi|^2 =$  densidade da probabilidade,  $|\Psi|^2 dx =$  probabilidade. Às vezes chama-se  $\Psi$  a amplitude da probabilidade.)

No caso dum *estado estacionário*, a função de onda é  $\Psi(x,t) = \psi(x) \cdot e^{\frac{-iEt}{\hbar}}$  e toda a dependência de  $\Psi$  do tempo fica no fator complexo  $\exp(-iEt/\hbar)$  com módulo 1.

(Um sistema quântico pode permanecer de forma estacionária em certos estados nos quais a energia tem um valor preciso  $E$ . Nestes estados estacionários, a função de onda tem a forma indicada. Os estados estacionários são as autofunções do operador da energia ou, simplesmente, *autofunções da energia*.)

A densidade de probabilidade num estado estacionário é independente do tempo, pois

$$\int \Psi^*(x,t) \cdot \Psi(x,t) dx = \int (\psi(x) \cdot e^{iEt/\hbar}) \cdot (\psi(x) \cdot e^{-iEt/\hbar}) dx = \int \psi(x)^2 dx$$

ou seja:  $|\Psi_n(x,t)|^2 = |\psi_n(x)|^2$ .

### 5. Postulado:

A cada grandeza física está associado um operador.

As previsões da mecânica quântica são estatísticas e os resultados possíveis de um experimento realizado numa partícula devemos calcular como *valor esperado*  $\langle Q \rangle$ . Podemos interpretar  $\langle Q \rangle$  como valor médio da observável  $Q$  que se espera como resultado numa experiência.

Para determinar, por exemplo, o valor esperado da coordenada  $x$ , ou seja a posição média que se pode esperar num experimento que se vai fazer com a partícula, devemos calcular

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x_{op} \Psi dx = \int x |\psi|^2 dx \quad (6)$$

já que o operador de  $x$  é  $x$  mesmo. (O operador de uma função que depende explicitamente só de  $x$  é a função mesma:  $F(x)_{op} = F(x)$ )

O resultado de qualquer medição de uma observável pode somente ser um dos autovalores do operador correspondente. Depois da medição, o sistema encontra-se no estado da autofunção correspondente.

## 3.3 Valores esperados

### Exemplo 1:

Escolhemos qualquer das autofunções 2.4 (Eq.16) da caixa impenetrável:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right); \quad 0 < x < L \quad (7)$$

Sem fazer um cálculo verdadeiro, podemos adivinhar que  $\langle x \rangle$  destes estados é  $L/2$ , pois a densidade de probabilidade  $|\psi_n(x)|^2$  é simétrica com respeito ao ponto  $x = L/2$ , ou seja  $\psi_n(L/2 + x) = \psi_n(L/2 - x)$ , compare Fig. 2 em seção 2.2. (Se a caixa se estender de  $-L/2$  até  $+L/2$ , o ponto  $x = 0$  seria o ponto de simetria e o valor esperado de  $x$  seria  $\langle x \rangle = 0$ , veja o **Exemplo 2.**)

Para fazer um cálculo completo, substituímos a Eq. 7 na Eq. (6) e utilizamos a identidade  $2 \sin^2 z = 1 - \cos 2z$ .

$$\langle x \rangle = \frac{2}{L} \int_0^L x \sin^2 \left( \frac{n\pi x}{L} \right) dx = \frac{1}{L} \int_0^L x dx - \frac{1}{L} \int_0^L x \cos \left( \frac{2n\pi x}{L} \right) dx$$

A primeira integral é igual a  $x^2/2$  o que dá ao primeiro termo o valor  $I_1 = L/2$ .

Com a substituição  $z = 2n\pi x/L$ , podemos ver que a segunda integral é zero. Temos que utilizar uma integração por partes:  $\int u dv = uv - \int v du$ ,

$$\begin{aligned} L^{-1} \int_{0,L} x \cos (2n\pi x/L) dx &= L(2n\pi)^{-2} \int_{0,2n\pi} z \cos z dz \\ &= L(2n\pi)^{-2} [z \sin z + \cos z]_{0,2n\pi} = 0 \end{aligned}$$

Na seção 2.2 foi demonstrado que as autofunções (7) são normalizadas no intervalo  $(0,L)$ , ou seja, elas satisfazem ao 4. postulado.

Também podemos demonstrar que estas funções  $\psi_n$  são mutuamente ortogonais no mesmo intervalo, e formam assim um conjunto *ortonormal*, veja também o parágrafo 7.2.2 da Mecânica.

A demonstração podemos fazer da seguinte maneira (m e n sejam diferentes números naturais) :

$$\begin{aligned} &\int_{0,L} \sin(m\pi x/L) \cdot \sin(n\pi x/L) dx = \\ &= 1/2 \int_{0,L} [\cos(m-n)\pi x L^{-1} - \cos(m+n)\pi x L^{-1}] dx = 0 \end{aligned}$$

Então, as funções  $\psi_n$  formam um conjunto ortonormal em  $(0,L)$ . Neste caso, as  $\psi_n$  são reais e  $\Psi_n^*$  e  $\Psi_n$  são iguais. Já que as funções de onda são zero no exterior do intervalo  $(0,L)$ , elas são ortonormais para todo  $x$  no intervalo  $(-\infty, +\infty)$



**Exemplo 2:**

Muitas vezes é preferível traçar a caixa de  $-L/2$  até  $+L/2$ , ou seja a região de integração fica centrada na origem. Neste caso obtemos duas séries de funções de onda, uma para  $n = 1, 3, 5, \dots$  e outra para  $n = 2, 4, 6, \dots$ . A primeira série consta de funções cos:  $\psi_n(x) = (2L^{-1})^{1/2} \cos n\pi x/L$ , a segunda série utiliza a função sen:  $\psi_n(x) = (2L^{-1})^{1/2} \sin n\pi x/L$ . Os autovalores da energia são os usuais:  $E_n = \hbar^2 \pi^2 n^2 / 2mL^2$ ,  $n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots$

A função de onda para o estado fundamental é

$$\Psi(x,t) = (2/L)^{1/2} \cos \pi x/L \cdot \exp(-iE_1 t/\hbar) \text{ com } E_1 = \hbar^2 \pi^2 / 2mL$$

Use esta função de onda para calcular os valores esperados de  $x$ ,  $p$ ,  $x^2$  e  $p^2$ .

**Solução:**

O valor esperado de  $x$  vem dado por

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \Psi dx = \int_{-L/2}^{L/2} \frac{2}{L} x \cos^2 \frac{\pi x}{L} dx$$

O integrando é um produto de  $\cos^2(\pi x/L)$ , que é uma função par de  $x$ , e pelo próprio  $x$ , uma função ímpar de  $x$ . O integrando é, portanto, uma função ímpar de  $x$ . A integral é, por isso, zero se tomamos a região de integração centrada na origem, o que foi feito. Resulta então  $\langle x \rangle = 0$ .

Para calcular  $\langle p \rangle$ , usamos o operador  $p_{op} = \hbar/i \cdot d/dx$ :  $\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx$

$$\langle p \rangle = -i\hbar \int_{-L/2}^{L/2} \frac{2}{L} \cdot \frac{-\pi}{L} \cdot \cos \frac{\pi x}{L} e^{+iEt/\hbar} \cdot \sin \frac{\pi x}{L} e^{-iEt/\hbar} \cdot dx$$

$$\langle p \rangle = \frac{i2\pi\hbar}{L^2} \cdot \int_{-L/2}^{L/2} \cos \frac{\pi x}{L} \sin \frac{\pi x}{L} dx = 0$$

Novamente, o integrando é uma função ímpar da variável de integração  $x$ , já que é o produto de uma função par,  $\cos(\pi x/L)$ , por uma função ímpar,  $\sin(\pi x/L)$ , e o intervalo de integração é simétrico em relação a  $x = 0$ , conseqüentemente resulta  $\langle p \rangle = 0$ .

Este resultado coincide com o resultado clássico, segundo o qual a partícula se move pra cá e pra lá com velocidade constante, mudando permanentemente o sentido do seu momento. A média das medidas do vetor  $\mathbf{p} = m \mathbf{v}$  será zero. Portanto, os valores esperados de  $x$  e  $p$  são nulos.

Para encontrarmos  $\langle x^2 \rangle$ , devemos calcular a integral  $\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x^2 \Psi dx$ , pois o operador de uma função de  $x$  é a função mesma:  $F(x)_{op} = F(x)$ .

Substituindo a função de onda, chegamos à integral

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2}{L} \int_{-L/2}^{L/2} x^2 \cos^2 \frac{\pi x}{L} dx$$

que não dará zero, pois o integrando é uma função par de  $x$ . Podemos simplificar a integral, tomando-a de 0 até  $L/2$ , e com ajuda de uma tabela de integrais obtemos

$$\langle x^2 \rangle = L^2(\pi^2 - 6)/12\pi^2 \approx 0,0327 L^2$$

A raiz quadrada  $\Delta x := \sqrt{\langle x^2 \rangle}$  é a *incerteza* em  $x$  (ou a posição média quadrática) e é uma medida das flutuações em torno da média  $\langle x \rangle = 0$ . Num caso no qual  $\langle x \rangle$  é diferente de zero, se calcula as flutuações com a fórmula generalizada

$$\Delta x_{rms} = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \quad (8)$$

O índice "rms" (root-mean-square deviation from the mean) indica que se trata do "desvio-padrão ( $\sigma$ )" de  $x$  respeito a  $\langle x \rangle$ . Para o momento  $p$  vale uma equação análoga. A grandeza  $\sigma^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$  é chamado de *variância*.

(A **variância** é definida como o 'desvio quadrático médio da média'. Comumente usa-se a raiz quadrada da variância, o *desvio-padrão*  $\sigma$ , para obter a mesma unidade que têm os dados originais.

Normalmente, se define a variância, denotada  $V(x)$ , ou  $\sigma^2$ , ou  $(\Delta x)^2$ , da maneira seguinte:

$$(\Delta x)^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$$

Desta definição podemos facilmente deduzir o teorema  $(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ ,

pois  $(\Delta x)^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 - 2x\langle x \rangle + \langle x \rangle^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ , já que  $\langle x\langle x \rangle \rangle = \langle x \rangle^2$

Da mesma maneira obtemos  $(\Delta p)^2 = \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$ .

Para determinar a incerteza em  $p$ , falta calcular  $\langle p^2 \rangle$ , mas isso é fácil, pois não precisamos de calcular integrais.

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left( -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi dx = \int_{-L/2}^{L/2} \Psi^* \left( 2mi\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi dx$$

A última integral dá  $2mE_1 \cdot \int \Psi^* \Psi dx = 2mE_1$ , ou seja  $\langle p^2 \rangle = 2mE_1$ .

A raiz quadrada de  $\langle p^2 \rangle = 2mE_1 = \hbar^2 \pi^2 / L^2$  (o momento médio quadrático) é a incerteza em  $p$ .

O produto

$$\Delta x \cdot \Delta p = \sqrt{\langle x^2 \rangle} \cdot \sqrt{\langle p^2 \rangle}$$

tem o valor de  $\Delta x \cdot \Delta p \approx 0,568 \hbar$ . Este resultado é consistente com o limite inferior  $\hbar/2$  imposto pelo **princípio da incerteza** de Heisenberg, que será nosso tema na próxima seção.

### 3.4 O princípio da incerteza

Werner Heisenberg (1901 - 1976) mandou, em março de 1927, um artigo fundamental sobre a "Unschärferelation" (relação de incerteza) para a *Zeitschrift für Physik*. Publicação: Z. Phys. **43**, 172 (1927).

Dois anos antes, em 1925, ele publicou -alguns meses antes de Schrödinger- sua versão da mecânica quântica. Em dezembro de 1933 recebeu o premio Nobel de Física do ano 1932.

A "relação de incerteza" não é só uma relação, é um *princípio* fundamental da natureza - e a mecânica quântica deve ser compatível com este princípio.

Terminamos a última seção com a relação  $\Delta x \cdot \Delta p \approx 0,568 \hbar$ , que quer dizer que o produto das incertezas de  $x$  e  $p$  para uma partícula movendo-se numa caixa impenetrável é da ordem da constante de Planck. Segundo Heisenberg, este resultado não é de estranhar-se, pois ele encontrou que é, em princípio, impossível determinar simultaneamente, e com precisão arbitrária, a posição e a quantidade de movimento de uma partícula atômica. Heisenberg expressou esta triste notícia por meio da seguinte desigualdade

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2 \quad (9)$$

Uma segunda desigualdade refere-se ao tempo e à energia

$$\Delta t \cdot \Delta E \geq \hbar/2 \quad (10)$$

A Eq. 10 diz, p. ex., que se fizermos uma medida da energia de um sistema no intervalo do tempo  $\Delta t$ , em torno do instante  $t$ , necessariamente teremos uma incerteza  $\Delta E$  na energia, determinada pela relação (10) da incerteza. Apesar das suas semelhanças formais, as equações (9) e (10) são muito diferentes na sua interpretação física. A energia  $E$  e o tempo  $t$  não possuem a mesma simetria como as variáveis  $p$  e  $x$ , que ambas são definidas como operadores e que podem ser medidas no mesmo tempo.  $E$  é uma variável dinâmica, mas  $t$  deve ser considerado um parâmetro.

Foram posteriormente ao descobrimento do princípio da incerteza desenvolvidos numerosos *Gedankenexperimente* (experiências imaginárias), para contradizer as relações de Heisenberg, -Einstein foi um grande especialista nesses desenhos -e nunca aceitou o princípio da incerteza.

(Um *Gedankenexperiment* é um experimento imaginário que, embora der ser impossível de realizar, não contradiz nenhuma lei da natureza. Num experimento imaginário podemos deixar saltar uma vaca sobre a lua e calcular a velocidade inicial necessário para tão salto.)

Mas, a maioria das pessoas não tem problemas em aceitar e aplicar o princípio de Heisenberg: físicos, ocultistas, filósofos, desportistas, novelistas, ... Parece que se trate de um princípio verdadeiramente universal, pode até mesmos ser utilizado para fazer dinheiro (p. ex. fazendo filmes ou produzir livros com duvidosas tendências)

Antes de demonstrar que os postulados da mecânica quântica conduzem ao princípio da incerteza, damos a seguinte formulação do princípio para as variáveis  $x$  e  $p$ :

É impossível inventar um processo de medição para  $x$  e  $p$  que der simultaneamente valores absolutamente exatos destas variáveis.

Os resultados de tais experimentos têm incertezas inerentes que devem satisfazer a desigualdade  $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$ .

Ou seja: Quanto mais precisamente se mede a posição, menos precisamente podemos conhecer o momento. Mais certeza sobre uma propriedade, mais incerteza com respeito à outra. É isto a conclusão que permite a aplicação do princípio na vida diária ou, também, no discurso filosófico.

A seguinte **demonstração** é uma modificação dos cálculos dados no livro de Heisenberg, *Physical Principles of Quantum Theory*, page 18. The University of Chicago Press 1930.

A demonstração começa com uma desigualdade evidente, pois o quadrado do módulo de um número complexo não pode ser negativo. Logo se usa somente fatos da mecânica quântica que dominamos, sem dúvida, perfeitamente. Trata-se, então, de uma repetição das coisas até agora estudadas.

Comecemos, então, com a seguinte desigualdade

$$|\psi' + (ax + b + ic)\psi|^2 \quad (11)$$

onde  $a$ ,  $b$ ,  $c$  são constantes reais que mais adiante vamos definir.  $\psi'$  é a derivada  $d\psi/dx$ .

Agora vamos escrever a Eq. 11 como produto: (usamos  $\psi^{*'}$  em vez de  $d\psi^*/dx$ )

$$\begin{aligned} [\psi^{*'} + (ax + b - ic)\psi^*] [\psi' + (ax + b + ic)\psi] &= \psi^{*'}\psi' + (ax + b)(\psi\psi^{*'} + \psi^*\psi') \\ &+ ic(\psi\psi^{*'} - \psi^*\psi') + a^2x^2\psi^*\psi + (b^2 + c^2)\psi^*\psi + 2abx\psi^*\psi \geq 0 \quad (12) \end{aligned}$$

Todo este cálculo contem muita mística, mas com confiança vamos alcançar nossa meta, isso é a relação  $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$ . Então vamo-nós a integrar a expressão (12) sobre todos os valores de  $x$ :

$$\int \psi^* \psi' dx + a \int x(\psi \psi^{*'} + \psi^* \psi') dx + b \int (\psi \psi^{*'} + \psi^* \psi') dx + ic \int (\psi \psi^{*'} - \psi^* \psi') dx \\ + a^2 \int \psi^* x^2 \psi dx + (b^2 + c^2) \int \psi^* \psi dx + 2ab \int \psi^* x \psi dx \geq 0 \quad (13)$$

Faltam agora três integrações por partes. Usamos o fato de  $\psi$  desaparecer nos limites da integração para obter

$$\int \psi^* \psi' dx = - \int \psi^* \psi'' dx \quad (14)$$

$$\int \psi \psi^{*'} dx = - \int \psi^* \psi' dx \quad (15)$$

$$\int x(\psi \psi^{*'} + \psi^* \psi') dx = \int x (\psi^* \psi)' dx = - \int \psi^* \psi dx = -1 \quad (16)$$

Estas integrais substituímos na desigualdade (13) e usamos também as conhecidas expressões

$$\langle x \rangle = \int \psi^* x \psi dx, \quad \langle x^2 \rangle = \int \psi^* x^2 \psi dx, \quad \langle p \rangle = -i\hbar \int \psi^* \psi' dx, \quad \langle p^2 \rangle = -\hbar^2 \int \psi^* \psi'' dx$$

para obter

$$\hbar^{-2} \langle p^2 \rangle - a + 2c\hbar^{-1} \langle p \rangle + a^2 \langle x^2 \rangle + b^2 + c^2 + 2ab \langle x \rangle \geq 0 \quad (17)$$

Esta relação é verdadeira para quaisquer valores reais de  $a$ ,  $b$ ,  $c$ . A pergunta é, quais valores devemos dar-lhes, para obter um resultado conciso e útil?

A seguinte escolha parece ser bem prometedora:

$$a = 1/(2(\Delta x)^2), \quad b = - \langle x \rangle / (2(\Delta x)^2); \quad c = - \langle p \rangle / \hbar \quad (18)$$

De fato, a desigualdade (17) se reduz a

$$\hbar^{-2} (\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2) - 1/(2(\Delta x)^2) + (\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2) / (4(\Delta x)^4) \geq 0 \quad (19)$$

ou seja  $(\Delta p)^2 / \hbar^2 - 1/(4(\Delta x)^2) \geq 0$ , de onde obtemos o resultado desejado

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2 \quad (20)$$

Obtivemos, então, uma das desigualdades de Heisenberg sem fazer menção dos problemas relacionados ao processo da medição de  $x$  e de  $p$ , somente usamos os postulados da mecânica quântica. A pessoa que rejeita Eq. (20), rejeita automaticamente os postulados da mecânica quântica.

Aliás, existem também demonstrações mais diretas de (2), mas não são tão fáceis de seguir como a nossa dedução, e o valor didático é bem menor, acho.

É importante de enfatizar que Heisenberg não fala de incertezas que provêm de imperfeições dos instrumentos de medição, ele fala de incertezas que têm sua origem no próprio ato de medição, e que não podem ser eliminadas por melhoramentos no sistema real de medição.

Pois para "ver" uma micro-partícula, por exemplo um elétron, será preciso de lançar alguma radiação contra ela, por exemplo um fóton. Neste processo de observação, a partícula vai sofrer um impacto e vai mudar o seu estado. (Pelo menos *um* fóton deve interagir com a partícula. Ao ser refletido por ela, o fóton lhe transmite, devido ao efeito Compton, parte do seu momento.)

Outra vez: Quanto mais precisamente queremos localizar a partícula (isto é, fazer  $\Delta x$  o mais pequena possível), mais vamos perturbar sua velocidade (isto é, vamos provocar uma grande incerteza no momento dela), pois para reduzir  $\Delta x$  temos que usar um fóton de energia muito alta.

Por outro lado, para minimizar  $\Delta p$ , devemos usar um fóton de energia mínima, ou seja, com  $\lambda$  o mais grande possível, pois

$$\Delta p \approx h/\lambda \quad (21)$$

O comprimento de onda da luz incidente determina a incerteza  $\Delta x$ , ou seja,

$$\Delta x \approx \lambda \quad (22)$$

(quanto menor  $\lambda$ , menor será  $\Delta x$ ).

Multiplicando (21) por (22), obtemos

$$\Delta x \cdot \Delta p \approx \lambda(h/\lambda) \approx h \quad (23)$$

(A análise mais exata demonstrou que este produto deve ser  $\geq \hbar$ . Mas o nosso resultado concorda, basicamente com a Eq. 20.)

Devemos mencionar outro aspecto interessante do princípio da incerteza, pois podemos aplicá-lo para entender as propriedades das micro-partículas em certos experimentos.

Por exemplo, se queremos planejar uma experiência para estudar o caráter corpuscular de uma partícula (por exemplo de um elétron no efeito fotoelétrico) vamos ver que a propriedade ondulatória da partícula incidente será menos aparente. E, da mesma forma, quando se trata de uma experiência de difração, o caráter corpuscular não vai-se manifestar.

### 3.4.1 Exemplos

#### Exemplo 1

A velocidade  $v = 6000 \text{ ms}^{-1}$  de um elétron foi medida com uma exatidão de 0,005%, ou seja:  $\Delta p/p = 0,00005$ .

Quão grande é a incerteza na posição do elétron?

#### Solução

O momento do elétron é  $p = mv = (9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}) \cdot 6000 \text{ m}^{-1} = 5,466 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$

Sendo  $\Delta p = 0,00005 \cdot p$ , obtemos  $\Delta p = 2,733 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$

$$\rightarrow \Delta x \geq \hbar/\Delta p = 3,86 \cdot 10^{-4} \text{ m} = 0,386 \text{ mm}$$

#### Exemplo 2

Um feixe de elétrons incide perpendicularmente sobre uma fenda de largura  $d = 0,1 \text{ } \mu\text{m} = 10^{-7} \text{ m}$  na direção  $z$  e será difratado pela fenda.



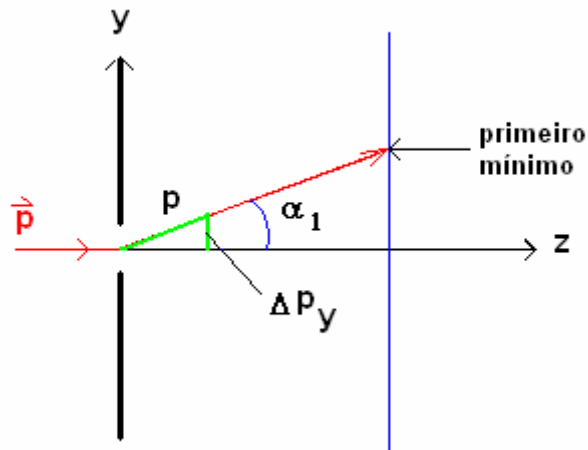


Fig. 2

Calcule a incerteza na velocidade dos elétrons difratados.

### Solução

Devido à propriedade ondulatória, os elétrons serão difratados no plano y-z e obtêm um momento transversal de

$$\Delta p_y = p \cdot \text{sen } \alpha. \quad (24)$$

(Diante da fenda, os elétrons tiveram o impulso preciso  $p = h/\lambda$ . A difração não muda nem  $\lambda$  nem o módulo  $p = h/\lambda$  do momento do elétron.)

As posições dos mínimos da intensidade na tela são dadas por

$$\text{sen } \alpha_m = \pm m \cdot \lambda/d \quad (25)$$

Considerando só os elétrons que vão para o primeiro mínimo de um lado do máximo central, obtemos

$$\Delta p_y = p \cdot \text{sen } \alpha_1 = p \cdot \lambda/d = h/\lambda \cdot \lambda/d = h/d \quad (26)$$

(A largura  $d$  da fenda leva a uma incerteza  $\Delta y = d$  na posição dos elétrons na direção y.)

Já que  $p = m v$ , resulta  $\Delta p_y = m \cdot \Delta v_y$ . Obtemos, assim,

$$\Delta v_y \approx \Delta p_y / m = h / (m \Delta x) = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ m s}^{-1} / (9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot 10^{-7} \text{ m}) = 7286 \text{ m s}^{-1}$$

### Exemplo 3

Qual a energia mais baixa possível de um elétron numa caixa de potencial impenetrável com  $L = 2,5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ . A posição do elétron deve ser determinada com uma exatidão de  $0,2 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ . Será possível que a radiação incidente mude o estado do elétron?

#### Solução

Para o nível mais baixo na caixa sabemos que  $E_1 = h^2 / (8mL^2)$ . Substituindo os valores numéricos, obtemos  $E_1 = 9,6 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 6,0 \text{ eV}$

Utilizando a relação da incerteza, temos  $\Delta p \cdot \Delta x \approx \hbar / 2$  com  $\Delta x = 2 \cdot 10^{-11} \text{ m}$ .

$$\rightarrow \Delta p = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Js} / 4 \cdot 10^{-11} \text{ m} = 2,6 \cdot 10^{-24} \text{ kg m s}^{-1}$$

Este valor devemos comparar com o momento do elétron no estado fundamental:  $p_1 = h / 2L = 1,32 \cdot 10^{-24} \text{ kg m s}^{-1}$

Pode-se supor, então, que qualquer radiação mudará o estado do elétron no ato da medição.

### Exemplo 4 (Largura das Raias Espectrais)

Um átomo excitado (por exemplo devido a uma "iluminação" com um fóton) permanece normalmente um tempo  $\tau = 10^{-8} \text{ s}$  no estado excitado. Depois desse tempo (vida média), o átomo irradia a energia recebida e desce no estado inicial. (Com certos átomos, por exemplo no caso da fosforescência, se observa tempos  $\tau$  de minutos ou até horas. Estes átomos são *meta-estáveis*.)

Usar o princípio de incerteza para calcular a largura  $\Delta f$  da raia espectral provocada por esta vida média.

### Solução

Usaremos  $\Delta E \cdot \Delta t \approx \hbar$ , onde  $\Delta E = h \Delta f$  e  $\Delta t = 10^{-8}$  s é o tempo que se tem, em média, para medir a energia do estado excitado. Obtemos

$$\Delta f = 1 / 2\pi \cdot 10^{-8} \text{ s} = 1,6 \cdot 10^7 \text{ Hz}$$

Observe que  $\Delta E$  é a incerteza na energia do estado excitado e é também a incerteza na energia do fóton emitido pelo átomo.

Se o comprimento de onda da raia espectral envolvida neste processo for 500 nm, quão grande seria o alargamento relativo  $\Delta f/f$  da raia?

Primeiro precisamos a frequência central da raia, ou seja

$$f_0 = c/\lambda = 3 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1} / 500 \cdot 10^{-9} \text{ m} = 6 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$$

Falta só calcular  $\Delta f/f_0$ , o que dá  $1,6 \cdot 10^7 \text{ Hz} / 6,0 \cdot 10^{14} \text{ Hz} = 2,7 \cdot 10^{-8} = 2,7 \cdot 10^{-6} \%$

Esta *largura natural* da raia espectral é muito pequena. Usualmente, ela é alargada por outros efeitos, por exemplo por colisões com outros átomos e pelo efeito Doppler. Por meio de um interferômetro sensível, porém, a largura natural pode ser observada.

