Exemplo de transfomada de Fourier de pacote de ondas

Acabei de publicar uma postagem sobre a evolução temporal e a dispersão de um pacote de ondas livres. No entanto, lá eu não abordei a transformada de Fourier básica, de uma representação do pacote de ondas em termos do momentum, para a representação da posição. Na presente postagem vou fazer os detalhes desse procedimento para o caso de um pacote de ondas gaussiano, mas que é um pouco mais geral daqueles usualmente vistos em livros-texto: nosso pacote apresentará ambos os valores esperados de posição e momentum não nulos.

Comecemos com uma função de onda na representação de momentum dada por:

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{\exp\left[-i\frac{p\langle q\rangle}{\hbar}\right]}{(2\pi)^{1/4}\sqrt{\Delta p}}\exp\left[-\frac{(p-\langle p\rangle)^2}{4(\Delta p)^2}\right], \tag{1}$$

onde $\langle q\rangle$, $\langle p\rangle$ e Δp são constantes reais, com $\Delta p > 0$. A correspondente função de onda na representação de posição é obtida pela transformada de Fourier da Eq. (1):

$$\psi(q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} dp\, \exp\left(i\frac{pq}{\hbar}\right)\tilde{\psi}(p). \tag{2}$$

A substituição da Eq. (1) na Eq. (2) dá:

$$\psi(q) = \frac{(2\pi)^{-3/4}}{\sqrt{\hbar\Delta p}}\int_{-\infty}^{+\infty} dp\, \exp\left[i\frac{p(q-\langle q\rangle)}{\hbar} - \frac{(p-\langle p\rangle)^2}{4(\Delta p)^2}\right]. \tag{3}$$

Para simplificar a notação durante os cálculos, sejam:

$$r \equiv q - \langle q\rangle \tag{4}$$

e

$$s \equiv p - \langle p\rangle. \tag{5}$$

Então, substituindo as Eqs. (4) e (5) na Eq. (3) fornece:

$$\begin{aligned}\psi(q) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/4}\sqrt{\hbar\Delta p}}\int_{-\infty}^{+\infty} ds\, \exp\left[i\frac{(s+\langle p\rangle)r}{\hbar} - \frac{s^2}{4(\Delta p)^2}\right] \\ &= \frac{\exp\left(i\frac{\langle p\rangle r}{\hbar}\right)}{(2\pi)^{3/4}\sqrt{\hbar\Delta p}}\int_{-\infty}^{+\infty} ds\, \exp\left[i\frac{sr}{\hbar} - \frac{s^2}{4(\Delta p)^2}\right]. \end{aligned} \tag{6}$$

O próximo passo é completar o quadrado do argumento da exponencial aparecendo no integrando da Eq. (6):

$$i\frac{sr}{\hbar} - \frac{s^2}{4(\Delta p)^2} = -\frac{1}{4(\Delta p)^2}\left(s^2 - \frac{4i(\Delta p)^2 r}{\hbar}s\right)$$

$$= -\frac{1}{4\left(\Delta p\right)^2}\left[\left(s-\frac{2i\left(\Delta p\right)^2 r}{\hbar}\right)^2-\left(\frac{2i\left(\Delta p\right)^2 r}{\hbar}\right)^2\right],$$

isto é:

$$\begin{aligned}
i\frac{sr}{\hbar}-\frac{s^2}{4\left(\Delta p\right)^2} &= -\frac{1}{4\left(\Delta p\right)^2}\left[\left(s-\frac{2i\left(\Delta p\right)^2 r}{\hbar}\right)^2+\frac{4\left(\Delta p\right)^4 r^2}{\hbar^2}\right]\\
&= -\frac{\left(s-\frac{2i(\Delta p)^2 r}{\hbar}\right)^2}{4\left(\Delta p\right)^2}-\frac{\left(\Delta p\right)^2 r^2}{\hbar^2}. \qquad (7)
\end{aligned}$$

Podemos agora colocar a Eq. (7) de volta na Eq. (6) e obter:

$$\begin{aligned}
\psi\left(q\right) &= \frac{\exp\left[i\frac{\langle p\rangle r}{\hbar}-\frac{(\Delta p)^2 r^2}{\hbar^2}\right]}{\left(2\pi\right)^{3/4}\sqrt{\hbar\Delta p}}\\
&\times \int_{-\infty}^{+\infty} ds\,\exp\left[-\frac{\left(s-\frac{2i(\Delta p)^2 r}{\hbar}\right)^2}{4\left(\Delta p\right)^2}\right]. \qquad (8)
\end{aligned}$$

Pronto, a integração da gaussiana da Eq. (8) pode ser feita de forma análoga à da postagem Integral da gaussiana e o resultado que procuramos é:

$$\begin{aligned}
\psi\left(q\right) &= \frac{\exp\left[i\frac{\langle p\rangle r}{\hbar}-\frac{(\Delta p)^2 r^2}{\hbar^2}\right]}{\left(2\pi\right)^{3/4}\sqrt{\hbar\Delta p}}\sqrt{4\pi\left(\Delta p\right)^2}\\
&= \frac{1}{\left(2\pi\right)^{1/4}}\sqrt{\frac{2\Delta p}{\hbar}}\exp\left[i\frac{\langle p\rangle\left(q-\langle q\rangle\right)}{\hbar}-\frac{\left(\Delta p\right)^2\left(q-\langle q\rangle\right)^2}{\hbar^2}\right], \qquad (9)
\end{aligned}$$

onde já foi substituída a Eq. (4).

Veja que o valor esperado da variável q é calculado, usando a Eq. (9), assim:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} dq\,q\left|\psi\left(q\right)\right|^2 &= \frac{2\Delta p}{\hbar\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} dq\,q\exp\left[-\frac{2\left(\Delta p\right)^2\left(q-\langle q\rangle\right)^2}{\hbar^2}\right]\\
&= \frac{2\Delta p}{\hbar\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} dq\,\left(q-\langle q\rangle\right)\exp\left[-\frac{2\left(\Delta p\right)^2\left(q-\langle q\rangle\right)^2}{\hbar^2}\right]\\
&+ \frac{2\langle q\rangle\,\Delta p}{\hbar\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} dq\,\exp\left[-\frac{2\left(\Delta p\right)^2\left(q-\langle q\rangle\right)^2}{\hbar^2}\right],
\end{aligned}$$

isto é:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dq\,q\left|\psi\left(q\right)\right|^2 = 0+\frac{2\langle q\rangle\,\Delta p}{\hbar\sqrt{2\pi}}\sqrt{\frac{\pi\hbar^2}{2\left(\Delta p\right)^2}}=\frac{2\langle q\rangle}{\sqrt{2\pi}}\sqrt{\frac{\pi}{2}}=\langle q\rangle \qquad (10)$$

Podemos, a partir de agora, pensar nos parênteses angulares, $\langle \cdots \rangle$, como indicativos da operação de tomar o valor esperado, como mostra a Eq. (10). Assim, para qualquer quantidade dependente da variável q, digamos $f(q)$, definimos seu valor esperado por:

$$\langle f(q) \rangle \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dq\, f(q) \left| \psi(q) \right|^2 . \qquad (11)$$

Como:

$$q^2 = (q - \langle q \rangle)^2 + 2q \langle q \rangle - \langle q \rangle^2 ,$$

fica fácil agora calcular o valor esperado de q^2 :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dq\, q^2 \left| \psi(q) \right|^2 &= \frac{2\Delta p}{\hbar\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dr\, r^2 \exp\left[-\frac{2(\Delta p)^2 r^2}{\hbar^2} \right] \\ &+ \frac{4\langle q \rangle \Delta p}{\hbar\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dq\, q \exp\left[-\frac{2(\Delta p)^2 (q - \langle q \rangle)^2}{\hbar^2} \right] \\ &- \frac{2\langle q \rangle^2 \Delta p}{\hbar\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dr\, \exp\left[-\frac{2(\Delta p)^2 r^2}{\hbar^2} \right], \end{aligned}$$

ou seja:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dq\, q^2 \left| \psi(q) \right|^2 = \frac{2\Delta p}{\hbar\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dr\, r^2 \exp\left[-\frac{2(\Delta p)^2 r^2}{\hbar^2} \right] + 2\langle q \rangle^2 - \langle q \rangle^2 , \qquad (12)$$

onde usamos as Eqs. (4) e (10), além da integral da gaussiana.

Para resolver a integral do segundo membro da Eq. (12), considere o seguinte resultado, que vale para qualquer constante α real e positiva:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dr\, r^2 \exp\left[-\alpha r^2 \right] &= -\frac{\partial}{\partial \alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} dr\, \exp\left[-\alpha r^2 \right] \\ &= -\frac{\partial}{\partial \alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = \frac{1}{2\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} . \qquad (13) \end{aligned}$$

Empregando a Eq. (13) na Eq. (12), obtemos:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dq\, q^2 \left| \psi(q) \right|^2 &= \frac{2\Delta p}{\hbar\sqrt{2\pi}} \frac{1}{2\frac{2(\Delta p)^2}{\hbar^2}} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{2(\Delta p)^2}{\hbar^2}}} + \langle q \rangle^2 \\ &= \frac{\hbar^2}{4(\Delta p)^2} + \langle q \rangle^2 , \qquad (14) \end{aligned}$$

que, segundo a definição introduzida pela Eq. (11), nada mais é do que:

$$\left\langle q^2 \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dq\, q^2 \left| \psi(q) \right|^2 . \qquad (15)$$

Então, das Eqs. (14) e (15) segue que:

$$\left\langle q^2 \right\rangle - \left\langle q \right\rangle^2 = \frac{\hbar^2}{4\left(\Delta p\right)^2}, \qquad (16)$$

que, por definição, é a chamada variância da variável q.

A incerteza desta variável é dada por:

$$\begin{aligned} \Delta q &\equiv \sqrt{\left\langle \left(q - \langle q \rangle\right)^2 \right\rangle} = \sqrt{\left\langle q^2 - 2q\langle q \rangle + \langle q \rangle^2 \right\rangle} \\ &= \sqrt{\langle q^2 \rangle - \langle 2q \langle q \rangle \rangle + \left\langle \langle q \rangle^2 \right\rangle} = \sqrt{\langle q^2 \rangle - 2\langle q \rangle \langle q \rangle + \langle q \rangle^2} \\ &= \sqrt{\langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2}. \qquad (17) \end{aligned}$$

Das Eqs. (16) e (17), obtemos, explicitamente, a incerteza da posição:

$$\Delta q = \frac{\hbar}{2\Delta p}, \qquad (18)$$

que dá também a relação de incerteza para o caso da função de onda gaussiana:

$$\Delta q \Delta p = \frac{\hbar}{2}. \qquad (19)$$

Em virtude da Eq. (19), que é uma igualdade e não uma desigualdade, dizemos que os pacotes de ondas gaussianos são chamados de pacotes de mínima incerteza.

Usando a Eq. (18) na Eq. (9) dá nossa função de onda para a posição:

$$\psi(q) = \frac{1}{(2\pi)^{1/4}\sqrt{\Delta q}} \exp\left[i\frac{\langle p \rangle \left(q - \langle q \rangle\right)}{\hbar} - \frac{\left(q - \langle q \rangle\right)^2}{4\left(\Delta q\right)^2} \right]. \qquad (20)$$

Se você quiser treinar um pouquinho, mostre que o valor esperado do momentum é, de fato, $\langle p \rangle$, mas faça isso usando a Eq. (20). Mostre também que a incerteza do momentum é, de fato, Δp, usando a Eq. (20). A dica aqui é representar o momentum como o operador diferencial:

$$P \equiv \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dq}. \qquad (21)$$