

NOTAS DE AULAS DE FÍSICA MODERNA

Prof. Carlos R. A. Lima

CAPÍTULO 5

MECÂNICA QUÂNTICA DE SCHRÖDINGER

Edição de junho de 2014

CAPÍTULO 5 – MECÂNICA QUÂNTICA DE SCHRÖDINGER

ÍNDICE

- 5.1- Introdução
- 5.2- Equação de Schrödinger
- 5.3- Interpretação Probabilística da Função de Onda
- 5.4- Equação de Schrödinger Independente do Tempo
- 5.5- Valor Esperado
- 5.6- Movimento da Partícula Quântica e Limite da Teoria Clássica
- 5.7- Comportamento Geral das Autofunções

Nessa apostila aparecem seções, sub-seções e exemplos resolvidos intitulados como **facultativos**. Os assuntos que se referem esses casos, podem ser dispensados pelo professor durante a exposição de aula sem prejuízo da continuidade do curso de Estrutura da Matéria. Entretanto, é desejável que os alunos leiam tais assuntos e discutam dúvidas com o professor fora do horário de aula. Fica a cargo do professor a cobrança ou não dos tópicos facultativos.

Excluindo os tópicos facultativos, esse capítulo deve ser abordado no máximo em **3 aulas de quatro créditos**.

CAPÍTULO 05

MECÂNICA QUÂNTICA DE SCHRÖDINGER.

5.1 - Introdução

Em 1925, Erwin Schrödinger propôs um novo formalismo para a teoria quântica. A inspiração principal de Schrödinger se baseava nas evidências experimentais de que o movimento das partículas dos sistemas microscópicos devem obedecer as leis do movimento ondulatório, e não as leis do movimento de Newton, como ocorre com as partículas macroscópicas. Assim, o movimento das partículas microscópicas deveria ser controlado por funções de ondas representadas por ondas de de Broglie. A teoria de Schrödinger é uma generalização, que inclui a teoria de Newton como um caso particular no limite macroscópico, assim como a teoria da relatividade de Einstein é uma generalização, que inclui a teoria de Newton como um caso particular no limite de baixas velocidades.

O objetivo desse capítulo é discutir os aspectos fundamentais da teoria quântica de Schrödinger. A aplicação dessa nova teoria quântica na solução de vários sistemas físicos microscópicos importantes é deixada para o próximo capítulo.

5.2 - A equação de Schrödinger.

A mecânica quântica de Schrödinger é uma teoria quântica

não-relativística, isto é, o movimento da partícula microscópica deve ocorrer com uma velocidade $u \ll c$. Correções relativísticas podem ser adotadas em muitos casos onde essa aproximação não se aplica. Se a partícula microscópica move-se ao longo do eixo x , na presença de um potencial $V(x)$, então, a força que atua sobre ela, é

$$F(x) = -dV(x)/dx \quad (5.1)$$

Na mecânica clássica procura-se determinar a equação do movimento da partícula, isto é, a posição $x(t)$ da partícula em função do tempo t . Na mecânica quântica esse não é o objetivo principal. Ao invés disso, o que se faz é calcular a função de onda $\Psi(x,t)$ e, a partir dela, obter os aspectos probabilísticos das grandezas cinemáticas e dinâmicas do movimento da partícula.

Viu-se no capítulo anterior que, a menos da constante $1/\sqrt{2\pi}$, a onda de matéria é descrita genericamente pelo pacote de ondas

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) e^{i(kx - \omega t)} dk \quad (5.2)$$

Por recorrência é possível obter uma equação de onda cuja solução é a função de onda, dada na eq. (5.2), para os casos não relativísticos. No caso de uma partícula livre o potencial $V(x) = V$ deve ser uma constante independente da posição x da partícula pois, nesse caso, da eq. (5.1), $F = 0$. Ainda nesse caso, deve-se esperar que a descrição quântica do movimento da partícula seja compatível com a 1ª lei de Newton na aproximação clássica. Particularmente, o potencial constante pode ser nulo e, nesse caso, a lei clássica da conservação da energia, resulta

$$\frac{p^2}{2m} = E, \quad (5.3)$$

onde E e p são, respectivamente, a energia e o momento não-relativísticos da partícula de massa m .

Combinando esta equação com as relações de de Broglie e Einstein, dadas nas eqs. (4.29) e (4.30), como

$$p = \hbar k \quad \text{e} \quad E = \hbar \omega, \quad (5.4)$$

obtem-se

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}, \quad (5.5)$$

que substituída na eq. (5.2), resulta

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{i[kx - (\hbar/2m)k^2t]} dk. \quad (5.6)$$

Derivando $\Psi(x,t)$ duas vezes em relação a variável x , obtém-se

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) (ik)^2 e^{i[kx - (\hbar/2m)k^2t]} dk,$$

ou, multiplicando ambos os lados por $i\hbar/2m$,

$$\left(\frac{i\hbar}{2m}\right) \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) \left(-\frac{i\hbar}{2m} k^2\right) e^{i[kx - (\hbar/2m)k^2t]} dk. \quad (5.7)$$

Por outro lado, derivando a eq. (5.6), agora em relação à variável t , obtém-se

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) \left(-\frac{i\hbar}{2m} k^2 \right) e^{i[kx - (\hbar/2m)k^2 t]} dk. \quad (5.8)$$

Como os membros direitos das eqs. (5.7) e (5.8) são idênticos, então, pode-se concluir que

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

ou, multiplicando ambos os lados por $i\hbar$,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (5.9)$$

Nesta forma, esta equação diferencial parcial (EDP) é conhecida como equação de Schrödinger para a partícula livre com $V(x)=0$. Diferentemente da equação de onda do eletromagnetismo, além de possuir o fator imaginário $i\hbar$, a equação de Schrödinger possui ordens distintas nas derivadas parciais no espaço e no tempo.

É importante observar também que a eq. (5.9) pode ser obtida diretamente da equação da conservação da energia, dada na eq. (5.3), quando p^2 e E forem identificados pelos operadores diferenciais

$$p^2 \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (5.10)$$

e aplica-las à função de onda $\Psi(x,t)$.

Esses operadores diferenciais introduzem um par de regras de transformação que fornecem uma interpretação quântica das grandezas clássicas p e E . São elas que possibilitam a construção da teoria quântica a partir da teoria clássica. A primeira eq. (5.10) refere-se a p^2 e não a p . Para encontrar a regra de transformação para a grandeza não quadrática p , é suficiente usar o caso particular da eq. (5.2) na forma de uma simples onda plana monocromática, isto é,

$$\Psi(x,t) = A e^{i(kx - \omega t)}. \quad (5.11)$$

Como se verá no próximo capítulo, essa é a solução para a partícula livre que se move para a direita. Para o caso de uma partícula livre que se move para a esquerda, deve-se trocar k por $-k$ na eq. (5.11), pois $p = \hbar k$. Derivando a eq. (5.11) parcialmente em relação a x e usando o fato que $p = +\hbar k$ para a partícula que se move para a direita, obtêm-se

$$\frac{\partial}{\partial x} \Psi(x,t) = ikA e^{i(kx - \omega t)} = ik \Psi(x,t) = i \frac{p}{\hbar} \Psi(x,t), \quad (5.12)$$

ou

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

A partir dessa equação pode-se concluir que

$$p \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad \text{ou} \quad p \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (5.13)$$

Obviamente, obtêm-se o mesmo resultado para a partícula que se move para a esquerda uma vez que, para esse caso, $\Psi(x,t) = A e^{i(-kx - \omega t)}$ e $p = -\hbar k$.

Deve-se observar que o "quadrado", ou dupla aplicação desse operador, resulta na primeira eq. (5.10).

Analogamente, a segunda eq. (5.10) pode ser obtida derivando a eq. (5.11) parcialmente em relação ao tempo t e usando a relação $E = \hbar\omega$.

Uma extensão óbvia da equação de Schrödinger para a partícula livre, sujeita a um potencial V constante e diferente de zero, pode ser obtida a partir da equação da energia total

$$\frac{p^2}{2m} + V = E. \quad (5.14)$$

Assumindo $p \rightarrow -i\hbar \partial/\partial x$ e $E \rightarrow i\hbar \partial/\partial t$ na eq. (5.14) e, em seguida, aplicando o resultado na função de onda $\Psi(x,t)$, obtém-se

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x,t) + V \Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t). \quad (5.15)$$

Para o caso geral, onde o potencial $V(x)$ é variável, a partícula fica sujeita a uma força $F = -dV(x)/dx \neq 0$. Nesse caso, a descrição quântica esperada do movimento da partícula deverá ser compatível com a 2ª lei de Newton na aproximação clássica.

A Fig. 5.1(a) mostra o gráfico de uma energia potencial variável típica. Neste caso, assim como o momento p , o número de onda k é variável e não pode ser utilizado mais como parâmetro constante na função de onda $\Psi(x,t)$ na eq. (5.2). Uma possibilidade seria considerar a energia total como invariante, como de fato é, e admitir a frequência $\omega = E/\hbar$ como o novo parâmetro constante no pacote de ondas.

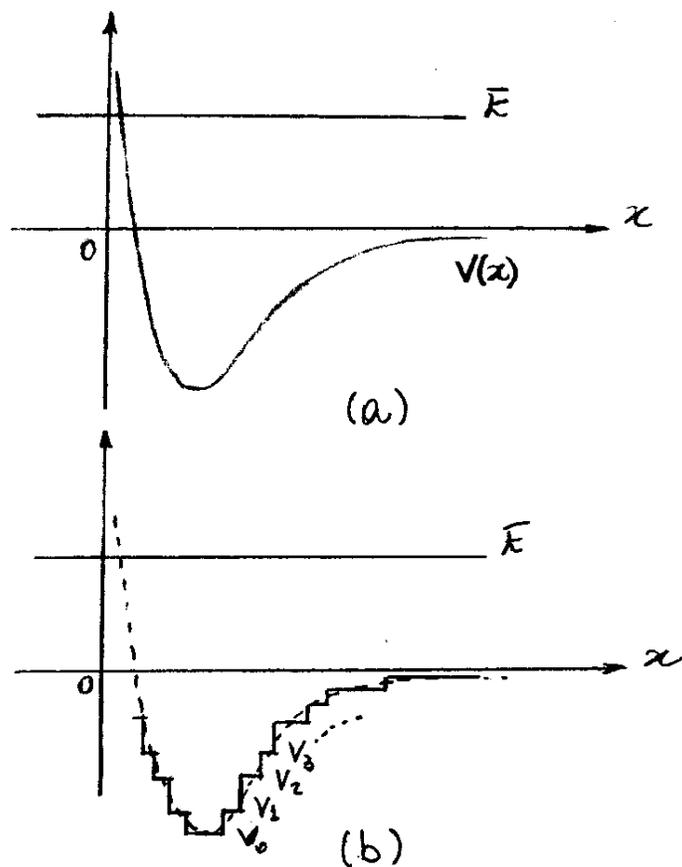


Fig. 5.1 - Energia potencial variável típica.

Entretanto, é possível ainda resolver o problema sem abrir mão de k como parâmetro constante, usando uma aproximação onde a energia potencial $V(x)$ seja construída por intervalos curtos de potenciais constantes V_0, V_1, V_2, \dots , como mostra a Fig. 5.1(b).

Em cada um desses intervalos, a partícula age como uma partícula livre e cada função de onda $\Psi_i(x,t)$ correspondente satisfaz a eq. (5.15).

Como a equação de Schrödinger é uma equação diferencial parcial (EDP) linear de 2ª ordem e o potencial $V(x)$ pode ser aproximado por um conjunto de potenciais V_i constantes, a solução $\Psi(x,t)$ para $V(x)$ pode ser obtida por uma combinação linear de soluções $\Psi_i(x,t)$ para cada potencial V_i .

São várias as evidências que confirmam que a função de onda $\Psi(x,t)$, obtida por essa combinação linear, é equivalente a solução da eq. (5.15) substituindo diretamente nela o potencial variável $V(x)$. Assim, deve-se concluir que a eq. (5.15) é a forma geral da equação de Schrödinger, válida para qualquer potencial $V(x)$.

Exemplo 5.1 - Exemplo do Müllin.

Se as funções $e^{i(kx - \omega t)}$ e $e^{i(-kx - \omega t)}$ são soluções da equação de Schrödinger, mostrar que a combinação linear,

$$\begin{aligned}\Psi(x,t) &= \frac{A}{2} \left[e^{i(kx - \omega t)} + e^{i(-kx - \omega t)} \right] = A \left(\frac{e^{ikx} + e^{-ikx}}{2} \right) e^{-i\omega t} \\ &= A \cos kx e^{-i\omega t},\end{aligned}$$

também é uma solução.

Derivando $\Psi(x,t)$ duas vezes em relação a posição x e uma vez em relação ao tempo t , obtêm-se

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x,t) = -k^2 A \cos kx e^{-i\omega t} = -k^2 \Psi(x,t)$$

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

Substituindo estes resultados na equação de Schrödinger (5.15), obtêm-se

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (-k^2) \Psi(x,t) + V \Psi(x,t) = i\hbar (-i\omega) \Psi(x,t)$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V = \hbar\omega \Rightarrow \frac{p^2}{2m} + V = E,$$

pois $p = \hbar k$ e $E = \hbar\omega$. A obtenção da lei clássica da Conservação da energia, mostra que a função de onda $\Psi(x,t) = A \cos kx e^{-i\omega t}$ também é solução da equação de Schrödinger.

5.3 - Interpretação Probabilística da Função de Onda.

Um dos aspectos mais importante da nova teoria quântica é o significado da solução $\Psi(x,t)$ da equação de Schrödinger. No capítulo 4 mostrou-se que, assim como a radiação, a onda de matéria tem uma interpretação probabilística. A partir desta interpretação, observou-se que é possível encontrar as posições aleatória da partícula microscópica.

É conveniente manter o caso unidimensional para evitar complicações desnecessárias.

Originalmente, Schrödinger esperava que a função de onda $\Psi(x,t)$, por si só, tivesse algum significado físico. A simples presença do fator imaginário $i\hbar$ na equação de Schrödinger mostra que $\Psi(x,t)$ pode ter uma representação complexa. Esse fato é suficiente para descartar qualquer possibilidade de se atribuir algum significado físico para a função de onda $\Psi(x,t)$.

Por outro lado, o módulo quadrado da função de onda

$$|\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t), \quad (5.16)$$

é uma quantidade real e, portanto, como já observado por Max Born, deve possuir significado físico.

O asterisco em $\Psi^*(x,t)$ refere-se ao conjugado complexo da função $\Psi(x,t)$. Na verdade, $|\Psi(x,t)|^2$ não é uma grandeza física mensurável, ou observável físico na linguagem da teoria quântica, mas tem um significado físico marcante na teoria quântica de Schrödinger. Nessa e nas próximas seções, ficará evidente que $|\Psi(x,t)|^2$ expressa uma distribuição de probabilidade com a qual é possível determinar, não somente a localização aleatória, mas também todas as outras grandezas físicas associadas ao movimento da partícula microscópica tais como momento, força, energia, etc...

Seja uma função de onda Ψ , associada a um feixe de partículas microscópicas, passando através de uma dupla fenda numa experiência de Young. A onda Ψ é dividida em duas ondas Ψ_1 e Ψ_2 , associadas a cada uma das fendas. As duas ondas interferem-se, resultando nas regiões de interferências construtivas e destrutivas, como mostra a Fig. 5.2.

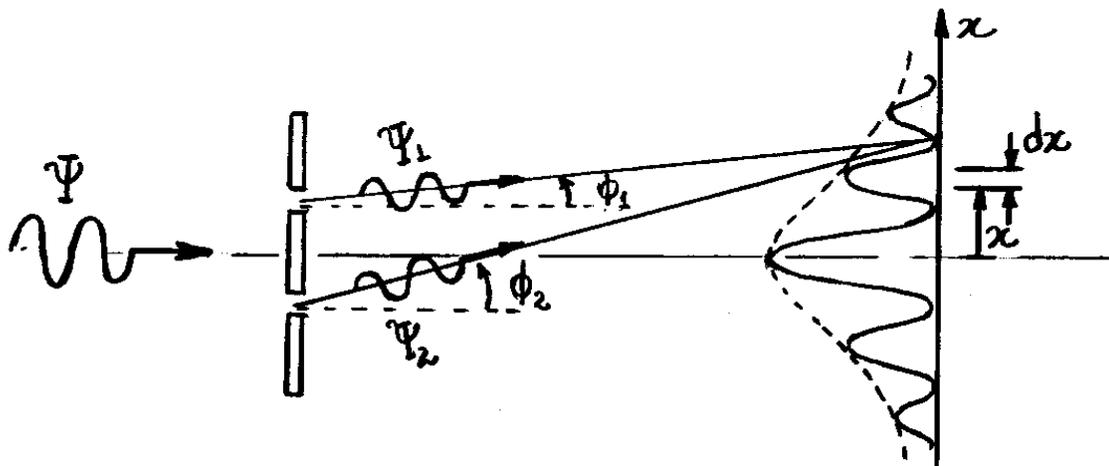


Fig. 5.2 - Onda Ψ associada a uma partícula atravessando uma dupla fenda de Young.

Após atravessar as fendas, ocorre a superposição de ondas Ψ_1 e Ψ_2 , isto é,

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2, \quad (5.17)$$

com

$$\Psi_1 = |\Psi_1| e^{i\phi_1}, \quad \Psi_2 = |\Psi_2| e^{i\phi_2}, \quad (5.18)$$

onde $\phi_1 = k_1 x - \omega_1 t$ e $\phi_2 = k_2 x - \omega_2 t$, são as fases associadas a cada uma das ondas. A localização das partículas, além das fendas, depende da função quadrática

$$\begin{aligned}
 |\Psi|^2 &= (\Psi_1^* + \Psi_2^*)(\Psi_1 + \Psi_2) = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + \Psi_2^* \Psi_1 + \Psi_1^* \Psi_2 \\
 &= |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + |\Psi_1| |\Psi_2| \left[e^{-i(\phi_2 - \phi_1)} + e^{i(\phi_2 - \phi_1)} \right] \\
 &= |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + 2|\Psi_1| |\Psi_2| \cos(\phi_2 - \phi_1) \quad (5.19)
 \end{aligned}$$

onde usam-se as eqs. (5.18) e a identidade trigonométrica $e^{-i\alpha} + e^{i\alpha} = 2 \cos \alpha$.

Observa-se que a eq. (5.19) contém duas quantidades fixas $|\Psi_1|^2$ e $|\Psi_2|^2$, associadas às intensidades de cada feixe de partículas que passam por cada uma das fendas individualmente e um termo adicional de interferência,

$$2|\Psi_1| |\Psi_2| \cos(\phi_2 - \phi_1).$$

As fases ϕ_1 e ϕ_2 variam para diferentes pontos de observação, gerando o padrão de interferência construtivo e destrutivo observado na Fig. 5.2. De acordo com a eq. (5.19), as partículas têm diferentes probabilidades $|\Psi|^2$ de serem encontradas em diferentes posições do eixo x como mostrado na Fig. 5.2. De acordo com a proposta de Born, a probabilidade infinitesimal dP de uma partícula estar localizada entre x e $x+dx$, num instante de tempo t , é

$$dP = \rho(x,t) dx = |\Psi(x,t)|^2 dx = \Psi^*(x,t) \Psi(x,t) dx \quad (5.20)$$

onde $\rho(x,t) = |\Psi(x,t)|^2 = dP/dx$ se refere a uma densidade de probabilidade.

A probabilidade de uma partícula ocupar uma região finita do espaço unidimensional entre x_1 e x_2 , num instante de tempo t , será

$$P = \int_{x_1}^{x_2} |\Psi(x,t)|^2 dx = \int_{x_1}^{x_2} \Psi^*(x,t) \Psi(x,t) dx. \quad (5.21)$$

Obviamente, a partícula deve estar localizada em algum ponto do espaço unidimensional e, portanto, a função de onda $\Psi(x,t)$ deve satisfazer a seguinte condição de normalização:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) \Psi(x,t) dx = 1. \quad (5.22)$$

Observa-se que $\Psi(x,t)$ deve ser uma função de onda localizada, como de fato é, para garantir a convergência da integral na eq. (5.22).

A função densidade de probabilidade $|\Psi(x,t)|^2$ faz menção a uma dependência temporal do comportamento local da probabilidade. Como consequência, definições apropriadas devem surgir da consideração de que as funções $\Psi(x,t)$ e $\Psi^*(x,t)$ devam satisfazer as equações de onda para a partícula livre:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad \text{e} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} = -i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}. \quad (5.23)$$

A dependência temporal da densidade de probabilidade para o exemplo da partícula livre, pode ser analisada derivando a função $|\Psi|^2$ no tempo e combinando o resultado com as eqs. (5.23), isto é,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} p(x,t) &= \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) = \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi = \Psi^* \left(-\frac{\hbar}{2im} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right) + \left(\frac{\hbar}{2im} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \right) \Psi \\ &= -\frac{\hbar}{2im} \left(\Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \Psi \right) = -\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\hbar}{2im} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \right] \end{aligned}$$

ou

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x,t) + \frac{\partial}{\partial x} j(x,t) = 0, \quad (5.24)$$

onde

$$j(x,t) = \frac{\hbar}{2im} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right), \quad (5.25)$$

é uma quantidade denominada de densidade de corrente de probabilidade, ou fluxo de probabilidade, que tem dimensão de probabilidade por unidade de tempo. A eq. (5.24) constitui uma equação de continuidade, ou lei de conservação. Ela expressa o fato que um aumento da densidade (por exemplo, de pontos), numa pequena região do espaço é compensada por uma redução do fluxo (dos pontos), que atravessa a superfície que envolve essa região, como ilustrado na Fig. 5.3. Em outras palavras, se existem muitos pontos nessa região, saem dela mais pontos do que entram e se existem poucos pontos, saem dela menos pontos do que entram.

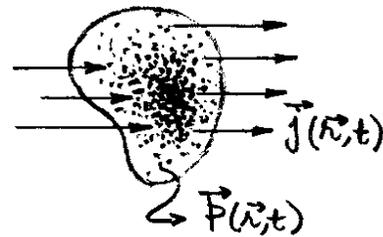


Fig. 5.3 - Comportamento da densidade e fluxo de probabilidade de acordo com a eq. (5.24).

No caso tridimensional, as eqs. (5.24) e (5.25), tornam-se

$$\frac{\partial}{\partial t} p(\vec{r}, t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) = 0, \quad \vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2im} (\Psi^* \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \Psi^*). \quad (5.26)$$

Exemplo 5.1 - FACULTATIVO

Utilizar a equação da continuidade para justificar a condição de normalização $\int_{-\infty}^{+\infty} p(x, t) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$, como uma condição independente do tempo t .

De acordo com a equação da continuidade, a variação temporal da probabilidade entre x_1 e x_2 será

$$\frac{dP}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{x_1}^{x_2} p(x, t) dx = \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial}{\partial t} p(x, t) dx = - \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial}{\partial x} j(x, t) dx = -j(x, t) \Big|_{x_1}^{x_2}$$

ou, da eq. (5.25),

$$\frac{d}{dt} \int_{x_1}^{x_2} p(x, t) dx = - \frac{\hbar}{2im} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \Big|_{x_1}^{x_2}.$$

Sendo Ψ uma função de onda localizada, como mostra a Fig. 5.4, nos limites $x_1 \rightarrow -\infty$ e $x_2 \rightarrow +\infty$, $\Psi \rightarrow 0$ e então

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} p(x, t) dx = 0,$$

Como se desejava mostrar.

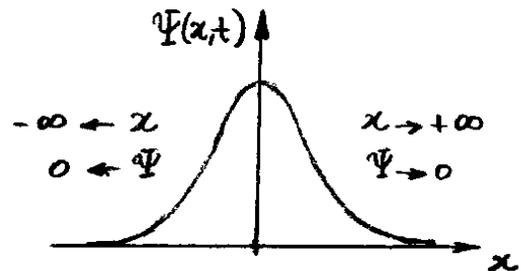


Fig. 5.4 - Comportamento geral da função de onda localizada.

5.4. Equação de Schrödinger independente do tempo.

A teoria quântica de Schrödinger é baseada numa equação diferencial, cuja solução determina a dependência espacial e temporal da função de onda que controla o movimento da partícula microscópica. Na versão unidimensional, a função de onda tem x e t como variáveis independentes.

Sabe-se que o potencial V que atua num sistema microscópico é uma função tanto de x como de t . Entretanto, na maioria das vezes, o potencial pode ser considerado como uma função que depende somente da variável x e, sem perda de generalidade, pode-se escrever a equação de Schrödinger como

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x,t) + V(x) \Psi(x,t) = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) \quad (5.27)$$

Como x e t são variáveis independentes, pode-se usar o método de separação de variáveis onde a dependência em x é separada da dependência em t na função de onda $\Psi(x,t)$, escrevendo-a como um produto de duas funções de cada uma dessas variáveis, isto é,

$$\Psi(x,t) = \psi(x) \psi(t) \quad (5.28)$$

Se esta solução satisfaz a eq. (5.27), então

$$-\psi(t) \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) \psi(x) \psi(t) = i\hbar \psi(x) \frac{d\psi(t)}{dt} .$$

Dividindo ambos os lados desta equação por $\psi(x)\psi(t)$, obtêm-se

$$\frac{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) \psi(x)}{\psi(x)} = \frac{i\hbar \frac{d\psi(t)}{dt}}{\psi(t)} . \quad (5.29)$$

Observa-se que o lado esquerdo desta equação depende somente da variável x ; enquanto que o lado direito depende somente de t . Só é possível a igualdade de duas funções com variáveis diferentes, se estas forem uma constante independente de ambas as variáveis.

Se α for esta constante, a eq. (5.29) se transforma em duas equações diferenciais para as funções $\psi(x)$ e $\psi(t)$ dadas por

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) \psi(x) = \alpha \psi(x) \quad (5.30)$$

e

$$i\hbar \frac{d\psi(t)}{dt} = \alpha \psi(t) . \quad (5.31)$$

A solução da equação diferencial ordinária (EDO) de primeira ordem, na eq. (5.31), a menos de uma constante multiplicativa, é

$$\psi(t) = e^{-i\alpha t/\hbar} . \quad (5.32)$$

Como a função de onda deve ter uma componente temporal oscilante do tipo $e^{-i\omega t}$, então a solução na eq. (5.32) é parametrizada pela frequência angular ω tal que

$$\omega = \alpha/\hbar$$

ou

$$\alpha = \hbar\omega = E, \quad (5.33)$$

onde $E = \hbar\omega$ é a energia total do sistema quântico. Assim, as eqs. (5.32) e (5.30), tornam-se

$$\psi(t) = e^{-iEt/\hbar} \quad (5.34)$$

e

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (5.35)$$

A eq. (5.35) para $\psi(x)$, parametrizada pela energia total E , é denominado de equação de Schrödinger independente do tempo.

Como se verá mais adiante, o produto dado na eq. (5.28) será de fato uma solução da equação de Schrödinger sempre que um valor particular de energia $E = E_n$, onde n é um índice inteiro qualquer, for capaz de gerar uma solução particular $\psi = \psi_n$ fisicamente aceitável da equação de Schrödinger independente do tempo.

Assim, o método de separação de variáveis deve resultar em soluções da equação de Schrödinger que assumem a seguinte forma especial:

$$\Psi_n(x,t) = \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (5.36)$$

As soluções $\Psi_n(x,t)$, correspondentes às energias E_n com diferentes valores do número inteiro n , são na verdade soluções particulares da equação de Schrödinger. A combinação linear dessas soluções deve fornecer a solução geral do problema.

Quando se calcula a densidade de probabilidade a partir da eq. (5.36), obtêm-se

$$|\Psi_n(x,t)|^2 = |\psi_n(x)|^2 e^{-iE_n t/\hbar} e^{+iE_n t/\hbar} = |\psi_n(x)|^2, \quad (5.37)$$

ou seja, para um mesmo valor de energia E_n , os aspectos probabilísticos do sistema quântico são invariantes no tempo. Por causa disso, as soluções $\Psi_n(x,t)$ são referidas como sendo os diferentes estados estacionários, ou configurações espaciais, do sistema quântico. Por exemplo, no caso atômico, $\Psi_n(x,t)$ descreve uma determinada configuração espacial para os elétrons e E_n é a energia correspondente a essa situação particular de equilíbrio. Conclui-se que as soluções da equação de Schrödinger, para um sistema microscópico submetido a um potencial $V(x)$, fornecem um conjunto de valores de energia E_n e funções de onda $\Psi_n(x,t)$, que descrevem respectivamente as energias da partícula microscópica e as configurações espaciais do sistema quântico em particular.

Exemplo 5.2.

Sejam Ψ_n e $\Psi_{n'}$ diferentes funções de onda para diferentes valores de energia E_n e $E_{n'}$, respectivamente. Mostrar que essas funções satisfazem a seguinte condição de normalização:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{n'}^* \Psi_n dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{n'}^* \Psi_n dx = 0. \quad (5.38)$$

Sabe-se que as funções $\Psi_n(x)$ e $\Psi_{n'}(x)$ satisfazem a equação de Schrödinger independente do tempo, isto é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi_n}{dx^2} + V(x) \Psi_n = E_n \Psi_n \quad \text{e} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi_{n'}^*}{dx^2} + V(x) \Psi_{n'}^* = E_{n'} \Psi_{n'}^*,$$

Multiplicando a primeira equação por $\Psi_{n'}^*$, a segunda por Ψ_n e, em seguida, subtraindo a primeira pela segunda, obtêm-se

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\Psi_{n'}^* \frac{d^2 \Psi_n}{dx^2} - \frac{d^2 \Psi_{n'}^*}{dx^2} \Psi_n \right) = (E_n - E_{n'}) \Psi_{n'}^* \Psi_n$$

ou

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dx} \left(\Psi_{n'}^* \frac{d \Psi_n}{dx} - \frac{d \Psi_{n'}^*}{dx} \Psi_n \right) dx = (E_n - E_{n'}) \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{n'}^* \Psi_n dx$$

ou ainda

$$(E_n - E_{n'}) \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{n'}^* \Psi_n dx = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\Psi_{n'}^* \frac{d \Psi_n}{dx} - \frac{d \Psi_{n'}^*}{dx} \Psi_n \right) \Big|_{-\infty}^{\infty} = 0,$$

pois, como mostrado na Fig. 5.4, do mesmo modo que as funções de onda $\Psi_{n'}$ e Ψ_n , as funções espaciais $\Psi_{n'}$ e $\Psi_n \rightarrow 0$ quando $x \rightarrow \pm\infty$.

Exemplo 5.3 -

Seja um sistema quântico de dois níveis com valores de energia E_1 e E_2 , correspondentes aos estados estacionários de funções de onda

$$\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} \text{ e } \psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar},$$

respectivamente. Mostrar que uma solução $\Psi(x,t)$, dada pela combinação linear desses estados, não se refere a um estado estacionário.

Se $\Psi(x,t)$ é uma combinação linear dos dois estados, então

$$\Psi(x,t) = a_1\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + a_2\psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}.$$

Calculando o módulo quadrático da função $\Psi(x,t)$, obtém-se

$$|\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*\Psi$$

$$= (a_1^*\psi_1^*e^{iE_1t/\hbar} + a_2^*\psi_2^*e^{iE_2t/\hbar})(a_1\psi_1e^{-iE_1t/\hbar} + a_2\psi_2e^{-iE_2t/\hbar})$$

$$= |a_1|^2|\psi_1|^2 + |a_2|^2|\psi_2|^2 + a_1^*a_2\psi_1^*\psi_2e^{i(E_2-E_1)t/\hbar} + a_2^*a_1\psi_2^*\psi_1e^{+i(E_2-E_1)t/\hbar}$$

$$= A + B e^{-i\omega t} + C e^{+i\omega t},$$

onde

$$A = |a_1|^2|\psi_1|^2 + |a_2|^2|\psi_2|^2, \quad B = a_1^*a_2\psi_1^*\psi_2, \quad C = a_2^*a_1\psi_2^*\psi_1$$

e

$$\omega = (E_2 - E_1)/\hbar$$

Assim, aspectos probabilísticos de $\Psi(x,t)$ não são estacionários e as modificações devem ocorrer com uma frequência $\omega = (E_2 - E_1)/\hbar$. Um exemplo dessa situação fora do equilíbrio, ocorre numa lâmpada de gás monoatômico, onde os átomos são constantemente bombardeados por elétrons.

5.5. Valor Esperado

Sabe-se que $\Psi(x,t)$ é a função de onda da partícula microscópica e a densidade de probabilidade $|\Psi(x,t)|^2$ define os aspectos probabilísticos associados ao sistema microscópico. É através da função $|\Psi(x,t)|^2$ que é possível determinar todas as quantidades físicas mensuráveis, ou observáveis, tais como posição, força, momento e energia, associado ao movimento mecânico da partícula microscópica.

Do ponto de vista da teoria Clássica, a posição $x(t)$ de uma partícula, num instante de tempo t , é uma grandeza física primitiva a partir da qual é possível determinar as grandezas físicas derivadas momento, força e energia.

O momento linear $p(t)$ pode ser determinado a partir da posição $x(t)$ como

$$p(t) = m \frac{d}{dt} x(t).$$

Se a partícula é submetida a um potencial $V(x,t)$, a força $F(t)$ pode ser determinada a partir da 2ª lei de Newton como

$$F(t) = \frac{d}{dt} p(t) = - \frac{\partial}{\partial x} V(x,t). \quad (5.39)$$

Como na teoria quântica a posição $x(t)$ de uma partícula está vinculada a uma densidade de probabilidade $|\Psi(x,t)|^2$, então o mesmo deve ocorrer com todas as grandezas físicas a ela associada. Em outras palavras, grandezas físicas tais como momento $p(t)$, força $F(t)$ e energia E , devem ter também aspectos probabilísticos.

É importante mencionar que os aspectos probabilísticos da posição x e momento p , bem como, energia E e tempo t da partícula, já tinham sido previstos pelo princípio da incerteza de Heisenberg.

A medida da posição x de uma partícula macroscópica, realizada em um certo número de vezes, deve resultar em um conjunto de valores possíveis dessa grandeza física. A média e as flutuações em torno da média dessas medidas é uma operação lógica para representar respectivamente o valor esperado e a incerteza da posição x da partícula.

Do mesmo modo, para uma partícula microscópica, um observável físico pode ser determinado em termo de um valor esperado e uma incerteza associada. Nesse caso, tais componentes estatísticos devem depender da função de onda $\Psi(x,t)$ do sistema quântico em particular.

A definição do valor esperado, ou valor médio, pode ser obtida do método estatístico comumente utilizado no procedimento experimental. Se uma grandeza G é medida N vezes, onde um valor G_i ocorre n_i vezes, o valor esperado dessa grandeza é

$$\langle G \rangle = \frac{\sum_{i=1}^N n_i G_i}{N} = \frac{\sum_{i=1}^N G_i n_i}{\sum_{i=1}^N n_i} \quad (5.40)$$

Do ponto de vista da teoria quântica, supõe-se que a grandeza G seja função da posição x da partícula microscópica. Nesse caso, o valor $G(x)$ ocorre com a mesma probabilidade $dP = |\Psi(x,t)|^2 dx$ de se encontrar a partícula entre x e $x+dx$. Assim, o valor esperado de $G(x)$ será calculado como na eq. (5.40) trocando simplesmente n_i por dP e somatórios por integrais, isto é,

$$\langle G(x) \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} G(x) dP}{\int_{-\infty}^{+\infty} dP} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} G(x) |\Psi(x,t)|^2 dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx}$$

ou

$$\langle G(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} G(x) |\Psi(x,t)|^2 dx, \quad (5.41)$$

pois

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1. \quad (5.42) -$$

Uma forma apropriada de escrever a eq. (5.41) é

$$\langle G \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) G(x) \Psi(x,t) dx \quad (5.43)$$

Os termos no integrando são escritos com a inserção de $G(x)$ entre $\Psi^*(x,t)$ e $\Psi(x,t)$ para preservar o cálculo do valor esperado das grandezas físicas com notação restrita da mecânica quântica. Isso ficará mais evidente na sequência com exemplos dos casos dos operadores momento p e energia total E .

Ainda da analogia com a teoria clássica, é possível fazer várias medições da grandeza G e observar as flutuações em relação ao valor esperado $\langle G \rangle$ por meio do conceito de desvio padrão, ou incerteza ΔG , definido por

$$\Delta G = \sqrt{\langle (G - \langle G \rangle)^2 \rangle}, \quad (5.44)$$

que também pode ser escrita numa forma apropriada observando que

$$\Delta G^2 = \langle (G - \langle G \rangle)^2 \rangle = \langle G^2 - 2G\langle G \rangle + \langle G \rangle^2 \rangle = \langle G^2 \rangle - 2\langle G \rangle \langle G \rangle + \langle G \rangle^2$$

ou

$$\Delta G^2 = \langle G^2 \rangle - \langle G \rangle^2 \quad (5.45)$$

onde o valor esperado de G^2 é calculado como

$$\langle G^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) G^2 \Psi(x,t) dx \quad (5.46)$$

Neste formalismo, o valor esperado da posição x da partícula microscópica

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) x \Psi(x,t) dx, \quad (5.47)$$

tem um significado especial para a teoria quântica de Schrödinger. Assim como $x(t)$ é a grandeza fundamental na mecânica clássica, $\langle x(t) \rangle$ desempenha o mesmo papel na mecânica quântica. Do mesmo modo, pode-se calcular o valor esperado do momento p da partícula microscópica como

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) p \Psi(x,t) dx.$$

Como, no formalismo da teoria quântica de Schrödinger, a grandeza física p é representada pelo operador diferencial $\hbar/i \partial/\partial x$, então

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x,t) dx. \quad (5.48)$$

Analogamente, para o caso da energia E , tem-se

$$\langle E \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) dx, \quad (5.49)$$

pois essa grandeza física é representada pelo operador diferencial $i\hbar \partial/\partial t$.

No caso de uma partícula livre, de acordo com a eq. (5.9), $i\hbar \partial/\partial t \Psi = -\hbar^2/2m \partial^2/\partial x^2 \Psi$, a eq. (5.49) torna-se

$$\langle E \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} \right] dx. \quad (5.50)$$

As eqs. (5.48) e (5.50), mostram o motivo pelo qual adotou-se a ordem dos termos que aparecem no integrando da eq. (5.43). De fato, essa deve ser a única ordem possível para o operador momento \hat{p} , pois

$$\begin{aligned} \langle \hat{p} \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} [\Psi^*(x,t) \Psi(x,t)] dx \\ &= \frac{\hbar}{i} [\Psi^*(x,t) \Psi(x,t)]_{-\infty}^{+\infty} \equiv 0 \end{aligned}$$

e

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) \Psi(x,t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} dx,$$

não tem nenhum sentido.

Obtém-se, naturalmente, a mesma conclusão para o valor esperado da energia a partir da eq. (5.50).

Na sequência propõe-se avaliar o comportamento do valor esperado das energias para o caso particular dos estados estacionários

$$\Psi_n(x,t) = \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}, \quad (5.51)$$

cuja derivada parcial no tempo fornece

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_n &= i\hbar \psi_n(x) \left(-i \frac{E_n}{\hbar}\right) e^{-iE_n t/\hbar} \\ &= \psi_n(x) E_n e^{-iE_n t/\hbar} = E_n \Psi_n. \end{aligned} \quad (5.52)$$

O valor esperado da energia $\langle E \rangle$, definido na eq. (5.49), torna-se então

$$\langle E \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^* i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_n dx = E_n \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^* \Psi_n dx = E_n, \quad (5.53)$$

pois Ψ_n é uma função de onda normalizável. Similaneamente, aplicando a operação quadrática $(i\hbar \partial/\partial t)^2$ na eq. (5.51), obtêm-se

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t})^2 \Psi_n = E_n^2 \Psi_n$$

e então

$$\langle E^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^* (i\hbar \frac{\partial}{\partial t})^2 \Psi_n dx = E_n^2. \quad (5.54)$$

As eqs. (5.53) e (5.54) mostram que, para estados estacionários, a incerteza ΔE na determinação da energia E é

$$\Delta E = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = 0.$$

De acordo com a eq. (5.37), $|\Psi_n(x,t)|^2 = |\psi_n(x)|^2$, as diferentes localizações da partícula quântica com o estado estacionário $\Psi_n(x,t)$, independe do tempo. Assim, espera-se que as modificações do sistema, ou da distribuição de probabilidades, ocorra somente num intervalo de tempo $\Delta t \rightarrow \infty$. Atribui-se a este fato e ao princípio da incerteza de Heisenberg ($\Delta E \Delta t \sim \hbar/2$), a anulação da incerteza ($\Delta E \rightarrow 0$) na determinação da energia para estados estacionários.

Deve-se mencionar aqui a importante propriedade expressa na eq. (5.52), como uma equação de autovalor. Uma equação de autovalor é uma equação da forma

$$\Lambda \Psi_n = \lambda_n \Psi_n,$$

onde um operador Λ determina um conjunto de autofunções Ψ_n , ou autovetores, fisicamente aceitáveis e autovalores λ_n correspondentes. Os autovetores Ψ_n formam um conjunto de soluções linearmente independentes da equação de Schrödinger e representam as configurações espaciais do sistema quântico. Por outro lado, os autovalores λ_n representam os valores possíveis de um observável físico associado ao movimento mecânico da partícula microscópica.

Exemplo 5.3 - FACULTATIVO

Assumindo uma solução de onda plana para a partícula que se move para a direita $\psi_n(x) = e^{+ik_n x}$, a eq. (5.51), torna-se

$$\Psi_n(x,t) = e^{i(k_n x - E_n t/\hbar)}$$

Mostrar que esta função é uma autofunção do operador momento linear p com autovalor $+\hbar k_n$.

Aplicando o operador $p \rightarrow \hbar i \partial/\partial x$ na função de onda acima, obtém-se

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_n = + \frac{\hbar}{i} (ik_n) e^{i(k_n x - E_n t/\hbar)} = + \hbar k_n \Psi_n,$$

que, obviamente, é uma equação de autovalor para a grandeza momento linear. Similarmente ao caso da energia, é possível mostrar que o momento também é determinado com incerteza nula $\Delta p = 0$.

Exemplo 5.4.

Seja novamente o sistema quântico de dois níveis onde E_n e $E_{n'}$ são os autovalores de energia associados as autofunções Ψ_n e $\Psi_{n'}$, respectivamente. Escrever as condições de normalização e calcular o valor esperado da energia $\langle E \rangle$ para uma função de onda do tipo

$$\Psi = c \Psi_n + c' \Psi_{n'}$$

A condição de normalização será

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi dx = \int_{-\infty}^{+\infty} (c^* \Psi_n^* + c'^* \Psi_{n'}^*) (c \Psi_n + c' \Psi_{n'}) dx = |c|^2 + |c'|^2, \quad (5.55)$$

pois, de acordo com as eqs. (5.22) e (5.38),

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^* \Psi_n dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{n'}^* \Psi_{n'} dx = 1, \quad (5.56)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^* \Psi_{n'} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* e^{+iE_n t/\hbar} \psi_{n'} e^{-iE_{n'} t/\hbar} dx = e^{i(E_n - E_{n'})t/\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \psi_{n'} dx = 0$$

e similarmente

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{n'}^* \Psi_n dx = 0, \quad (5.57)$$

isto é, os termos cruzados não contribuem para a normalização dos estados estacionários. Aplicando o operador $i\hbar \partial/\partial t$ na função de onda Ψ , de acordo com a eq. (5.52), obtém-se

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = c i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_n + c' i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{n'} = c E_n \Psi_n + c' E_{n'} \Psi_{n'}$$

e então

$$\langle E \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi dx = \int_{-\infty}^{+\infty} (c^* \Psi_n^* + c'^* \Psi_{n'}^*) (c E_n \Psi_n + c' E_{n'} \Psi_{n'}) dx$$

ou, das eqs. (6.56) e (6.57),

$$\langle E \rangle = |c|^2 E_n + |c'|^2 E_{n'}. \quad (5.58)$$

As quantidades $|c|^2$ e $|c'|^2$ fornecem as probabilidades do sistema estar nos estados estacionários Ψ_n e $\Psi_{n'}$ com energias E_n e $E_{n'}$, respectivamente. O sistema atômico é um exemplo clássico em que esse fenômeno pode ocorrer. Nesse caso, o átomo tem diferentes probabilidades de ocupar um ou outro nível do sistema quântico de dois níveis.

5.6 - Movimento da partícula Quântica e o limite da Teoria Clássica - FACULTATIVO

Do ponto de vista da teoria quântica, a localização de uma partícula está associada a um pacote de ondas cujo comportamento espacial é descrito pela função de onda $\Psi(x,t)$ ou, mais apropriadamente, pela função densidade de probabilidade $|\Psi(x,t)|^2$. A posição mais provável, ou valor esperado $\langle x \rangle$ da posição da partícula, é representado pelo ponto de máximo da função densidade de probabilidade $|\Psi(x,t)|^2$. Como se pode ver na Fig. 5.5, a avaliação do movimento da partícula quântica é obtida da evolução temporal do ponto de máximo da função $|\Psi(x,t)|^2$.

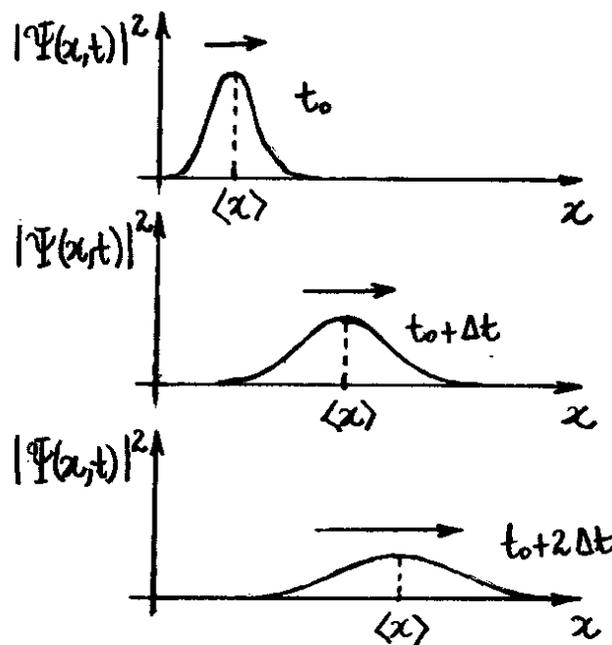


Fig. 5.5 - Evolução temporal do pacote de ondas associado a uma partícula quântica em movimento.

O alargamento do pacote, mostrado na Fig. 5.5, é uma consequência do princípio da incerteza.

Como $\Delta E \Delta t \sim \hbar/2$, a energia E fica cada vez mais determinada (ΔE diminui) a medida que Δt aumenta. Como $\Delta E = \Delta p^2/2m$, o mesmo deve ocorrer com o momento p e, conseqüentemente, Δx aumenta uma vez que $\Delta p \Delta x \sim \hbar/2$.

O movimento da partícula microscópica pode ser avaliado a partir da derivada temporal de $\langle x \rangle$, isto é,

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* x \Psi dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\Psi^* x \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} x \Psi \right) dx, \leftarrow$$

uma vez que, para a derivada parcial $\partial/\partial t$, x é uma constante. De acordo com a equação de Schrödinger

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{V}{i\hbar} \Psi \quad \text{ou} \quad \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} - \frac{V}{i\hbar} \Psi^*. \quad (5.59) \leftarrow$$

Desde que $V(x)$ seja real. Assim, a equação anterior torna-se

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\left(-\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} - \frac{V}{i\hbar} \Psi^* \right) x \Psi + \Psi^* x \left(\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{V}{i\hbar} \Psi \right) \right] dx$$

ou

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\Psi^* x \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} x \Psi \right) dx. \quad (5.60)$$

Observa-se que

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* x \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} x \Psi + \Psi^* \Psi \right) = \\
& = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* x \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} x \Psi \right) + \frac{\partial}{\partial x} (\Psi^* \Psi) \\
& = \cancel{\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} x \frac{\partial \Psi}{\partial x}} + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \Psi^* x \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \left(\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} x \Psi + \cancel{\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi} + \cancel{\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} x \frac{\partial \Psi}{\partial x}} \right) \\
& + \cancel{\frac{\partial \Psi^* \Psi}{\partial x}} + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \Psi^* x \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} x \Psi + 2 \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} .
\end{aligned}$$

Assim, a eq. (5.60) pode ser escrita, como

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

Como Ψ ou Ψ^* são funções de onda localizadas, de modo que se anulam para $x \rightarrow \pm\infty$, então,

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = -\frac{i\hbar}{m} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx = \frac{1}{m} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx \leftarrow$$

ou, da representação do valor esperado do momento $\langle p \rangle$ da partícula dada na eq. (5.48),

$$\langle p \rangle = m \frac{d\langle x \rangle}{dt} . \quad (5.61) \leftarrow$$

Logo a representação do momento de uma partícula microscópica é obtida da representação clássica, dada na eq. (5.38), trocando as grandezas clássicas $x(t)$ e $p(t)$ por seus respectivos valores esperados.

Os aspectos dinâmicos do movimento da partícula microscópica podem ser avaliados a partir da derivada temporal da eq. (5.48), isto é,

$$\frac{d}{dt} \langle p \rangle = \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\Psi}^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi dx = \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial \bar{\Psi}^*}{\partial t} \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \bar{\Psi}^* \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) dx \leftarrow$$

Substituindo $\partial \Psi / \partial t$ e $\partial \bar{\Psi}^* / \partial t$ por suas expressões, dada pela equação de Schrödinger (5.59), obtêm-se

$$\frac{d}{dt} \langle p \rangle = \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\left(\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \bar{\Psi}^*}{\partial x^2} - \frac{V}{i\hbar} \bar{\Psi}^* \right) \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \bar{\Psi}^* \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{V}{i\hbar} \Psi \right) \right] dx$$

ou

$$\frac{d}{dt} \langle p \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial^3 \bar{\Psi}^*}{\partial x^2} \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \bar{\Psi}^* \frac{\partial^3 \Psi}{\partial x^3} \right) dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \left[V \bar{\Psi}^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \bar{\Psi}^* \frac{\partial}{\partial x} (V\Psi) \right] dx.$$

Observa-se que

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \bar{\Psi}^*}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \bar{\Psi}^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right) &= \left(\frac{\partial^2 \bar{\Psi}^*}{\partial x^2} \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \frac{\partial \bar{\Psi}^*}{\partial x} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right) - \left(\frac{\partial \bar{\Psi}^*}{\partial x} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \bar{\Psi}^* \frac{\partial^3 \Psi}{\partial x^3} \right) \\ &= \frac{\partial^2 \bar{\Psi}^*}{\partial x^2} \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \bar{\Psi}^* \frac{\partial^3 \Psi}{\partial x^3} \end{aligned}$$

e

$$V \bar{\Psi}^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \bar{\Psi}^* \frac{\partial}{\partial x} (V\Psi) = V \bar{\Psi}^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \bar{\Psi}^* \left(V \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial x} \Psi \right) = -\bar{\Psi}^* \frac{\partial V}{\partial x} \Psi.$$

Assim,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle p \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right) dx - \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\partial V}{\partial x} \Psi dx \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right) \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\partial V}{\partial x} \Psi dx . \end{aligned}$$

Como a função de onda Ψ deve ser localizada isto é, $\Psi(x,t) \rightarrow 0$ quando $x \rightarrow \pm\infty$, então

$$\frac{d}{dt} \langle p \rangle = - \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \left(\frac{\partial V}{\partial x} \right) \Psi dx = - \left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle = \langle F \rangle . \quad (5.62) \leftarrow$$

Logo, expressão quântica associada a 2ª lei de Newton que se aplica a uma partícula microscópica é obtida da representação clássica, dada na eq. (5.39), trocando as grandezas clássicas $p(t)$ e F por seus respectivos valores esperados.

No limite clássico, em que $\Delta x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = 0$ e $\Delta p^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = 0$, será desnecessário distinguir x de $\langle x \rangle$ e p de $\langle p \rangle$. A teoria quântica de fato conduz à teoria clássica no limite em que o princípio da incerteza deixa de ser importante. Entretanto, quando se está fora desse limite, a teoria quântica prevê resultados que não tem nenhuma correspondência com a teoria clássica.

5.7 - Comportamento Geral das Autofunções.

Nesta seção inicia-se a discussão das soluções aceitáveis da equação de Schrödinger a partir de argumentos qualitativos. Para isso, é conveniente escrever a equação de Schrödinger independente do tempo, $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi$, como

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)]\psi. \quad (5.63)$$

O comportamento da função de onda $\psi(x)$ dependem da forma da energia potencial $V(x)$, uma vez que ela determina a força que atua na partícula.

Uma forma típica da energia potencial $V(x)$ é mostrada na Fig. 5.6.

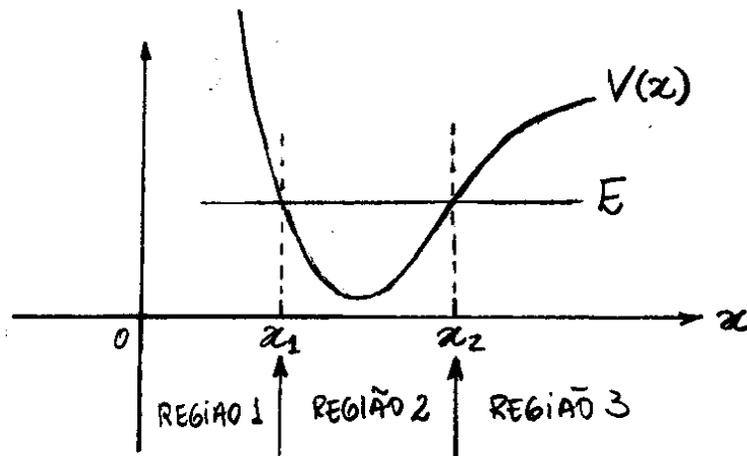


Fig. 5.6 - Energia potencial $V(x)$ e energia total E frequentemente presentes no movimento de uma partícula microscópica em um sistema quântico.

O gráfico inclui também um valor escolhido para a energia total E , que possa ser assumida como um autovalor de energia na equação de Schrödinger e que satisfaz a seguinte condição:

$$E = V(x) \quad \text{para } x = x_1 \text{ e } x = x_2. \quad (5.64)$$

Como a energia cinética da partícula pode ser expressa como $K = E - V(x) = p^2/2m$, então o momento p correspondente é

$$p = \sqrt{2m[E - V(x)]} \quad (5.65)$$

Valor real do momento p só será possível para valores de x que satisfazem a condição $E \geq V(x)$. As regiões $x < x_1$ e $x > x_2$, onde $E < V(x)$, são conhecidas como regiões classicamente proibidas. Esta limitação não se estende a uma partícula microscópica. Entretanto, os pontos x_1 e x_2 , denominados de pontos de transição clássica, ajudam a determinar o comportamento geral das autofunções.

A eq. (5.63) pode ser expressa como

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\alpha^2\psi, \quad (5.66)$$

onde

$$\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)]. \quad (5.67)$$

Esta equação mostra que o comportamento da função de onda $\psi(x)$ depende do sinal de α^2 .

Sabe-se que a condição $d\psi(x)/dx = 0$ define x_0 como um ponto de máximo, ou ponto de mínimo, para a função $\psi(x)$ quando $x = x_0$, tal que

- se $d^2\psi(x_0)/dx^2 > 0$, x_0 define um ponto de mínimo
- e
- se $d^2\psi(x_0)/dx^2 < 0$, x_0 define um ponto de máximo.

A Fig. 5.6 mostra que na 1ª e 3ª regiões $\alpha^2 < 0$, pois $E < V(x)$. Por outro lado, na 2ª região $\alpha^2 > 0$, pois $E > V(x)$. Vê-se então, da eq. (5.66), que os sinais de ψ e $d^2\psi/dx^2$ são os mesmos na 1ª e 3ª regiões, e são contrários na 2ª região. Isso significa que na 1ª e 3ª regiões a curva ψ contra x terá ponto de mínimo se $\psi > 0$ e ponto de máximo se $\psi < 0$. Ao contrário, na 2ª região, a curva terá ponto de máximo se $\psi > 0$ e ponto de mínimo se $\psi < 0$. Todas as possibilidades estão mostradas na Fig. 5.7.

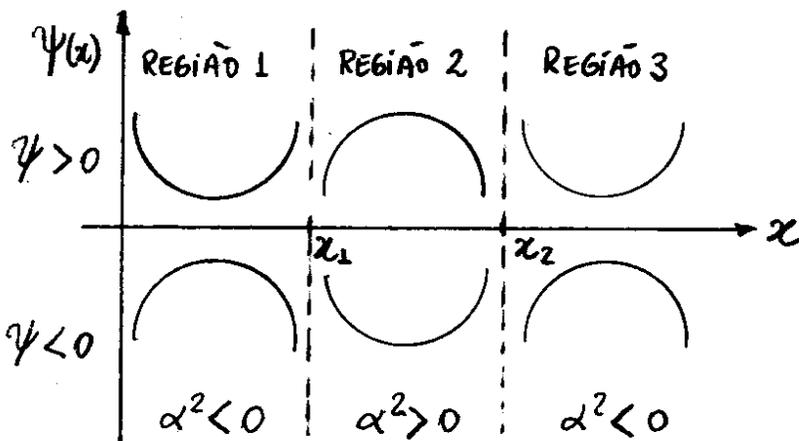


Fig. 5.7 - Comportamento da função de onda $\psi(x)$ para uma partícula sujeita a um potencial da Fig. 5.6.

Essa discussão mostra que seria possível utilizar a equação de Schrödinger independente do tempo, com valores escolhidos de $V(x)$ e E , para determinar o comportamento de $\psi(x)$ como função da posição x da partícula. Resultados quantitativos específicos serão discutidos no próximo capítulo.

Busca-se aqui somente soluções qualitativas a partir de argumentos baseados nas características da equação diferencial e do potencial $V(x)$.

A curva 1 na Fig. 5.8 mostra o comportamento qualitativo de uma função de onda, inicialmente positiva ($\psi > 0$), a partir de um ponto $x = x_0$, de acordo com os resultados indicados na Fig. 5.7.

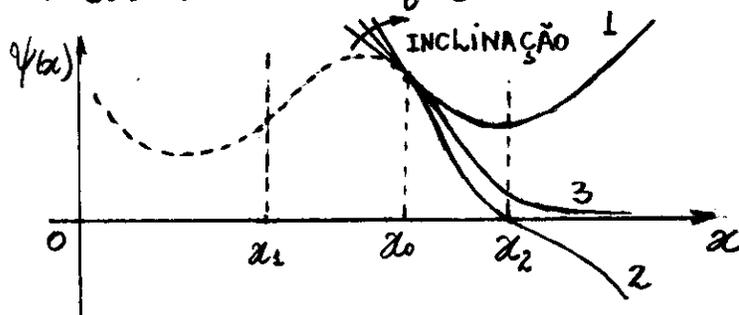


Fig. 5.8 - Três tentativas de obtenção de uma solução aceitável da equação de Schrödinger independente do tempo, para um dado valor da energia total E .

Como tomou-se inicialmente $\psi > 0$ na região entre x_1 e x_2 , então ψ tem inicialmente um ponto de máximo. Ela permanece dessa forma até atingir a 3ª região, $x > x_2$, onde ψ muda de sinal. Deve-se observar que, por ser derivável em todos os pontos do eixo x , a curva deve ser contínua no ponto x_2 de transição clássica. Na região $x > x_2$, ψ começa a crescer em valor até que $\psi \rightarrow \infty$ quando $x \rightarrow \infty$. Assim, esta não é uma solução aceitável.

A curva 2 da Fig. 5.8 mostra outra tentativa feita no sentido de se encontrar uma solução aceitável. Nesta tentativa mudou-se o valor inicial da inclinação de ψ , tal que, ψ torna-se negativa ($\psi < 0$) na região $x > x_2$. Neste caso, a solução também não será aceitável pois $\psi \rightarrow -\infty$ a medida que x cresce. Fica então evidente que, fazendo uma escolha apropriada da inclinação $d\psi(x_0)/dx$ da curva no ponto x_0 entre x_1 e x_2 ou, de acordo com as eqs. (5.66) e (5.67), da energia E , é possível obter uma solução aceitável para a equação diferencial na qual $\psi \rightarrow 0$ quando $x \rightarrow \infty$ tal como mostra na curva 3.

Da discussão acima, deve-se concluir que a solução da equação de Schrödinger independente do tempo é instável por ter uma forte tendência em divergir ($\psi \rightarrow \pm\infty$) nas regiões classicamente proibidas ($E < V$). No entanto, é sempre possível encontrar uma energia E_1 para a qual a equação de Schrödinger tem uma solução aceitável. Na verdade, pode existir uma série de possíveis valores de energias E_1, E_2, E_3, \dots para os quais a equação de Schrödinger tem soluções aceitáveis $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots$. Como se pode vê na Fig. 5.9.

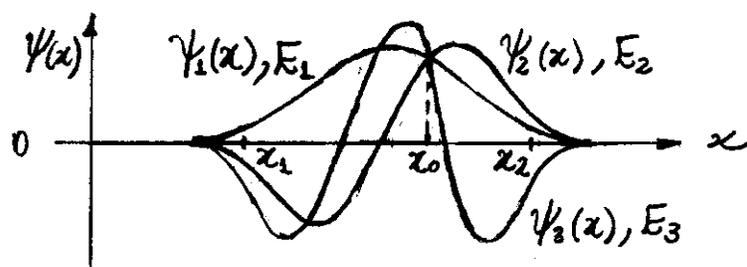


Fig. 5.9 - Três soluções aceitáveis para a equação de Schrödinger independente do tempo.

O comportamento de ψ_2 , para qualquer valor de x , é semelhante ao da função mostrada na curva 3 da Fig. 5.8. Para $x < x_0$, o comportamento de ψ_2 é, em princípio, similar ao comportamento de ψ_1 , mas como sua inclinação é ligeiramente maior em módulo, ψ_2 cruza o eixo x em algum valor entre x_1 e x_0 . Quando isso ocorre, o sinal de $d^2\psi/dx^2$ muda, e a função passa a ter um ponto de mínimo. Em $x = x_1$, o sinal de $d^2\psi/dx^2$ muda novamente e, para $x < x_1$, a função se aproxima gradativamente do eixo x .

A ordem, em magnitude, das energias mostradas na Fig. 5.9, pode ser determinada analisando as inclinações das curvas correspondentes. No ponto x_0 , onde ψ_1 e ψ_2 tem o mesmo valor, a taxa de variação da inclinação de ψ_2 é maior do que a de ψ_1 , isto é,

$$\left| \frac{d^2\psi_2}{dx^2} \right| > \left| \frac{d^2\psi_1}{dx^2} \right| \text{ em } x = x_0. \quad (5.68)$$

Aplicando essa inequação na equação de Schrödinger, dada na eq. (5.63), e usando o fato que $\psi_1 = \psi_2$ em $x = x_0$, obtém-se

$$|E_2 - V(x)| > |E_1 - V(x)| \text{ em } x = x_0.$$

Como $E_1 > V(x)$ e $E_2 > V(x)$ em $x = x_0$, então esta inequação pode ser expressa em os módulos, isto é,

$$E_2 - V(x) > E_1 - V(x)$$

ou

$$E_2 > E_1. \quad (5.69)$$

Com argumentos similares, mostra-se que $E_3 > E_2$ e assim por diante. É evidente que as energias E_1, E_2, E_3, \dots são discretas, uma vez que as funções de onda aceitáveis correspondentes $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots$ assumem somente formas bem definidas.

Assim, para uma partícula que se move sob influência de um potencial $V(x)$ independente do tempo, existem soluções aceitáveis, para a equação de Schrödinger independente do tempo, somente se a energia total da partícula for quantizada. Esse argumento será sempre verdadeiro desde que existam dois pontos x_1 e x_2 tal que $E < V(x)$ para $x < x_1$ e $x > x_2$. Entretanto, se a energia E for maior do que um certo valor limite V_e do potencial $V(x)$, como mostrado na Fig. 5.10, a situação se modifica. Nesse caso, existe somente as duas regiões $x < x_1$ e $x > x_2$. Na 2ª região, $\alpha^2 > 0$ para todos os valores de x , mesmo quando $x \rightarrow \infty$. Assim, a curva ψ contra x terá ponto de máximo se $\psi > 0$ e ponto de mínimo se $\psi < 0$. Ela sempre retorna ao eixo horizontal comportando-se, portanto, como uma função oscilatória.

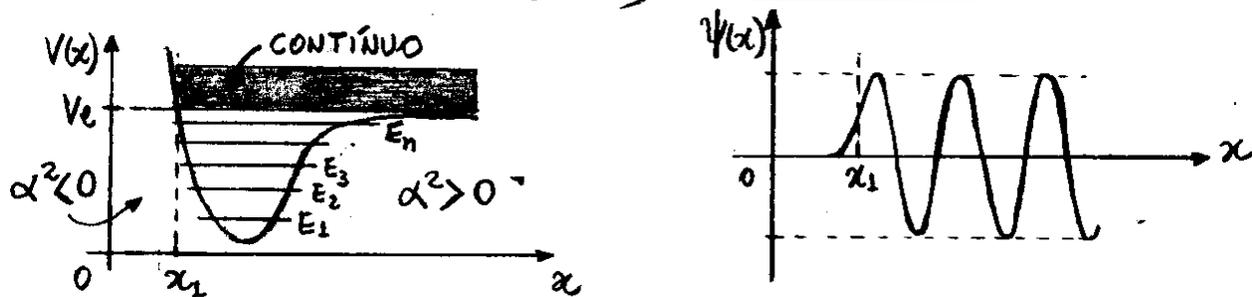


Fig. 5.10 - Contínuo de energia para um potencial caracterizado por apenas duas regiões.

Nesse caso, não haverá o problema de $\psi(x) \rightarrow \infty$ quando $x \rightarrow \infty$. Assim, qualquer função oscilatória $\psi(x)$, com energia correspondente E , será permitida na região $x > x_2$, formando uma distribuição contínua de energia, como mostrado na Fig. 5.10.

Deve-se concluir que, se a relação entre a energia E e o potencial $V(x)$ é tal que a partícula fica confinada numa certa região do espaço, a teoria de Schrödinger prevê uma quantização para a energia total. Por outro lado, se a relação é tal que a partícula não fica confinada, a teoria prevê que qualquer valor para a energia total será possível.

Exemplo 5.5

Usar os argumentos discutidos acima para esboçar a forma da função de onda $\psi(x)$ para o 9º estado de um oscilador harmônico simples, cujo potencial é mostrado na Fig. 5.11.

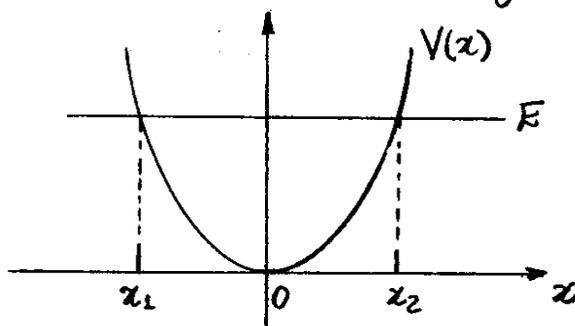


Fig. 5.11 - Comportamento da função energia potencial do oscilador harmônico simples.

Esboçar também a função densidade de probabilidade, $P(x) = |\psi(x)|^2$, para o sistema quântico e compará-lo com que se espera para o oscilador harmônico clássico de mesma energia.

De acordo com a equação de Schrödinger independente do tempo

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)]\psi = -\alpha^2\psi.$$

Na região entre x_1 e x_2 , onde $\alpha^2 > 0$, a autofunção ψ será uma função oscilatória, já que, $d^2\psi/dx^2 < 0$ (ponto de máximo) se $\psi > 0$, e $d^2\psi/dx^2 > 0$ (ponto de mínimo) se $\psi < 0$.

Observa-se na Fig. 5.12 que existem exatamente 9 picos (máximos e mínimos) para a função de onda correspondente ao 9º estado fisicamente aceitável.

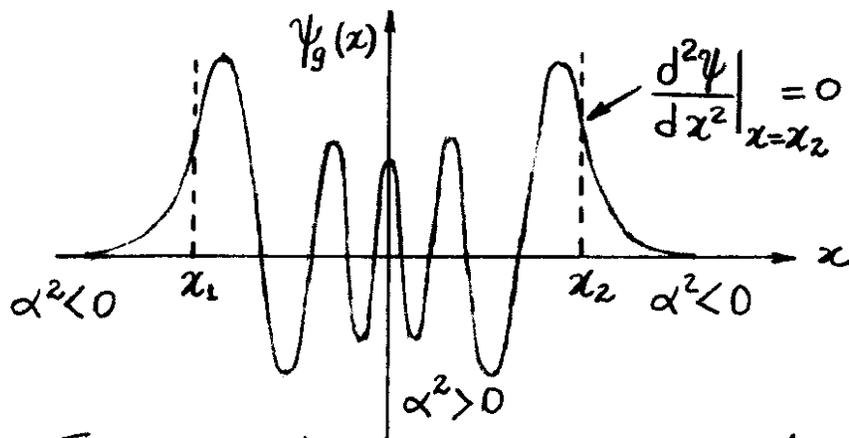


Fig. 5.12 - Função de onda $\psi_9(x)$ para o 9º estado do oscilador harmônico simples.

Como a taxa de variação das oscilações de $\psi(x)$, determinadas por $d^2\psi/dx^2$, proporcional a α^2 , fica menor nas proximidades de x_1 e x_2 , então as oscilações aí devem ser menores do que em $x=0$, onde α^2 é grande, conforme mostrado na Fig. 5.12. A Figura mostra ainda que as amplitudes das oscilações em ψ aumentam nas proximidades de x_1 e x_2 . Isso deve ocorrer para que a taxa de variação da oscilação $d^2\psi/dx^2$, não caia abruptamente a zero, quando $\alpha^2 \rightarrow 0$ na equação de Schrödinger.

Observa-se que ψ se aproxima suavemente do eixo fora da região entre x_1 e x_2 , onde $\alpha^2 < 0$, como é necessário que aconteça para uma autofunção aceitável para um estado ligado, onde não deve ocorrer divergência para $x = \pm\infty$. Observa-se finalmente que ψ cuja os pontos x_1 e x_2 onde α^2 muda de sinal e $d^2\psi/dx^2 = 0$.

A função densidade de probabilidade $P(x) = |\psi(x)|^2$ é basicamente o quadrado de ψ , como mostra a Fig. 5.13.

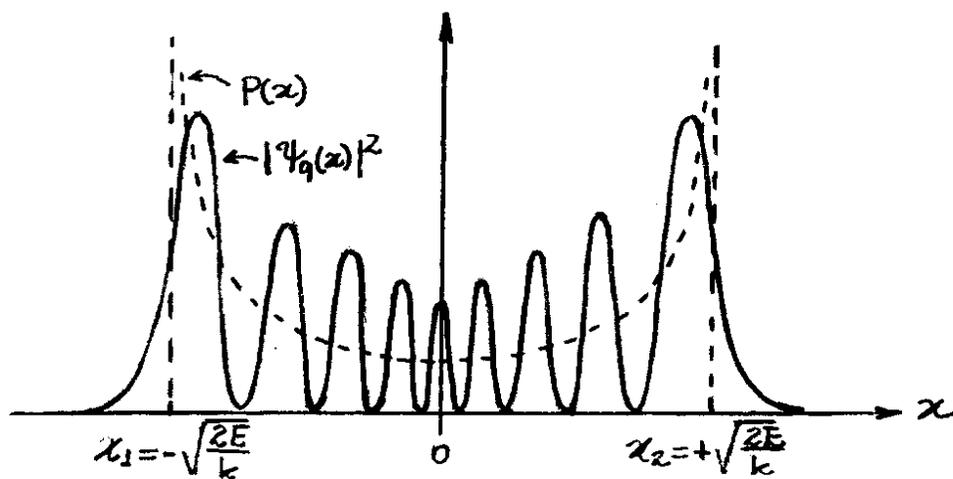


Fig. 5.13 - Densidade de probabilidade $|\psi_9(x)|^2$ para o 9º estado do oscilador harmônico simples.

Na mecânica clássica a densidade de probabilidade P da partícula ser encontrada em um elemento de comprimento do eixo x é proporcional ao tempo que ela permanece no elemento, ou inversamente proporcional a velocidade v com que ela passa por esse elemento, isto é,

$$P = B^2/v \quad (5.70)$$

onde B^2 é uma constante. Por outro lado, para o oscilador harmônico

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2,$$

ou

$$v = \sqrt{\frac{2}{m}} \sqrt{E - \frac{1}{2}kx^2},$$

onde k é a constante elástica. Logo,

$$P = A/\sqrt{E - \frac{1}{2}kx^2}, \quad (5.71)$$

onde $A = B^2\sqrt{m/2}$. A eq. (5.71) descreve então a densidade de probabilidade clássica para o oscilador harmônico e o seu comportamento é mostrado na curva tracejada da Fig. 5.13. Deve-se observar que a partícula macroscópica tem maior probabilidade de estar nos pontos $x_1 = -\sqrt{2E/k}$ e $x_2 = +\sqrt{2E/k}$, obtidos assumindo $P \rightarrow \infty$ na eq. (5.71) pois, nesses pontos, ela para e retorna. No ponto $x=0$ ela tem menor probabilidade de ser encontrada pois, ai, ela passa com maior velocidade.

Lista de Exercícios

Questões conceituais

- 1- Como o postulado de de Broglie entra na teoria quântica de Schrödinger?
- 2- Uma vez que a equação de Schrödinger não é válida para partículas relativísticas, qual seria o efeito sobre a teoria quântica de Schrödinger a definição da energia total, na relação $E = \hbar\omega = \hbar\nu$, se fosse considerado a energia de repouso da partícula.
- 3- A massa m de uma partícula aparece explicitamente na equação de Schrödinger, entretanto a carga elétrica não, embora esta também possam afetar seu movimento. Alguma grandeza que aparecem na equação de Schrödinger embute implicitamente esse parâmetro? Justifique.
- 4- A equação de onda da teoria clássica contém uma segunda derivada espacial e uma segunda derivada temporal. A equação de Schrödinger por outro lado, contém uma segunda derivada espacial e uma primeira derivada temporal. Use esses fatos para explicar por que as soluções de onda clássica podem ser funções reais, enquanto as soluções da equação de Schrödinger devem ser funções complexas.
- 5- No eletromagnetismo, calculamos a intensidade de uma onda tomando o quadrado de sua amplitude. Por que não fazemos exatamente o mesmo com as ondas da mecânica quântica?
- 6- O que é um observável físico? Por que a função de onda ψ não pode assumir um significado físico? Por que o módulo quadrado da função de onda, função densidade de probabilidade, $|\psi|^2$, por outro lado, pode assumir um significado físico e qual é esse significado? A função densidade de probabilidade $|\psi|^2$ pode ser considerado um observável físico? Justifique sua resposta! Por que a função densidade de probabilidade tem que ser real, positiva, finita e definida em todos os pontos? Explique o significado da normalização de uma função de onda!
- 7- Por que a mecânica quântica de Schrödinger fornece apenas informações estatísticas? Em sua opinião, isso se reflete como um fracasso da teoria ou uma propriedade da natureza?
- 8- O que significa o valor esperado de uma grandeza?
- 9- Por que uma autofunção deve ser bem comportada para ser aceitável na teoria quântica de Schrödinger? Por que ψ é necessariamente uma função oscilatória quando $V(x) < E$?

Problemas

- 1- Se as funções de onda $\psi_1(x,t)$, $\psi_2(x,t)$ e $\psi_3(x,t)$ são três soluções da equação de Schrödinger para um potencial particular $V(x,t)$, mostre que a combinação linear arbitrária $\psi(x,t) = c_1\psi_1(x,t) + c_2\psi_2(x,t) + c_3\psi_3(x,t)$ também é uma solução desta equação.
- 2- Considere a função de onda para o **primeiro estado excitado** de uma partícula de massa m que pode se mover livremente sobre o eixo x entre os pontos $x = -a/2$ e $x = +a/2$, mas que está estritamente proibida de ser encontrada fora dessa região:

$$\Psi(x,t) = \begin{cases} A \sin \frac{2\pi x}{a} e^{-iEt/\hbar} & \text{para } -a/2 < x < +a/2 \\ 0 & \text{para } x \leq -a/2 \text{ ou } x \geq +a/2 \end{cases}$$

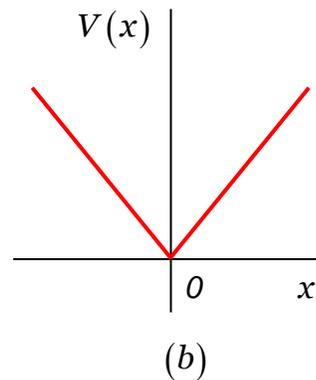
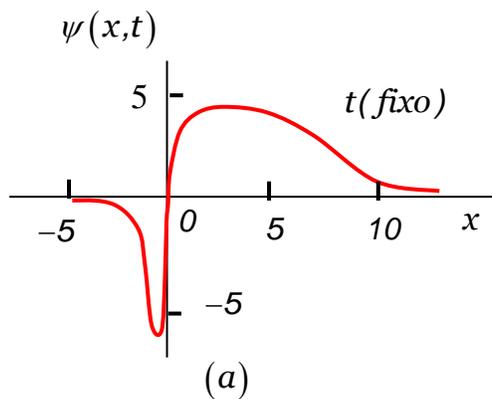
onde A é uma constante real arbitrária e E é a energia total da partícula. (a) Mostre que essa função é uma solução da equação de Schrödinger. (b) Calcule o valor de E para esse primeiro estado excitado, (c) Trace um gráfico da dependência espacial dessa função de onda. (d) Calcule os valores esperados de x , p , x^2 e p^2 da partícula associada a função de onda, (e) Use a condição de normalização para determinar o valor da constante A em termos de a . (f) Use as grandezas calculadas no item (d) para calcular o produto das incertezas $\Delta x \Delta p$ na posição e no momento dessa partícula.

3- A função de onda $\Psi(x,t)$ para o **estado fundamental** de um oscilador harmônico simples constituído de uma partícula de massa m sob ação de uma força restauradora linear de constante elástica k , pode ser escrita como:

$$\Psi(x,t) = \left(\frac{mk}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{1/8} e^{-(\sqrt{km}/2\hbar)x^2} e^{-(i/2)(\sqrt{k/m})t}$$

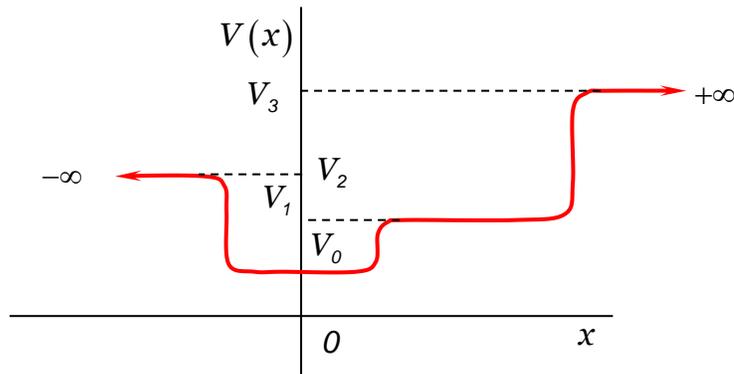
Calcule os valores esperados da energia cinética $K = \frac{p^2}{2m}$ e da energia potencial $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$.

4- Em um certo instante de tempo, uma função de onda depende da posição conforme está mostrado na figura (a) abaixo. (a) Se fosse feita uma medida que possa localizar a partícula associada em um elemento dx do eixo x nesse instante, onde seria maior a probabilidade de encontrá-la? (b) Onde seria menor essa probabilidade? (c) As chances de que ela seja encontrada em qualquer valor positivo do eixo x seriam melhores do que as chances de que seja encontrada em qualquer valor negativo?

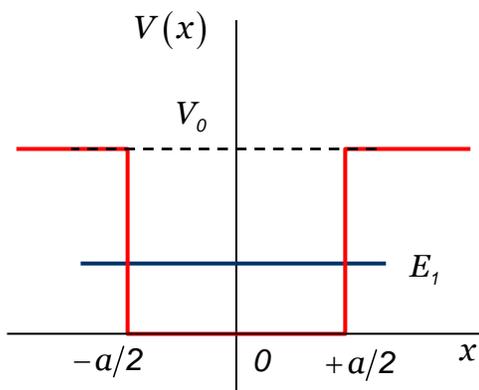


5- Considere uma partícula se movendo sob influência do potencial $V(x) = C|x|$, onde C é uma constante, ilustrado na figura (b) acima. (a) Use argumentos qualitativos para fazer um esboço da primeira autofunção de da décima autofunção para o sistema. (b) Faça um esboço das duas funções densidade de probabilidades correspondentes. (c) Use então a mecânica clássica para calcular as funções densidade de probabilidade prevista por esta teoria. (d) Trace um gráfico das funções densidade de probabilidades clássicas juntamente com as funções densidade de probabilidade quântica, e discuta sua comparação.

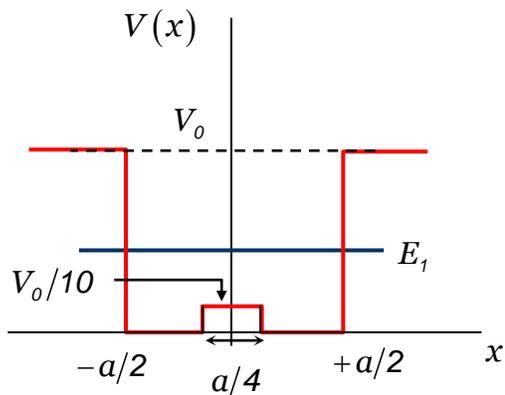
6- Considere uma partícula se movendo no potencial $V(x)$ ilustrado na figura abaixo. Para os seguintes intervalos de valores da energia total E , diga quando há algum valor possível de E , e, se isso ocorrer, se eles são separados discretamente ou distribuídos continuamente. (a) $E < V_0$, (b) $V_0 < E < V_1$, (c) $V_1 < E < V_2$, (d) $V_2 < E < V_3$, (e) $E > V_3$.



7- Considere uma partícula se movendo no potencial $V(x)$ ilustrado na figura (a) abaixo, que tem uma região retangular de profundidade V_0 e largura a , no qual a partícula pode estar ligada. Estes parâmetros estão relacionados com a massa m da partícula de uma forma tal que o estado de menor energia possível E_1 se encontra a uma energia de aproximadamente $V_0/4$ acima do fundo. (a) Use argumentos qualitativos para fazer um esboço da forma aproximada da autofunção correspondente $\psi_1(x)$. (b) Substitua o potencial da região $x > +a/2$ diretamente na equação de Schrödinger independente do tempo para mostrar que nessa região a autofunção tem a forma matemática $\psi(x) = Ae^{-[\sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar]x}$. (c) Use a densidade de probabilidade correspondente a esta autofunção para estimar a distância D fora da região de ligação do potencial na qual haverá uma probabilidade apreciável de encontrar a partícula na região classicamente proibida. (Sugestão: Considere $x = D$ como sendo a distância até o ponto no qual $\Psi^*\Psi$ é $1/e$ vezes o seu valor na borda da região de ligação $x = +a/2$). (d) O potencial dessa figura dá uma boa descrição das forças que atuam sobre um elétron se movendo através de um metal. A diferença de energia $V_0 - E$, para o elétron mais fracamente ligado ao metal, é a função trabalho do metal. Tipicamente, $V_0 - E \approx 5eV$. Use esse dado para estimar o valor da distância D estima no item (c).



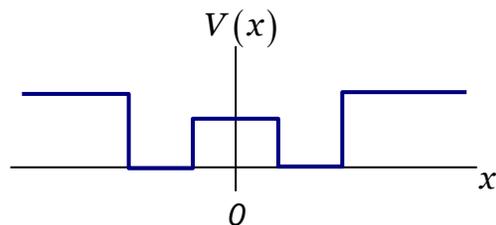
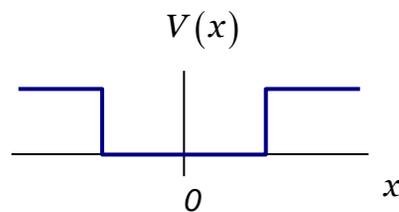
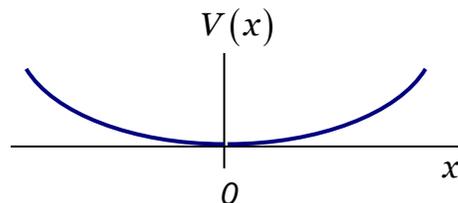
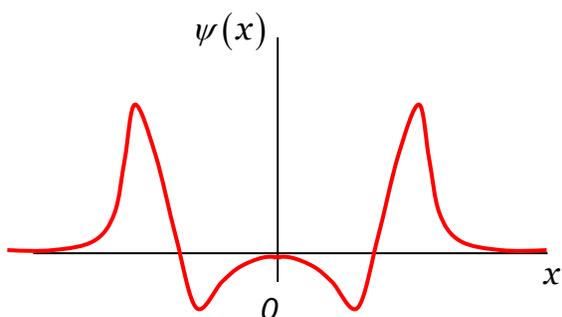
(a)



(b)

8- Suponha que o fundo da função potencial da questão anterior seja modificado pela adição de uma saliência no centro, de altura aproximadamente $V_0/10$ e largura $a/4$, como mostra a figura (b) acima. Considere qualitativamente o que ocorre com a curvatura da autofunção na região da saliência, e como isso afetará o problema de obter um comportamento aceitável para a autofunção na região externa ao poço. A partir dessas considerações, faça uma previsão, de forma qualitativa, do efeito da saliência sobre o valor da menor energia possível E_1 .

9- Considere a autofunção ilustrada na figura abaixo. (a) Qual dos três potenciais ilustrados na mesma figura poderia levar a tal autofunção? Dê argumentos qualitativos que justifiquem sua resposta. (b) Essa autofunção não é associada ao estado de menor energia possível para o potencial. Esboce a autofunção que corresponde ao estado de menor energia. (c) Indique em outro esboço o intervalo de energias no qual você esperaria estados de energia possíveis discretos e o intervalo de energias no qual você esperaria que os estados de energia possíveis fossem distribuídos continuamente.



10- Usando as duas primeiras funções de onda normalizadas $\Psi_1(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{\pi x}{a} e^{-iE_1 t/\hbar}$ e $\Psi_2(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{2\pi x}{a} e^{-iE_2 t/\hbar}$, para uma partícula se movendo livremente e confinada em uma região de comprimento a , construa a combinação linear $\Psi(x,t) = c_1 \Psi_1(x,t) + c_2 \Psi_2(x,t)$. Obtenha então uma relação em função das constantes ajustáveis c_1 e c_2 que, quando satisfeitas, garanta que $\Psi(x,t)$ seja normalizada.