

A Equação de Schrödinger - I

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL. Instituto de Física. Departamento de Física. Física do Século XXB (FIS1056). Prof. César Augusto Zen Vasconcellos. **Lista 10** (*Site: www.cesarzen.com*)

Tópicos. Estados Físicos na Mecânica Quântica. Interpretação Probabilística na Mecânica Quântica. Necessidade de uma Equação de Onda. Propriedades da Equação de Schrödinger. Princípios da Mecânica Quântica.

Introdução

A Mecânica Quântica compreende o estudo de sistemas físicos cujas dimensões são próximas ou abaixo da escala atômica (ou seja, moléculas, átomos, elétrons, prótons e outras partículas subatômicas).

A Mecânica Quântica é um ramo fundamental da física com aplicações nos mais variados campos do conhecimento e, em especial, no desenvolvimento das mais modernas tecnologias. A teoria quântica representa, em muitos aspectos, uma espécie de generalização da mecânica clássica, fornecendo descrições plausíveis para fenômenos de natureza corpuscular, que ocorrem em escalas microscópicas e sub-microscópicas, tais como a radiação de corpo negro, a natureza das órbitas estáveis do elétron, a origem da energia de ligação de um núcleo, entre muitos outros.

Há porém efeitos específicos da mecânica quântica que não são somente perceptíveis em escalas microscópicas como, por exemplo, os

fenômenos da superfluidez¹ e da supercondutividade².

A denominação *mecânica quântica* se deve, como sabemos, ao fenômeno da discretização de determinadas propriedades físicas como no caso, por exemplo, de um elétron atômico que ocupa um estado quantizada de energia; este resultado difere do resultado correspondente previsto pela teoria clássica.

A palavra *quântica* (do latim *quantum*) caracteriza, de maneira geral, quão expressiva é uma quantidade; a palavra se refere porém, na mecânica quântica, como sabemos, a uma porção discreta atribuída a certas quantidades físicas, como a energia de um fóton de luz. Foi a descoberta de que as ondas eletromagnéticas podem ser explicadas como uma emissão de pacotes de energia chamados de quanta (o plural de quantum) que conduziu à mecânica quântica. A mecânica quântica é a base teórica e experimental de vários campos da física e da química, incluindo a física da matéria condensada, a física do estado sólido, a física atômica, a física molecular, a química computacional, a química quântica, a física de partículas e a

¹A superfluidez consiste em um estado anômalo de líquidos, de natureza quântica, que se encontram sob uma temperatura muito baixa, de tal forma que este estado apresenta as seguintes características: viscosidade nula ou quase nula (superfluidez); transmissão de calor anormalmente elevada.

²Supercondutividade é uma propriedade física que é característica de certos materiais os quais apresentam altos níveis de condução de corrente elétrica, sem apresentar resistências nem perdas ao fluxo de corrente, funcionando ademais como um diamagneto perfeito abaixo de uma temperatura chamada de crítica.

física nuclear.

Estados Físicos na Mecânica Quântica

Em física, denominamos com a palavra *sistema* a um ‘fragmento’ da realidade, fragmento este que é ‘separado’ para estudo. Dependendo do caso, a palavra sistema pode referir-se por exemplo a um elétron ou a um próton, a um átomo de hidrogênio ou ao átomo de urânio, a uma molécula isolada ou a um conjunto de moléculas interagentes formando um sólido ou vapor, entre muitas outras possibilidades.

A especificação de um sistema físico compreende a predição, por meio de uma abordagem teórica baseada em modelos da realidade, de valores numéricos que caracterizem suas propriedades físicas, e a subsequente ou pré-existente determinação, confirmação ou negação, por meio da experimentação, destas predições. É importante ressaltar que sistemas físicos podem evoluir com o tempo.

Isto significa dizer que um dado sistema, submetido à idênticas fases de preparo para uma dada realização experimental, pode dar origem a resultados experimentais distintos, dependendo do instante de tempo em que uma determinada medida é realizada. Essa idéia conduz a um conceito fundamental na mecânica quântica: o conceito de estado.

Um estado é uma forma abstrata de representação das propriedades físicas de um sistema em função do tempo. Neste contexto, cada sistema, ou componente de um sistema, ocupa, em um dado instante de tempo, um estado. E às leis da física compete ‘regular’ como o sistema evolui, de um estado a outro, com o passar do tempo.

Por outro lado, variáveis que são bem determinadas na mecânica clássica, são substituídas, na mecânica quântica, por grandezas cuja determinação esta associada à uma interpretação probabilística da natureza. Isto porque, no mundo quântico nos deparamos

com aspectos que são essencialmente distintos daqueles encontrados no mundo clássico. Dentre estes ressaltamos: a existência de processos não determinísticos e irreversíveis e o fenômeno do entrelaçamento quântico. Estes aspectos serão discutidos mais adiante.

Interpretação Probabilística na Mecânica Quântica

A Interpretação Probabilística da Mecânica Quântica da Escola de Copenhague representa a mais conceituada visão do mundo quântico.

Os conceitos essenciais desta interpretação física originaram-se dos trabalhos de Niels Bohr³, Werner Heisenberg⁴ Wolfgang Pauli⁵, e outros. De acordo com estas concepções, a mecânica quântica não descreve uma realidade objetiva e sim probabilidades de observação, ou de mensuração, de determinados aspectos relacionados aos fenômenos do mundo quântico, cujas entidades não obedecem as idéias clássicas da física.

A base para esta interpretação probabilística reside no Princípio da Incerteza de Werner Heisenberg que estabelece a relação entre as incertezas associadas às grandezas momentum linear, Δp_x , e posição instantânea, Δx , de uma partícula em movimento:

$$\Delta p_x \Delta x = m \Delta v_x \Delta x \geq \frac{h}{4\pi} = \frac{\hbar}{2}, \quad (1)$$

onde, por simplicidade, consideramos uma partícula não relativística, de massa m , se propagando com velocidade v_x na direção x . Ou seja, este princípio estabelecia a impossibilidade da determinação experimental precisa, da trajetória de uma partícula subatômica, na medida em que não se pode determinar, com a

³O dinamarquês Niels Henrik David Bohr (1885 - 1962), ganhador do Prêmio Nobel de física de 1922.

⁴O alemão Werner Karl Heisenberg (1901 - 1976), vencedor do Prêmio Nobel de física de 1932.

⁵O austríaco Wolfgang Ernst Pauli (1900 - 1958), vencedor do Prêmio Nobel de física de 1945.

mesma precisão e de maneira simultânea a sua velocidade e a sua posição instantânea.

O Princípio de Heisenberg, conhecido também como Desigualdade de Heisenberg, levou os cientistas da época a questionarem as noções de então sobre espaço, tempo e movimento de partículas elementares introduzindo um novo conceito, o de aleatoriedade do movimento destas partículas em nível quântico. Como resultado buscou-se então uma nova forma de olhar o universo quântico, que seria, deste ponto de vista, aleatório e portanto indeterminado. Nascia assim o conceito de indeterminismo⁶ quântico que se opõe à uma visão determinística clássica.

E esta foi a base então para o surgimento da interpretação probabilística da mecânica quântica da Escola de Copenhagen. De acordo com esta interpretação, o ato de medir causa, em nível quântico, o chamado *colapso da função de onda*. Voltaremos a este tema mais adiante.

A função de onda é uma representação matemática (simbólica), que descreve, na mecânica quântica, a amplitude de probabilidade associada ao estado quântico de uma partícula elementar ou de um sistema de partículas elementares. Sua representação mais conhecida para uma partícula tem a forma de uma função complexa dependente de posição e tempo, $\psi(x, t)$.

As leis da mecânica quântica descrevem como uma função de onda evolui ao longo do tempo. A evolução temporal da função de onda de uma partícula elementar não relativística é descrita pela equação de

Schrödinger. A equação de Schrödinger apresenta similaridades matemáticas com as correspondentes equações diferenciais que descrevem a evolução temporal de outros tipos de fenômenos ondulatórios, como por exemplo a propagação de ondas na água ou em uma corda. Devido a estas similaridades surgiram as denominações *equação de onda* e *função de onda*. Mas é importante ressaltar ao leitor que embora existam similaridades entre estes fenômenos e entre as equações diferenciais que os descrevem, há dissimilaridades relevantes entre a descrição clássica e a mecânica quântica.

Voltamos ao tema do colapso da função de onda. De acordo com a interpretação probabilística da mecânica quântica da Escola de Copenhagen, o ato da medição experimental de propriedades quânticas observáveis de uma partícula elementar ou de um sistema de partículas elementares faz com que o conjunto de probabilidades associadas a um conjunto de observáveis se reduza, de forma imediata mas aleatória, a apenas um dos valores possíveis. Este fenômeno, conhecido como colapso da função de onda, estabelece então, em outras palavras, a redução das inúmeras possibilidades físicas descritas por ψ em uma única possibilidade, após interação do sistema com um aparato observacional.

O papel do observador (ou equivalentemente, de um aparato experimental) adquire assim, para a Escola de Copenhagen, papel fundamental na interpretação dos fenômenos quantum-mecânicos.

Para sua melhor compreensão, lembramos que a dualidade onda-partícula, ou seja, a propriedade que revela a natureza dual dos objetos quânticos, que apresentam características tanto de partículas como de ondas, está relacionado a um outro princípio quântico, o Princípio da Complementaridade, enunciado por Niels Bohr. Segundo esse princípio, as características ondulatórias e de partícula de um

⁶Relatos de Hermann Diels (em *Doxographi Graeci*, publicado em 1879) dão conta que Leucipo, filósofo da cidade de Mileto já havia elaborado uma concepção indeterminística para descrever o movimento dos átomos. Segundo estes relatos, Leucipo havia escrito, no século V aC: “O cosmos foi formado ..., gerando ... uma forma esférica devida ao movimento aleatório e imprevisível dos átomos”.

objeto quântico são complementares e nunca se manifestam de maneira simultânea, ou seja, em um experimento em que a natureza ondulatória de um objeto quântico se manifestar, suas características de partícula não serão observadas e vice-versa.

No caso da experiência da fenda dupla, os resultados experimentais revelam que assim que é determinada a trajetória do elétron incidente, aspecto este que representa um conceito típico das partículas elementares, o padrão de interferências, que é um conceito tipicamente ondulatório, desaparece completamente. Estes fatos trazem consigo um novo paradigma: a interferência do observador, ou seja, da pessoa que realiza o experimento, enquanto agente ativo e fundamental para a compressão de processos físicos no universo quântico, tornando impossível a realização de um experimento sem que ocorram interferências deste com o objeto observado. No exemplo clássico acima, ao observarmos a trajetória do elétron, “destruímos” sua natureza ondulatória.

Uma forma de explicar o fenômeno do colapso da função de onda parte do pressuposto que um evento quantum-mecânico qualquer, cuja evolução temporal é descrita pela amplitude de probabilidade, ou função de onda, ψ , a função probabilidade associada a ψ é dada por

$$P = |\psi|^2, \quad (2)$$

na medida em que probabilidades devem ser caracterizadas por grandezas reais e positivas (lembrar que ψ pode ser representada por uma função complexa). Um outro aspecto a ser considerado é que se um evento pode ocorrer de duas formas distintas, caracterizadas respectivamente pelas funções de onda ψ_1 e ψ_2 , a função de onda resultante é dada pela soma

$$\Psi = \psi_1 + \psi_2, \quad (3)$$

e a correspondente função de probabilidade deve ser dada por

$$|\Psi|^2 = |\psi_1 + \psi_2|^2. \quad (4)$$

Desta expressão resulta

$$|\Psi|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + \psi_1\psi_2^* + \psi_1^*\psi_2. \quad (5)$$

Portanto, o resultado da equação acima indica a presença do fenômeno de interferência ondulatória, fenômeno este caracterizado pela presença dos termos $\psi_1\psi_2^*$ e $\psi_1^*\psi_2$.

De outro lado, os resultados do experimento de fenda dupla, onde a interferência ondulatória foi suprimida pelo processo de observação indicam que ao fazermos uma medida que permita determinar de qual das duas maneiras o evento ocorreu, perdemos a interferência ondulatória, e a probabilidade ao final é dada por

$$P = P_1 + P_2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2. \quad (6)$$

Estes resultados devem ser generalizados no caso de um número maior de formas de ocorrência de um evento. Em suma, o ato de medir “destrói” a interferência quântica, causando o colapso da função de onda. Ou seja, o efeito de observar o estado de um sistema quântico traz, como consequência, que esse estado seja modificado. Assim, na mecânica quântica, o observador não ocupa um papel passivo, tornando-se parte, também, do sistema físico em observação, interagindo portanto com o objeto de estudo e alterando, devido à esta interação, algumas de suas propriedades físicas originais.

Necessidade de uma Equação de Onda

A necessidade de uma equação de onda se impõe porque desejamos descrever não somente os casos mais simples de propagação de partículas elementares livres como também os seus processos de interação com outras partículas ou sistemas físicos. Ou seja, desejamos construir uma equação que descreva como o estado quântico de um sistema físico, por mais complexo que seja, evolui no tempo.

E a equação de Schrödinger, em especial, contempla, como veremos, uma lógica evolutiva, que é intrínseca, bem como a possibilidade de inserção em sua estrutura formal de informações, dados e correlações observados na dinâmica de partículas elementares, possibilitando assim a construção de um modelo teórico eficiente.

Seguimos assim procedimentos já consagrados na mecânica clássica, onde a equação de movimento que descreve a evolução temporal de sistemas físicos é conhecida como segunda lei de Newton. Lembramos ademais que a mecânica clássica contempla também formulações equivalentes à lei de Newton, como por exemplo as equações de Euler-Lagrange e as equações de Hamilton. Na mecânica quântica existem também formulações equivalentes à de Schrödinger, ou seja, as formulações quânticas de Werner Heisenberg e Richard Feynman. O aspecto comum a todas estas formulações reside no fato de se buscar descrever, por meio de equações dinâmicas, o movimento, ou evolução temporal, de um sistema quântico, sejam átomos, moléculas ou partículas elementares.

A equação de Schrödinger é usualmente representada por uma equação diferencial parcial e linear da função de onda do sistema, também chamada de vetor de estado.

Na interpretação mais convencional, conhecida como interpretação padrão, a função de onda representa a descrição mais completa possível de um sistema regido pelas leis da mecânica quântica.

Na mecânica clássica a descrição completa de um sistema físico consiste no conhecimento da posição instantânea e da velocidade de cada uma das partículas do sistema de modo que as equações de Newton possam descrever, de maneira insofismável, ou seja, com certeza absoluta, a evolução temporal destas partículas. Portanto, na mecânica clássica é possível, a partir do conhecimento das posições e veloci-

dades de um conjunto de partículas do sistema, reconstituir suas trajetórias no passado e prever sua evolução temporal no futuro. Esta propriedade da mecânica de Newton é conhecida como determinismo clássico.

No mundo quântica, como vimos anteriormente no estudo do Princípio da Incerteza de Heisenberg, nos deparamos com a impossibilidade da determinação experimental precisa da trajetória de uma partícula subatômica, na medida em que não se pode determinar, com a mesma precisão e de maneira simultânea a sua velocidade e a sua posição instantânea. Nascia assim o conceito de indeterminismo quântico que se opõe como vimos à visão determinística clássica.

Esto fato, da impossibilidade de se poder atribuir, ao mesmo tempo, a uma partícula em movimento, valores precisos de posição instantânea e velocidade, exige repensarmos o conceito de trajetória, conceito este fundamental na descrição da evolução temporal de uma partícula na mecânica clássica. Max Born introduziu à época um conceito relacionado à função de onda que substitui a idéia de trajetória clássica: a função de onda, expressa em termos da posição instantânea da partícula e do tempo, representaria uma medida da probabilidade de se encontrar a partícula em determinada posição e em determinado tempo. Esta interpretação é hoje a mais aceita pela Escola de Copenhagen. No contexto desta interpretação, a descrição dinâmica de um sistema quântico tem como pressuposto o conhecimento de sua função de onda.

Propriedades da Equação de Schrödinger

Consideremos inicialmente apenas a propagação de uma partícula não-relativística livre. A equação que descreve a propagação da partícula deve ser linear e seus coeficientes devem envolver somente constantes como, por

exemplo, \hbar , m (massa da partícula) e q (carga elétrica da partícula). Isto porque: em sendo linear, a equação possibilita a utilização do princípio da superposição e com isto a construção de pacotes de ondas⁷; ao conter como coeficientes apenas constantes, a equação não dependerá, em forma paramétrica, de grandezas que caracterizam um particular movimento de uma partícula como, por exemplo, uma dependência destes coeficientes em valores específicos de momentum, energia, número de propagação (número de onda) e frequência angular. Isto possibilita que soluções que caracterizem diferentes valores destas grandezas possam ser consideradas; em suma, guiados pela necessidade de generalização, desejamos eliminar dos coeficientes da equação qualquer dependência paramétrica em energia, momentum linear, número de onda e frequência angular, pois uma solução geral não pode ser função de parâmetros cinemáticos específicos particulares.

Princípios da Mecânica Quântica

1. Princípio da superposição. Na mecânica quântica, o estado de um sistema físico é definido pelo conjunto de todas as informações que podem ser extraídas desse sistema ao se efetuar alguma medida. Além disso, na mecânica quântica os estados podem ser representados por vetores em um espaço vetorial complexo denominado de *espaço de Hilbert* e repre-

⁷Como veremos mais adiante, a construção de pacotes de onda é fundamental para a realização, na mecânica quântica, da dualidade onda-partícula. Isto porque os pacotes de onda possibilitam, de uma feita, que as soluções da equação de Schrödinger descrevam aspectos ondulatórios típicos da propagação de ondas e, ao mesmo tempo, a redução drástica da extensão destas ondas, restringindo seus efeitos a pequenas porções do espaço, típico da propagação de partículas elementares cuja dimensões estão restritas a valores não maiores do que 0,8768 femtômetro, que é o tamanho do próton.

sentado por H . Assim, cada vetor no espaço H representa um estado que poderia ser ocupado pelo sistema. Ademais, dados dois estados quânticos quaisquer, a soma algébrica, ou superposição linear desses estados representa também um estado. Esta concepção é denominada de princípio da superposição. Os vetores de estado são chamados ‘kets’. Ademais, na matemática, são denominados de funcionais todas as funções lineares que associam vetores de um espaço vetorial qualquer a um escalar. É sabido que os funcionais dos vetores de um espaço também formam um espaço, que é chamado espaço dual. Os funcionais - elementos do espaço dual - são chamados de ‘bras’. A representação mais convencional de ‘bras’ e ‘kets’ (notação de Dirac) é a seguinte:

$$\langle \psi | \text{ e } | \psi \rangle. \quad (7)$$

2. Medida de grandezas físicas. Este princípio estabelece que dada uma grandeza física, associamos a ela um operador linear e um observável; observável é o nome dado ao autovalor de um operador. Ademais, este princípio estabelece que dado um estado no qual o sistema se encontra no momento em que efetuamos a medida de uma grandeza física do sistema, estado este descrito por um ket, os únicos estados possíveis do sistema são aqueles que contemplam os autovalores dos observáveis correspondentes.
3. Evolução do sistema. Este princípio estabelece que a evolução do sistema ao longo do tempo, é regida pela equação de Schrödinger.

No texto seguinte apresentamos a formulação de Schrödinger e suas aplicações.