

EE300 - CAPÍTULO 5

EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER

Romis Attux, Cristiano C. Cruz, Diogo C. Soriano

FEEC/UNICAMP, segundo semestre de 2012

Capítulo 5 – A Equação de Schrödinger

5.1 – A Equação de Schrödinger e seu Significado

Conforme vimos nos capítulos anteriores, a noção de dualidade mudou dramaticamente nossa maneira de encarar as idéias de radiação e matéria. No entanto, ainda havia “muita coisa no ar” após o trabalho de Einstein sobre o fóton e o de Broglie acerca das “ondas-guia”. Faltava um formalismo que fosse suficientemente abrangente, um pilar semelhante ao que são as leis de Newton para a mecânica ou as equações de Maxwell para o eletromagnetismo.

Werner Heisenberg formulou, em 1925, uma abordagem que ficou conhecida como *mecânica das matrizes* [Born, 1986]. Nessa abordagem, de cujo desenvolvimento também participaram Max Born e Pascual Jordan, variáveis como posição e momento linear são representadas através de matrizes, operadores não-comutativos. Essa característica dá suporte à existência de aspectos quânticos como as próprias incertezas que discutimos no capítulo anterior.

Uma outra formulação foi proposta por um físico austríaco, Erwin Schrödinger. Sua abordagem, que é mais acessível matematicamente, tem por essência uma equação diferencial cuja solução é a famosa função de onda Ψ (*psi*). Tal função é, em termos simples, uma expressão matemática do caráter ondulatório de uma partícula, algo que se buscava, como vimos, desde a proposta de de Broglie¹.

A partir da equação de Schrödinger, é possível obter soluções capazes de fornecer informações fundamentais sobre o comportamento de uma partícula-onda. Nela, são contempladas até mesmo as influências de forças externas, o que marca um nítido avanço em relação à proposta de de Broglie. Como afirma Krane em [Krane 1983], a equação de Schrödinger tem um papel análogo, na Mecânica Quântica, ao desempenhado na Física Clássica pela segunda lei de Newton, que relaciona, através de uma equação diferencial, força e posição de uma partícula. No contexto newtoniano, a aplicação da segunda lei descortina o futuro e o passado de uma partícula ou mesmo de um sistema de partículas. Analogamente, resolver a equação de Schrödinger conduz ao conhecimento da evolução temporal e espacial da forma de onda associada a uma partícula qualquer. No entanto, a função Ψ não permite, em conformidade com o princípio da incerteza, que se determine com precisão arbitrária qualquer grandeza associada à partícula. O estudo da função de onda, como veremos, é uma grande fonte de informação estatística.

Para que cheguemos à equação de Schrödinger, é importante que façamos algumas hipóteses. Primeiramente, analisaremos apenas uma partícula não-relativística, ou seja, suporemos que são válidas as expressões clássicas do momento e da energia cinética. Além disso, exigiremos que a equação seja linear, ou seja, que se Ψ_1 e Ψ_2 são soluções, então $\Psi = a_1.\Psi_1 + a_2.\Psi_2$ também é solução. Nesse caso, permite-se uma superposição de funções de onda que fornece uma explicação para padrões de interferência como os observados nos experimentos de Davisson-Germer, por exemplo. É de se esperar também que a função de onda seja “bem-comportada” matematicamente, ou seja, não apresente um comportamento descontínuo [Krane, 1983]. Por fim, como lidamos com ondas, também é muito razoável buscar uma

¹ Como mostrou o próprio Schrödinger, sua formulação é equivalente àquela contida na mecânica das matrizes. Essa conclusão põe em evidência a importância dos esforços teóricos dos pioneiros dos quanta. Doravante, ater-nos-emos exclusivamente à equação de onda.

equação que forneça soluções com componentes senoidais, capazes de fazer emergir um “caráter ondulatório”.

Esqueçamos as dimensões y e z e pensemos apenas na dimensão x e na dimensão temporal t . Com base em todas essas considerações (e mais algumas que veremos depois), pode ser postulada a seguinte equação diferencial:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} \quad (5.1)$$

sendo $\hbar = h/2\pi$, m a massa da partícula, $V(x,t)$ a energia potencial, i a raiz de -1 e $\Psi(x,t)$ a desejada função de onda. A equação mostra que o conhecimento de $V(x,t)$ é o ponto crucial: a partir dele, recorreremos a (5.1) para obter a função de onda, da mesma forma que na mecânica clássica precisávamos conhecer a força exercida sobre a partícula para que fosse determinada sua posição em todos os momentos.

Se supusermos que a função de onda tem uma dependência do tipo:

$$\Psi(x,t) = \psi(x) \cdot \phi(t) \quad (5.2)$$

e que a energia potencial depende apenas de x , pode-se mostrar que $\phi(t)$ deverá obedecer, a partir de (5.1), a uma equação de primeira ordem do tipo:

$$i \frac{\hbar}{2\pi} \frac{d\phi(t)}{dt} = C\phi(t) \quad (5.3)$$

sendo C um valor a determinar. A equação tem como solução funções do tipo:

$$\phi(t) = \exp(-2\pi i C t / \hbar) \quad (5.4)$$

A equação (5.4) revela que a função $\phi(t)$ apresenta uma dependência simples com relação ao tempo. Falta ainda determinar $\psi(x)$, o que fazemos através da equação de Schrödinger independente do tempo:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (5.5)$$

sendo E a energia total da partícula (cinética = $mv^2/2$ + potencial). É possível mostrar ainda que a constante C de (5.3) e (5.4) deve ser justamente igual a E .

A suposição feita em (5.2) é muito usual na resolução de equações diferenciais parciais, de modo que, nos exemplos que discutiremos, concentrar-nos-emos na solução de (5.5), e não de (5.1). Com isso, trabalharemos num ambiente dotado de maior simplicidade matemática.

Podemos afirmar que a primeira etapa de análise corresponde basicamente ao trabalho de “quantificar” $V(x)$. O próximo passo, a obtenção de ψ , é puramente matemático. Resta a questão final: como interpretar o resultado obtido?

Max Born, em 1926, propôs uma interpretação da função Ψ que ganhou ampla aceitação no meio científico e é da maior relevância até os dias de hoje. Basicamente, ele afirmou que [Eisberg, 1961]:

Num instante t qualquer, a probabilidade de que a partícula associada à função de onda $\Psi(x,t)$ esteja numa posição qualquer entre x e $x+dx$ é dada por:

$$P(x,t)dx = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx = |\Psi(x,t)|^2 dx \quad (5.6)$$

Eis uma visão das ondas associadas a uma partícula que, num primeiro momento, é sobremaneira perturbadora: o módulo ao quadrado da função Ψ é uma densidade de probabilidade relacionada à posição de uma partícula!

Uma vez que se assume que o módulo ao quadrado de Ψ é uma densidade de probabilidade, ele deve obedecer à condição usual

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1 \quad (5.7)$$

Como $\phi(t)$ tem módulo unitário (é uma exponencial complexa), no caso da equação independente do tempo, a condição se reduz a

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (5.8)$$

como indica (5.2). Já temos uma primeira condição sobre nossa função de onda.

Suponhamos agora que estejamos lidando com a equação independente do tempo e queiramos conhecer a probabilidade de a partícula estar localizada entre as posições $x = x_1$ e $x = x_2$. Pela própria definição de densidade de probabilidade, teremos:

$$p(x) = |\psi(x)|^2 \Rightarrow P(x_1 \leq x \leq x_2) = \int_{x_1}^{x_2} |\psi(x)|^2 dx \quad (5.9)$$

Se quisermos conhecer a posição média da partícula, basta fazer:

$$E[x] = \int_{-\infty}^{\infty} x.p(x)dx \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} x|\psi(x)|^2 dx \quad (5.10)$$

Paremos para refletir um pouco, após tantos resultados. Buscamos obter uma equação que descrevesse adequadamente o caráter ondulatório associado a uma partícula qualquer. Construimos essa equação e terminamos por chegar também a uma interpretação estatística muito forte para a função de onda obtida, interpretação, aliás, crucial dentro da “visão de mundo” quântica. É interessante notar o que nos fornece a equação de Schrödinger: podemos conhecer, em cada instante de tempo, a densidade de probabilidade relacionada à localização de uma partícula (e poderíamos deduzir também a densidade de outra grandeza, como o momento linear). Não temos mais, como na Física Clássica um conhecimento completo e determinístico, mas sim um conhecimento de natureza randômica. Comprovações experimentais das previsões obtidas a partir de (5.1) podem envolver, por exemplo, múltiplas realizações de um experimento, que conduziriam, em tese, a uma distribuição de resultados comparável ao módulo ao quadrado da função de onda.

Uma lei fundamentalmente estatística, uma visão probabilística de mundo. Einstein jamais se sentiu à vontade com essa situação, como atesta a célebre frase “Deus não joga dados”. O grande físico acreditava que a Física Quântica era apenas uma teoria de transição, um modelo que seria suplantado por uma teoria mais completa em que não

haveria lugar para as indesejáveis restrições estatísticas ao conhecimento do mundo [Pais, 1995]. Tal teoria, até agora, é apenas o sonho de alguns.

5.2 – Aplicações da Equação de Schrödinger

Após esta discussão introdutória, passemos à aplicação da equação a algumas situações representativas.

5.2.1 – A Partícula Livre

O primeiro desafio é obter $\psi(x)$ para uma “partícula livre”, ou seja, alheia à influência de forças externas ($F=0$). Como temos, em uma dimensão:

$$F = -dV(x)/dt \quad (5.11)$$

devemos ter $V(x) = \text{constante}$. Podemos então fazer:

$$V(x) = 0 \quad (5.12)$$

o que nos leva, a partir de (5.5) a:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \Rightarrow \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2\psi(x) \quad (5.13)$$

sendo $k^2 = 2mE/\hbar^2$. A solução geral para (5.13) é do tipo:

$$\psi(x) = A.\text{sen}(kx) + B.\text{cos}(kx) \quad (5.14)$$

uma onda senoidal pura. A energia, de (5.13), vale:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (5.15)$$

Como não há restrições para o valor de k , a energia não é quantizada. Como $V(x) = 0$, E é simplesmente a energia cinética. Na física clássica, a relação entre energia cinética e momento linear é simplesmente $E_c = p^2/2m$, o que nos permite inferir que o momento linear da partícula será:

$$p = \hbar k = \frac{\hbar}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{h}{\lambda} \quad (5.16)$$

Ora, isso é o que esperávamos à luz da proposta de de Broglie! Não obstante, surge um problema: como aplicar (5.8) a (5.14)? A integral não pode ser determinada, o que significa que perde o sentido a própria idéia de normalização². Esse impasse desapareceria se supuséssemos a superposição de várias frequências, que produziria um pacote de onda como o mostrado na Fig. 4.8 do capítulo anterior.

² De certa maneira, a suposição de que a partícula é livre nos conduziu a uma solução em que o momento é bem-determinado e a posição é totalmente incerta (não há potenciais que a restrinjam).

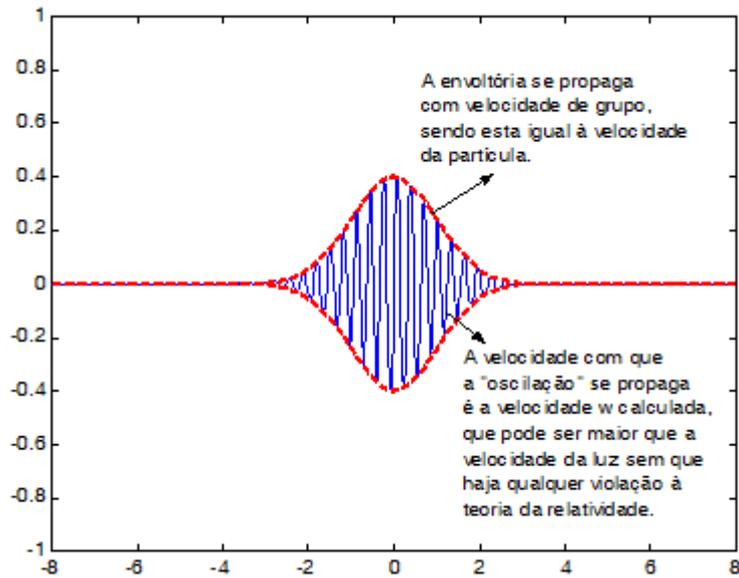


Figura 4.8 (Reproduzida neste capítulo por simplicidade)

5.2.2 – O Poço de Potencial Infinito

Voltemo-nos agora para um caso mais interessante: o de uma partícula confinada em um poço de potencial com paredes de “altura” infinita. A Fig. 5.1 traz um diagrama esquemático:

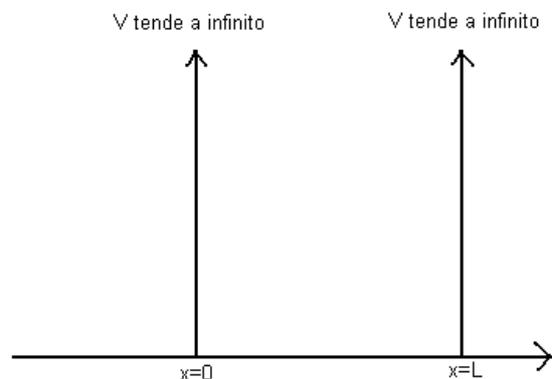


Figura 5.1: Poço de Potencial Infinito

Temos, portanto:

$$V(x) = 0, \text{ para } 0 \leq x \leq L \text{ e } V(x) \rightarrow \infty, \text{ para } x \leq 0 \text{ e } x \geq L \quad (5.17)$$

Pela altura infinita dos “muros”, podemos afirmar que não há nenhuma chance de a partícula estar fora do poço entre $x = 0$ e $x = L$. Assim,

$$\psi(x) = 0, \text{ para } x \leq 0 \text{ e } x \geq L \quad (5.18)$$

Dentro do poço, temos $V(x) = 0$ e a mesma solução do caso da partícula livre, vide equações (5.14) e (5.15). No entanto, temos algumas condições a aplicar. A primeira é que a função $\psi(x)$ seja nula nos limites do poço, para evitar descontinuidades em relação a (5.18). Dessa maneira, temos de impor as condições [Krane, 1983]

$$\psi(0) = A.\text{sen}(0) + B.\text{cos}(0) = 0 \Rightarrow B = 0 \quad (5.19)$$

e

$$\psi(L) = A.\text{sen}(kL) + B.\text{cos}(kL) = 0 \quad (5.20)$$

Aplicando a condição $B = 0$, obtida em (5.19), a (5.20), chegamos a

$$A. \text{sen}(kL) = 0 \quad (5.21)$$

Para fugir de uma solução trivial, resta-nos fazer:

$$\text{sen}(kL) = 0 \quad (5.22)$$

Portanto, temos que kL deve assumir os valores π , 2π , 3π e assim por diante. Matematicamente³:

$$kL = n\pi, n = 1, 2, 3, \dots \quad (5.23)$$

O que temos em (5.23)? Basicamente, que a solução da equação de Schrödinger para um poço infinito nos fornece uma série de “ondas estacionárias de de Broglie”, cujos comprimentos de onda devem obedecer à relação:

$$\lambda = 2L/n, n = 1, 2, 3, \dots \quad (5.24)$$

Há, portanto, uma curiosa analogia entre ψ e, por exemplo, as ondas produzidas pela corda de um violão. Interessante, sem dúvida!

A partir de (5.23) e de (5.15), obtemos:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} \quad (5.25)$$

Neste caso, a energia é quantizada, ou seja, só podem ser assumidos valores de energia pertencentes a um repertório discreto [Ohanian, 1995]. Como a energia é puramente cinética, há um conjunto discreto de velocidades permitidas para a partícula (no entanto, cada velocidade pode ter ambos sentidos, o que ainda mantém uma incerteza)! Isso quer dizer que nossa partícula confinada não pode se mover com uma velocidade qualquer, o que não tem paralelo no mundo clássico. O número quântico n indica, por assim dizer, em que estado estacionário está a partícula. O estado com $n = 1$ é chamado de *estado fundamental (ground state)*, e os demais são *estados excitados (excited states)*.

Já fizemos bastante, mas ainda falta determinar a constante A . Para tanto, façamos uso da condição (5.8):

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow A^2 \int_0^L \text{sen}^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}} \quad (5.26)$$

³ Note o leitor que o valor nulo e valores negativos são desprezados.

Finalmente, temos a solução definitiva:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{L}x\right), 0 \leq x \leq L \quad (5.27)$$

Se fizermos $L = 1$ e $n = 1$, obtemos as funções $\psi(x)$ e $|\psi(x)|^2$ mostradas na Fig. 5.2.

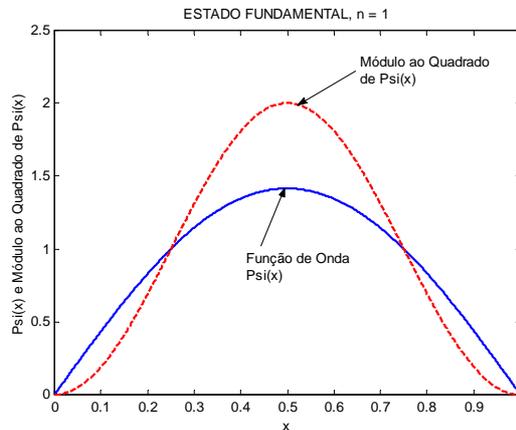


Figura 5.2: Estado Fundamental

Para $n = 2$, temos:

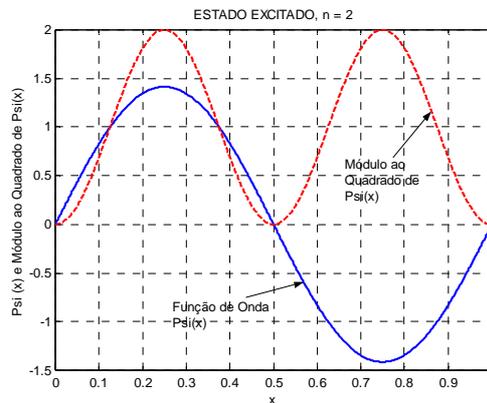


Figura 5.3: Estado Excitado, n = 2

Para $n = 3$, temos:

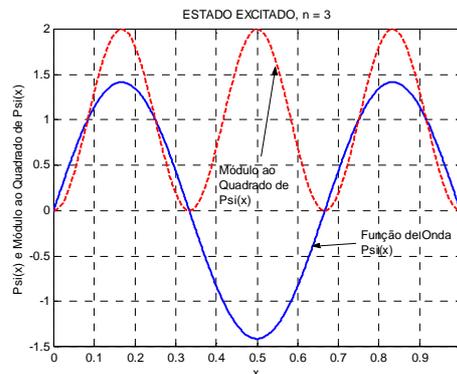


Figura 5.4: Estado Excitado, n = 3

Alguns aspectos muito interessantes merecem nossa atenção. Vemos nitidamente nos gráficos que as funções de onda são “ondas estacionárias”, como já antecipara a análise matemática previamente empreendida. Vemos também que, para cada estado de energia, há uma configuração probabilística distinta, o que também não é surpreendente.

Algo interessante pode ser visto nas duas últimas figuras. Na Fig. 5.3, por exemplo, vemos que a probabilidade de a partícula estar em uma vizinhança infinitesimal de $x = 0.5$ é nula. No entanto, ela tem uma probabilidade não-nula de estar nas regiões $x < 0,5$ e $x > 0,5$. Ora, somos obrigados a aceitar que, de certa maneira, ela “pode transitar” entre as duas regiões sem jamais estar em uma vizinhança infinitesimal de $x = 0.5$! [Krane, 1983] Isso parece muito estranho, mas precisamos nos lembrar que a estranheza do mundo quântico decorre da natureza de nossa intuição, moldada segundo a concepção clássica de partícula.

5.3 – O Efeito Túnel

Algumas vezes, ouvimos falar que a Física Quântica prevê que as partículas podem se comportar como fantasmas, atravessando “paredes de potencial” mais altas do que sua própria energia. A clássica analogia é com uma pessoa que corre contra uma parede e, miraculosamente, consegue atravessá-la. Nesta seção, procuraremos discutir de maneira mais formal esse curioso cenário, que se relaciona com o denominado *efeito túnel*.

Até agora, supusemos que a função $V(x)$ era infinita ou nula. Apesar disso, em muitos casos de interesse, devemos considerar que essa função tem a forma de uma “barreira”, como mostra a Fig. 5.5.

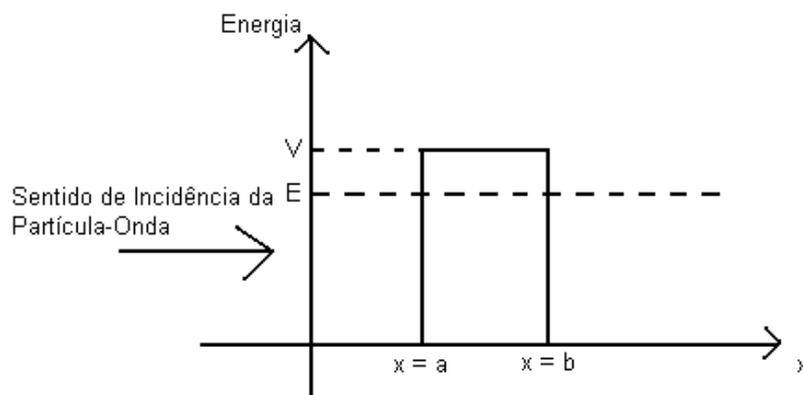


Figura 5.5: Barreira Finita de Potencial

Na figura, E é a energia da partícula e V a energia potencial da barreira entre $x = a$ e $x = b$. Como vemos, a partícula não tem energia suficiente para romper a barreira e chegar à região $x > b$.

Porém, se resolvermos a equação de Schrödinger para $V(x)$ como na Fig. 5.5, é possível mostrar que há uma probabilidade não-nula de a partícula, mesmo com $E < V$, estar na região $x > b$. Novamente, temos uma ruptura com o mundo clássico, onde isso não poderia acontecer em hipótese alguma. Como pode uma partícula com energia menor que V ultrapassar a barreira? Ora, toda estranheza está justamente no emprego do conceito de “partícula”. Caso pensemos em uma onda, a coisa não é tão estranha assim, como tentaremos mostrar adiante.

A probabilidade de uma partícula onda com energia E ultrapassar a barreira é dada, aproximadamente, por [Halliday e Resnick, 1994]⁴:

$$T \approx \exp(-2KL) \quad (5.28)$$

sendo L a largura da barreira ($L = b-a$) e

$$K = \sqrt{\frac{8\pi^2 m(V-E)}{h^2}} \quad (5.29)$$

Podemos fazer uma analogia entre T e o coeficiente de transmissão de uma “onda clássica” que incide sobre um meio qualquer. Essa analogia condiz exatamente com a abordagem da mecânica ondulatória, para a qual a partícula nada mais é que um pacote de ondas que incide sobre uma barreira e pode, portanto, ser transmitido.

Percebemos que é tão mais fácil “tunelar” por uma barreira quanto menor for a diferença de energia $V - E$ e a largura L , o que é bastante intuitivo. Resta então perguntar: a Física Quântica burlou a conservação da energia? Uma resposta bastante engenhosa pode ser dada com base na segunda relação de incerteza estudada no capítulo 4, a saber:

$$\Delta E \cdot \Delta t \approx h \quad (4.11)$$

Assim, é possível, no efeito túnel, que se burla a conservação da energia por uma quantidade $\Delta E = V - E$, desde que o tempo decorrido nesta transgressão não exceda o intervalo Δt esperado de (4.11) [Halliday e Resnick, 1994]. Em termos simples, mesmo a noção de conservação da energia está sujeita às indeterminações de Heisenberg.

Para que não nos sintamos completamente perdidos nesse novo mundo, vale lembrar que o efeito túnel ocorre também para ondas luminosas. Analisemos o experimento descrito na Fig. 5.6.

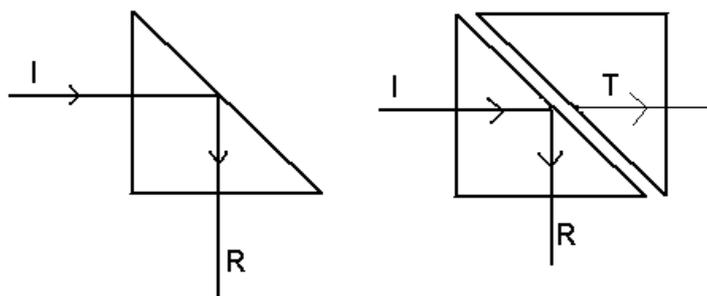


Figura 5.6: “Efeito Túnel” em Ondas Clássicas

Temos um prisma de vidro imerso no ar. No primeiro caso, um raio incidente na interface vidro-ar sofre reflexão total, ou seja, nada é transmitido pela interface. Entretanto, quando um segundo prisma de vidro é aproximado, fazendo com que o *gap* entre as duas interfaces vidro-ar seja pequeno, então a configuração de reflexão total é destruída, havendo a transmissão de uma parcela da luz pela interface do primeiro prisma, ao contrário do que ocorria antes. [Halliday e Resnick, 1994, Krane, 1983] Isso

⁴ A aproximação é sólida para pequenos valores de T .

quer dizer que, quando se impôs uma barreira (*gap*) finita, houve um coeficiente de transmissão não-nulo. Parece-nos estranho, pois temos a impressão que o raio, de alguma forma, “percebe” se poderá ou não atravessar a barreira, como que sentindo a presença do prisma. Na realidade, uma análise das equações do eletromagnetismo explicam o ocorrido sem sobressaltos.

Halliday e Resnick [Halliday e Resnick, 1994] sugerem um experimento simples para verificar a ocorrência de tunelamento em ondas clássicas. O que eles propõem é que se incline um copo cheio de água até que os raios de luz que chegam aos nossos olhos sejam provenientes de reflexão total nas paredes do copo. Nesta situação, veremos a parede prateada. Devemos então umedecer um dedo e apertá-lo contra a parede do copo, pelo lado de fora. Neste caso, iremos ver, contra o fundo prateado, nossas impressões digitais, com as regiões de ranhura do dedo ainda prateadas. Isto quer dizer que vemos as regiões do dedo que estavam mais juntas à parede do copo (menor *gap*), enquanto as regiões mais distantes (ranhuras), que tem um *gap* ainda muito grande, permanecem invisíveis.

O efeito túnel tem muitas aplicações práticas, dentre as quais destacamos o *microscópio de tunelamento de varredura* e o *díodo túnel*.

Bibliografia do Capítulo 5:

[Böhr 1996] **N. Böhr**, *Física Atômica e Conhecimento Humano: Ensaio (1932-1957)*, Contraponto, 1996.

[Born 1986] **M. Born**, *Física Atômica*, Fundação Calouste Gulbenkian, 1986.

[Eisberg 1961] **R. Eisberg**, *Fundamentals of Modern Physics*, Wiley, 1961.

[Halliday e Resnick 1994] **D. Halliday, R. Resnick**, *Fundamentos da Física*, LTC, 1994.

[Heisenberg 1995] **W. Heisenberg**, *Física e Filosofia*, Editora UnB, 1995.

[Krane, 1983] **K. Krane**, *Modern Physics*, Wiley, 1983.

[Ohanian 1995] **H. Ohanian**, *Modern Physics*, Prentice Hall, Second Edition, 1995.

[Pais, 1995] **A. Pais**, *Sutil é o Senhor: a Ciência e a Vida de Albert Einstein*, Nova Fronteira, 1995.

[Serway 1990] **R. Serway**, *Physics for Scientists and Engineers*, Saunders College Publishing, Third Edition, 1990.