

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS – UFG  
CAMPUS DE CATALÃO – CaC  
DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICA – DM**

**ESPECIALIZAÇÃO EM MATEMÁTICA**

**EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER**

por

**André Luis de Souza Neto**

Catalão – GO  
Julho/2006

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS – UFG  
CAMPUS DE CATALÃO – CaC  
DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICA – DM**

**ESPECIALIZAÇÃO EM MATEMÁTICA**

**EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER**

por

**André Luis de Souza Neto**

Trabalho apresentado em cumprimento as  
exigências para a obtenção do título de  
especialista em Matemática da Universidade  
Federal de Goiás - Campus de Catalão

Catalão – GO  
Julho/2006

*Viver é como andar de  
bicicleta. Para manter o equilíbrio é  
preciso continuar se movendo.  
(Einstein)*

*Dedico este trabalho a  
meu filho Samuel e minha amada esposa  
Luciane.*

## **AGRADECIMENTOS**

- Ao professor Cleves Mesquita Vaz pela orientação e apoio.
- Ao Departamento de Matemática do Campus de Catalão pela possibilidade de estar aperfeiçoando os conhecimentos
- A todos os amigos que me fizeram acreditar na nobreza da alma humana.
- A coordenação de Pós Graduação do Departamento de Matemática do Campus de Catalão.

## AVALIAÇÃO DO TRABALHO MONOGRÁFICO

Após o exame da Monografia do(a) aluno(a) **ANDRÉ LUÍS DE SOUZA NETO**, atribuímos os seguintes conceitos:

Conteúdo: \_\_\_\_\_

Forma: \_\_\_\_\_

Avaliação Geral: \_\_\_\_\_

Média: \_\_\_\_\_

Catalão, julho de 2006.

A Banca:

---

Orientador da Monografia  
Prof. Cleves Mesquita Vaz

---

Membro da Banca  
Prof. José Madson Caldeira de Faria

---

Membro da Banca  
Prof. Donald Mark Santee

## SUMÁRIO

RESUMO	viii
ABSTRACT	ix
1. INTRODUÇÃO	01
2. FORMULAÇÃO	06
2.1. A Equação de Schrödinger	06
2.2. Exemplo	15
3. DETERMINAÇÃO DA DENSIDADE DE PROBABILIDADE $ \psi ^2$	16
3.1. Exemplo	19
4. O PRINCÍPIO DE INCERTEZA	21
4.1 Exemplo	23
4.2 Valores Esperados	25
5. O GATO DE SCHRODINGER	26
6. APLICAÇÃO: O OSCILADOR HARMÔNICO	30
7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	37

## **RESUMO**

Um dos grandes triunfos da Física no século XX é sem dúvida, a Mecânica Quântica. Apesar da quantização ter obtido sucesso na explicação de diversos fenômenos físicos, a idéia de uma teoria baseada em postulados que não tinha embasamento matemático e que utilizava argumentos clássicos para justificar-se ao mesmo tempo que os contrariava, levou a diversas tentativas de uma formulação mais apropriada, chegando assim, à Mecânica Quântica. Nesse trabalho abordaremos a formulação de Schrödinger da Mecânica Quântica e mostraremos como esta formulação é capaz de explicar (tanto do ponto de vista qualitativo, quanto do ponto de vista quantitativo) sem o auxílio de postulados ou suposições vagas, os diversos fenômenos da Física Quântica.

**Palavras-chave: Schrödinger, Mecânica, Física Quântica.**

## **ABSTRACT**

One of the great triumphs of the Physics in century XX is without a doubt, the Quantum Mechanics. Despite the quantization having gotten success in the explanation of diverse physical phenomena, the idea of a theory based on postulates that mathematical basement did not have and that it used classic arguments to justify itself at the same time that opposed them, took the diverse attempts of a more appropriate formularization, thus arriving, to the Quantum Mechanics. In this work we will approach the formularization of Schrödinger of the Quantum Mechanics and will show as this formularization is capable to explain (in such a way of the qualitative point of view, how much of the quantitative point of view) without it assists of postulates or vacant assumptions, the diverse phenomena of the Quantum Physics.

**Keyword: Schrödinger, Mechanics, Quantum Physics.**

## 1. INTRODUÇÃO

Viena, no começo do século XX, era uma cidade alegre e despreocupada. Tomava-se muito chá com bolo em superlotadas confeitarias. Ouvia-se muita valsa e muita opereta de *Strauss*. Como toda a Europa, Viena vivia gozando as delícias da "*belle époque*".

Nesse cenário de poesia, algumas pessoas mais sensíveis preferiam ficar à margem, pois eram capazes de sentir o leve odor de decadência que emanava daquelas frivolidades mundanas e da melancolia dos parques barrocos no outono. Especialmente um jovem loiro, de modos simples, temperamento moderado e olhos muito vivos, que ali nascera a 12 de agosto de 1887. Ele contemplava a comédia que se desenrolava à sua volta, certamente com uma ponta de sutil ironia, posto que era extremamente inteligente e começava a tomar contato com alguns problemas graves na ciência que escolhera para especializar-se. E passaria a ser um dos protagonistas do que Einstein chamou "o grande drama das idéias".

O drama começara noutro tempo e noutro cenário. O prólogo foi escrito 2300 anos antes por Aristóteles, quando formulou a doutrina segundo a qual todo movimento está ligado a uma força: quando esta cessa de agir, o corpo chega à imobilidade. Era uma concepção puramente intuitiva que seria posta em xeque no século XIV, com o trabalho de Buridan e outros cientistas da Escola de Paris. Transcorreriam ainda três séculos para que fosse definitivamente destronada, encerrando a pré-história da física.

O primeiro ato, propriamente dito, seria escrito no século XVII com a figura gigantesca de Galileu, que inicia a mecânica clássica, e Isaac Newton, que constrói um sólido edifício cuja coluna de sustentação é a lei da inércia. Sobre esse alicerce firme e uma rigorosa metodologia experimental e matemática, os físicos puderam elaborar uma mecânica que está na base de todo o conhecimento do Universo. A astronomia de Laplace levou-a ao seu máximo esplendor.

O cenário do drama estava, agora, pintado em cores mais amenas. Mas não iria continuar assim por muito tempo. Outros fenômenos, como os eletromagnéticos e os da propagação do calor e da luz, iriam entrar em cena, abrindo uma crise. Entre a mecânica newtoniana e a nova mecânica havia uma diferença essencial: enquanto esta última se refere a "meios contínuos", a primeira, que abrangia astros e projéteis balísticos, falava em "pontos materiais" descontínuos. Essa diferença iria causar sérias dificuldades. Apesar disso, tal era a perfeição da mecânica clássica e tão espetaculares os seus resultados, que os físicos puseram-se a aplicá-la aos novos campos.

Entre eles, James Clerk Maxwell (1831-1879) conseguiu colocar alguma ordem na física das ondas eletromagnéticas, encontrando as equações que regulavam todos os fenômenos conhecidos, nesse campo, com a mesma segurança com que as de Newton descreviam os fatos da astronomia.

A crise, entretanto, irrompeu quando as equações de Maxwell se revelaram incapazes de tratar tanto os fenômenos eletromagnéticos e mecânicos nos quais os movimentos tinham velocidade próxima à da luz, quanto os fenômenos da física microscópica.

James Clerk Maxwell, que nasceu no mesmo ano em que Faraday descobriu a lei de indução, morreu com idade de 48 anos, 1879, ano do nascimento de Einstein. Maxwell gastou a maior parte de sua curta mais altamente produtiva vida, tentando dar uma base teórica às experiências de Faraday. É conveniente ressaltar que Einstein desenvolveu a teoria da Relatividade através de um aprofundamento das conseqüências das Equações de Maxwell.

Einstein, grande admirador de Maxwell, uma vez escreveu sobre ele: "Imagine o que ele sentiu quando verificou que as ondas eletromagnéticas propagam-se com a velocidade da luz".

As principais equações da Teoria de Campo são:

número	Nome	Equação	Descreve
I)	Lei da eletricidade de Gauss	$\oint E \cdot dA = \frac{q}{\epsilon_0}$	Carga e campo elétrico
II)	Lei do magnetismo de Gauss	$\oint B \cdot dA = 0$	O campo magnético
III)	Lei da Faraday	$\oint E \cdot ds = -\frac{d\Phi_B}{dt}$	O campo elétrico produzido por um campo magnético variável.
IV)	Lei de Ampère-Maxwell	$\oint B \cdot ds = \mu_0 \epsilon_0 \frac{d\Phi_E}{dt} + \mu_0 i$	O campo magnético produzido por um campo elétrico variável ou por uma corrente ou por estas duas causas.

Abria-se assim a oportunidade para que outros protagonistas entrassem em cena, a fim de mudar o curso da ação. Um deles, chamado Albert Einstein, encarregou-se da questão dos movimentos dos corpos que se aproximam da velocidade da luz. A partir das equações de Maxwell, foi levado à crítica das idéias de espaço e tempo e formulou a teoria da relatividade.

O outro era aquele jovem loiro, de modos simples, temperamento moderado e cujos olhos vivos começavam a esconder-se atrás de lentes em armação de ouro. Chamava-se Erwin Schrödinger.



Fig.1 - Erwin Schrödinger

O papel que lhe ficara reservado na trama era resolver a impossibilidade de tratar os fenômenos microscópicos por meio das equações da mecânica clássica. Esse problema podia ser formulado assim: por que os elétrons deviam mover-se apenas em órbitas com certos valores definidos e distintos da energia e do momento angular?

Nenhuma particularidade da estrutura das equações clássicas permitia a explicação do fato. As hipóteses formuladas por Bohr e Sommerfeld pareciam adequadas para solucionar o problema particular do átomo de hidrogênio, mas não para construir uma teoria que abrangesse todos os fenômenos microscópicos.

Schrödinger encontrou a pista para a solução no trabalho de Louis de Broglie. Este físico francês tinha, em 1924, descoberto o duplo comportamento da matéria. Um elétron, por exemplo, pode comportar-se ora como partícula material, ora como feixe de ondas, e o comprimento destas dependem de sua quantidade de movimento. A matéria apresenta-se, portanto, sob dupla forma, como corpúsculo ou como onda. A relação estabelecida por de Broglie, no entanto, descrevia apenas o comprimento de onda das partículas, não

estabelecendo sua equação fundamental. De qualquer modo, estava ali a chave com a qual Schrödinger iria abrir as portas para a criação da mecânica quântica.

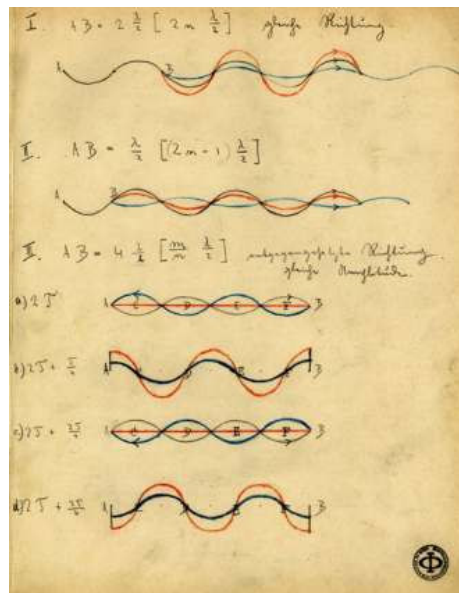


Fig. 2 - Manuscritos de Schrödinger

Em sua inteligência astuta, surgiu uma interrogação: se as partículas microscópicas comportam-se como ondas, quando se movem no espaço, porque então não procurar descrever seu movimento de ondas, ao invés de átomos, e abandonar completamente o caminho seguido pelas equações newtonianas da mecânica dos pontos materiais, encontrando para esse movimento equações do tipo das de Maxwell?

Com esse fio condutor, Schrödinger lançou-se ao trabalho, tentando identificar, no comportamento das partículas, as propriedades que permitissem estabelecer sua equação de onda. Chegou então à famosa equação que tomou seu nome, vindo a ser a fórmula básica da mecânica ondulatória, e valendo-lhe a obtenção do prêmio Nobel, juntamente com o físico inglês Paul Dirac, em 1933.

## 2. FORMULAÇÃO

### 2.1 A Equação de Schrödinger

O primeiro problema que temos não é como resolver uma certa equação diferencial, e sim como encontrar essa equação. Isto é, estamos na situação em que Newton se encontrava ao procurar a equação diferencial.

$$F = \frac{dp}{dt} = m \frac{d^2x}{dt^2} \quad (2.1)$$

Que é a equação básica da mecânica clássica, ou na situação de Maxwell se encontrava quando procurava as equações diferenciais como

$$\frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (2.2)$$

E que formam a base do eletromagnetismo clássico.

A equação de onda para a mola esticada pode ser obtida a partir da lei de Newton, e a equação da onda eletromagnética pode ser obtida a partir das equações de Maxwell; mas não pode esperar que sejamos capazes de obter a equação de onda da Mecânica Quântica à partir de qualquer equação da Mecânica Clássica. No entanto, podemos esperar algum auxílio dos postulados de *De Broglie-Einstein*

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad \nu = \frac{E}{h} \quad (2.3)$$

que relacionam o comprimento de onda com o momento  $p$  da partícula associada, e também a frequência  $\nu$  da função de onda com a energia total  $E$  da partícula, para caso de um partícula com  $p$  e  $E$  essencialmente constantes.

Ou seja, a equação de onda da mecânica quântica que procuramos deve ser consistente com esses postulados, e vamos utilizar essa consistência exigida para ao tentar obtê-la. As Eq. (2.3), e mais outras que teremos razões para aceitar, farão parte de um argumento que se propõe a fazer com que a equação de onda da mecânica quântica pareça bastante razoável, mas deve ser enfatizado que esse argumento não constitui uma dedução.

Na análise final, a equação de onda da mecânica quântica será obtida por meio de um postulado, cuja justificativa não foi inteiramente deduzida a partir de informações já conhecidas experimentalmente, mas sim que prevê corretamente resultados que podem ser verificados experimentalmente.

Começamos nosso argumento fazendo uma lista de quatro hipóteses razoáveis relacionadas com as propriedades desejadas da equação de onda da mecânica quântica:

- 1) Ela deve ser consistente com os postulados de *De Broglie-Einstein*, Eq. (2.3):

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad \text{e} \quad v = \frac{E}{h}$$

- 2) Ela deve ser consistente coma equação

$$E = \frac{p^2}{2m} + V \quad (2.4)$$

Que relaciona a energia total  $E$  de uma partícula de massa com sua energia cinética  $p^2 / 2m$  e sua energia potencial  $V$ .

- 3) Ela deve ser linear em  $\Psi(x,t)$ . Isto é, se  $\Psi_1(x,t)$  e  $\Psi_2(x,t)$  são duas soluções diferentes da equação para uma dada energia potencial, então qualquer combinação linear arbitrária dessas soluções,  $\Psi(x,t) = c_1\Psi_1(x,t) + c_2\Psi_2(x,t)$ , também é um solução.

Esta combinação é dita linear porque envolve a primeira potência de  $\Psi_1(x,t)$  e  $\Psi_2(x,t)$ ; é dita arbitrária porque as constantes  $c_1$  e  $c_2$  podem ter valores quaisquer.

Esta exigência de linearidade garante que podemos somar funções de onda para produzir as interferências construtiva e destrutivas que são tão características de ondas. Fenômenos de interferência são lugar comum para ondas eletromagnéticas; todas as figuras de difração da física ótica são compreendidas em termos de adição de ondas eletromagnéticas. Mas a experiência de Davisson e Germer, além de outra, mostrou que figuras de difração também são encontradas no movimento de elétrons e outras partículas. Portanto, suas funções de onda também exibem interferência, logo devemos poder somá-las.

4) A energia potencial  $V$  é em geral uma função de  $x$ , e possivelmente até de  $t$ . No entanto, há um caso especial importante no qual

$$V(x,t) = V_0 \quad (2.5)$$

Este é exatamente o caso da partícula livre, já que a força atua sobre a partícula é dada por

$$F = \frac{-\partial V(x,t)}{\partial x} \quad (2.6)$$

O que implica em  $F = 0$  se  $V_0$  é uma constante. Neste caso a lei do movimento de Newton nos diz que o momento  $p$  da partícula será constante, e também que sua energia total  $E$  será constante. Temos aqui uma partícula livre com valores constantes de

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad \text{e} \quad v = \frac{E}{h}$$

Que terá soluções de onda senoidal

$$\Psi(x,t) = \text{sen}2\pi\left(\frac{x}{\lambda} - vt\right) \quad (2.7)$$

Usando as relações de *De Broglie-Einstein* da hipótese 1 para escrever a equação da energia da hipótese 2 em termos de  $\lambda$  e  $v$ , obtemos:

$$\frac{h^2}{2m\lambda^2} + V(x,t) = hv \quad (2.8)$$

Introduzindo as grandezas:

$$K = \frac{2\pi}{\lambda} \quad \text{e} \quad w = 2\pi v \quad (2.9)$$

A grandeza  $k$  é chamada de número de ondas angular ( vetor de onda, para duas ou mais dimensões) e a grandeza  $w$  é conhecida por frequência angular. Introduzindo-as, obtemos

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(x,t) = \hbar w \quad (2.10)$$

Onde  $\hbar \equiv \frac{h}{2\pi}$  é a constante de Planck dividida por  $2\pi$ . Para satisfazer as hipóteses 1 e 2, a equação de onda que procuramos deve ser consistente com a Eq. (2.7).

Para satisfazer à hipótese 3, de linearidade, é necessário que cada termo na equação diferencial seja linear em  $\Psi(x,t)$ , isto é, seja proporcional à primeira potência de  $\Psi(x,t)$ . Observe que qualquer derivada de  $\Psi(x,t)$  tem essa propriedade. Por exemplo, se considerarmos o valor de  $\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}$  que resulta quando, multiplicarmos o valor da expressão por um fator de  $c$ , vemos

que a derivada cresce pelo mesmo fator e é portanto proporcional à primeira potencia da função. Isto é verdadeiro já que

$$\frac{\partial^2 [c\Psi(x,t)]}{\partial x^2} = c \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} \quad (2.11)$$

Onde  $c$  é uma constante qualquer, para que a própria equação diferencial seja linear em  $\Psi(x,t)$ , ela não pode conter nenhum termo independente de  $\Psi(x,t)$ , isto é, que seja proporcional a  $[\Psi(x,t)]^0$ , ou que seja proporcional a  $[\Psi(x,t)]^2$  ou qualquer potência superior. Após obter essa equação, vamos demonstrar explicitamente que ele é linear em  $\Psi(x,t)$ , e no processo a validade dessa afirmação se tornará evidente.

Usando a hipótese 4, que se relaciona com a forma da solução para a partícula livre. Como é sugerido pela hipótese, devemos primeiro tentar escrever uma equação contendo a função de onda senoidal, Eq. (2.7), e/ou derivadas dessa função de onda. Observando as derivadas da Eq. (2.7), vemos que o efeito de tomar a segunda derivada espacial é introduzir um fator de  $-k^2$ , e o efeito de tomar a primeira derivada temporal é de introduzir um fator de  $-w$ .

Como a equação diferencial que procuramos deve ser consistente com a Eq. (2.10) que contem um fator de  $k^2$  em um termo e um fator de  $w$  em outro, esses fatos sugerem que a equação diferencial temporal de  $\Psi(x,t)$ . Mas deve também haver um termo contendo um fator de  $V(x,t)$ , pois ele esta presente na Eq. (2.10). De forma a garantir a linearidade, esse termo deve conter um fator de  $\Psi(x,t)$ . Organizando todas essas idéias, temos a seguinte forma para a equação diferencial

$$\alpha \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) = \beta \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} \quad (2.12)$$

As constante  $\alpha$  e  $\beta$  tem valores que ainda devem ser determinados. Aliás são utilizadas para fornecer a flexibilidade que será necessária para ajustar a Eq. (2.12) às varias exigências que ela deve satisfazer.

Consideremos  $V(x,t) = V_0$  e calculemos  $\Psi(x,t)$  e suas derivadas obtemos;

$$-\alpha \text{sen}(kx - wt)k^2 + \text{sen}(kx - wt)V_0 = -\beta \cos(kx - wt)w \quad (2.13)$$

Apesar das constantes  $\alpha$  e  $\beta$  estarem à nossa disposição, não podemos fazer com que essa expressão esteja de acordo com a Eq. (2.10), e portanto satisfaçam às hipóteses 1 e 2, exceto para combinações lineares especiais das grandezas  $x$  e  $t$  para as quais  $\text{sen}(kx - wt) = \cos(kx - wt)$ . É verdade que poderíamos obter uma concordância se  $\alpha$  e  $\beta$  não fossem constante, mas rejeitamos essa possibilidade em favor da muito mais simples que será apresentada a seguir.

A dificuldade que temos surge porque a derivação troca co-senos por senos e vice-versa. Este fato sugere que devemos tentar usar para a função de onda da partícula livre não a única função senoidal da Eq. (2.7), mas em vez dela a combinação

$$\Psi(x,t) = \cos(kx - wt) + \gamma \text{sen}(kx - wt) \quad (2.14)$$

Onde  $\gamma$  é uma constante, de valor ainda indeterminado, que é introduzida para nos dar uma flexibilidade adicional. Temos a esperança de encontrar a mistura apropriada de um co-seno e um seno que removerá a dificuldade.

Calculando as derivadas necessárias, obtemos:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} = -k \cdot \text{sen}(kx - wt) + k\gamma \cdot \text{cos}(kx - wt) \\ \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = -k^2 \text{cos}(kx - wt) - k^2 \gamma \cdot \text{sen}(kx - wt) \\ \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -w \cdot \text{sen}(kx - wt) - w\gamma \cdot \text{cos}(kx - wt) \end{array} \right. \quad (2.15)$$

Então teríamos novamente; substituindo (2.14) e (2.15) em (2.12), e fazendo  $V(x,t) = V_0$ , obtemos:

$$[-\alpha k^2 + V_0 + \beta \cdot w \cdot \gamma] \text{cos}(kx - wt) + [-\alpha \cdot k^2 \cdot \gamma + V_0 \gamma - \beta w] \text{sen}(kx - wt) = 0 \quad (2.16)$$

Para que a desigualdade acima seja válida para todas as possíveis combinações das variáveis independentes  $x$  e  $t$ , é necessário que os coeficientes de seno e de co-seno sejam zero.

$$-\alpha k^2 + V_0 = -\beta \gamma \cdot w \quad (2.17)$$

$$-\alpha k^2 + V_0 = -\beta w / \gamma \quad (2.18)$$

Agora temos um problema facilmente tratável; há três equações algébricas que devemos satisfazer as equações (2.10), (2.17), (2.18), e três constantes livres  $\alpha, \beta, \gamma$  à nossa disposição. Subtraindo (2.18) de (2.17), encontramos

$$0 = -\beta \gamma w - \beta w / \gamma$$

Ou ainda:

$$\gamma = -1 / \gamma$$

De forma que

$$\begin{aligned}\gamma^2 &= -1 \\ \gamma &= \pm i\end{aligned}\tag{2.19}$$

Onde  $i$  é a unidade imaginário. Substituindo este resultado em (2.17), encontramos

$$-\alpha k^2 + V_0 = \mp i\beta w$$

Este resultado pode ser comparado diretamente com a Eq.(2.17):

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0 = \hbar w$$

Chegando em :

$$\alpha = -\hbar^2 / 2m\tag{2.20}$$

E ainda:

$$\pm i\beta = \hbar$$

Ou seja:

$$\beta = \pm i\hbar\tag{2.21}$$

Há duas escolhas possíveis de sinal em (2.19). Observa-se que a consequência de qual escolha feita não é significativa, e portanto seguimos o uso convencional e escolhemos o sinal positivo.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t) \Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} \quad (2.22)$$

Esta equação diferencial satisfaz a todas as nossas hipóteses relativas à equação de onda da mecânica quântica.

Deve ser enfatizado que chegamos a (2.22) considerando um caso de uma partícula livre, onde  $V(x,t) = V_0$ , é uma constante. Neste ponto parece argumentar que devemos esperar que a equação de onda da mecânica quântica tenha a mesma forma que a Eq. (2.22) como função de  $x$  e  $t$ , mas não podemos provar que isto seja verdadeiro. Podemos, no entanto, postular que é verdade. Fazemos isto, e assim tomamos a Eq. (2.22) como a equação de onda da mecânica quântica cujas soluções  $\Psi(x,t)$  nos indica as funções de onda que devem ser associadas ao movimento de uma partícula de massa  $m$  sob influencia de forças que são descritas pela função energia potencial  $V(x,t)$ .

A equação foi obtida pela primeira vez em 1926 por Erwin Schrödinger, e é portanto chamada de **Equação de Schrödinger**.

Devemos observar que não podemos esperar que a equação de Schrödinger seja válida quando a partícula com velocidade relativística. Isto ocorre por que a equação foi feita de forma a ser consistente com a Eq. (2.4), a equação de energia clássica, que é incorreta para velocidades comparáveis com a velocidade da luz. Em 1928, Dirac desenvolveu uma teoria relativística para a mecânica quântica, usando basicamente os mesmos postulados que a teoria de Schrödinger, exceto em que (2.4) foi substituída por seu análogo relativístico.

$$E = \sqrt{c^2 p^2 + (m_0 c^2)^2} + V$$

A teoria de Dirac se reduz a teoria de Schrödinger, é obvio, no limite de baixas velocidades. Devido às sérias complicações introduzidas pela raiz

quadrada na equação de energia relativística, um tratamento quantitativo da teoria de Dirac não seria apropriado a este trabalho.

## 2.2 Exemplo

A função de onda  $\Psi(x,t)$  para o estado de menor energia de oscilador simples, constituído de uma partícula de massa  $m$  sob ação de uma força restauradora linear cujas hipóteses é  $C$ , pode ser expressa como

$$\Psi(x,t) = Ae^{-\sqrt{Cm/2\hbar}x^2} e^{-(i/2)\sqrt{C/m}t}$$

Onde a constante real  $A$  pode ter o qualquer valor. Verifique que essa expressão é uma solução para a equação de Schrödinger com o potencial apropriado.

A expressão se aplica ao caso em que o ponto de equilíbrio do oscilador (o ponto no qual a partícula clássica estaria em repouso caso não tivesse oscilando) está na origem do eixo  $x$  ( $x = 0$ ). Neste caso, a energia potencial, independe do tempo, ou seja:

$$V(x,t) = V(x) = Cx^2 / 2$$

Como pode ser verificado, observando-se que a força correspondente,  $F = -\frac{dV}{dx} = -Cx$ , é uma força restauradora cuja constante é  $C$ . A equação de Schrödinger para esse potencial é

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

Para verificamos a validade da solução citada, calcularemos sua derivadas.

Encontremos

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{2} \sqrt{\frac{C}{m}} \Psi$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi}{\partial x} &= -\frac{\sqrt{Cm}}{2\hbar} 2x\Psi = -\frac{\sqrt{Cm}}{\hbar} x\Psi \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} &= -\frac{\sqrt{Cm}}{\hbar} \Psi - \frac{\sqrt{Cm}}{\hbar} x \left( -\frac{\sqrt{Cm}}{\hbar} x\Psi \right) = -\frac{\sqrt{Cm}}{\hbar} \Psi + \frac{Cm}{\hbar^2} x^2\Psi \end{aligned}$$

Substituindo na equação de Schrödinger resulta em

$$\frac{\hbar^2 \sqrt{Cm}}{2m\hbar} \Psi - \frac{\hbar^2 Cm}{2m\hbar^2} x^2\Psi + \frac{C}{2} x^2\Psi = i\hbar \left( -\frac{i}{2} \right) \sqrt{\frac{C}{m}} \Psi$$

ou ainda:

$$\frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{C}{m}} \Psi - \frac{C}{2} x^2\Psi + \frac{C}{2} x^2\Psi = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{C}{m}} \Psi$$

Com a última igualdade é evidentemente satisfeita, a solução é válida.

### 3. DETERMINAÇÃO DA DENSIDADE DE PROBABILIDADE $|\psi|^2$

Para obter esta equação, substituímos  $m.v$  pelo momento  $p$ .

Em 1916, Einstein ampliou o conceito de *quantum* de luz (fóton) ao propor que um *quantum* de luz possui momento linear. Para um fóton de energia  $h.f$ , o modulo deste momento é dado por

$$p = \frac{hf}{c} = \frac{h}{\lambda} \quad (\text{momento de Fóton}) \quad (3.1)$$

Além disso,  $\frac{2\pi}{\lambda}$  é o numero quântico angular K

Com esta substituição, a equação se torna:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 \text{ (equação de Schrödinger partícula livre)} \quad (3.2)$$

Esta equação tem como solução geral:

$$\psi(x) = Ae^{i.k.x} + Be^{-i.k.x}, \quad (3.3)$$

onde  $A$  e  $B$  são constantes arbitrárias. Podemos verificar que esta equação é realmente uma solução da Eq. (3.2) substituindo  $\psi(x)$  e sua derivada segunda na Eq. (3.2) e observando que o resultado é uma identidade.

Combinando as equações (2.1) e (2.3), obtemos, para uma função de onda  $\Psi$  dependente do tempo se propagando ao longo do eixo  $x$ ,

$$\begin{aligned} \Psi(x,t) &= \psi(x)e^{-i.w.t} = (Ae^{i.k.x} + Be^{-i.k.x})e^{-i.w.t} \\ \Psi(x,t) &= Ae^{i(k.x-w.t)} + Be^{-i(k.x+w.t)} \end{aligned} \quad (3.4)$$

Qualquer função  $F$  da forma  $f(kx \pm wt)$  representa uma onda progressiva. Isto se aplica a funções exponenciais como na Eq. (3.4), bem como às funções senoidais que usamos para descrever ondas em cordas. Na verdade, estas duas representações estão relacionadas através das equações,

$$e^{i.\theta} = \cos\theta + i\text{sen}\theta \quad \text{e} \quad e^{-i.\theta} = \cos\theta - i\text{sen}\theta,$$

onde  $\theta$  é um ângulo qualquer.

O primeiro termo do membro da direita da Eq. (3.4) representa uma onda que se propaga no sentido positivo do eixo  $x$ ; o segundo, uma onda que se propaga no sentido negativo do eixo  $x$ . Entretanto, vamos supor que a partícula livre que estamos considerando se movimenta no sentido positivo do eixo  $x$ . Para restringir a solução geral de (3.4) a este caso de interesse, tomamos as constante  $A$  de  $\psi_0$ , a Eq. (3.3) se torna

$$\psi(x) = \psi_0 e^{ikx} \quad (3.5)$$

Para determinar a densidade de probabilidade, devemos calcular o quadrado do valor absoluto de  $\psi(x)$ . O resultado é o que se segue:

$$|\psi|^2 = |\psi_0 e^{ikx}|^2 = (\psi_0^2) |e^{ikx}|^2$$

Como

$$|e^{ikx}|^2 = (e^{ikx})(e^{ikx}) = e^{ikx} \cdot e^{-ikx} = e^0 = 1$$

Temos

$$|\psi|^2 = (\psi_0^2)(1)^2 = \psi_0^2 \quad (\text{uma constante})$$

A Fig. 3 é uma gráfico da densidade de probabilidade  $|\psi|^2$  em função de  $x$  para uma partícula livre. Trata-se de uma linha reta paralela ao eixo  $x$ , que vai de  $-\infty$  a  $+\infty$ . Como a densidade de probabilidade tem o mesmo valor para qualquer valor de  $x$ , a partícula pode ser deslocada com a mesma probabilidade em qualquer ponto de sua trajetória.

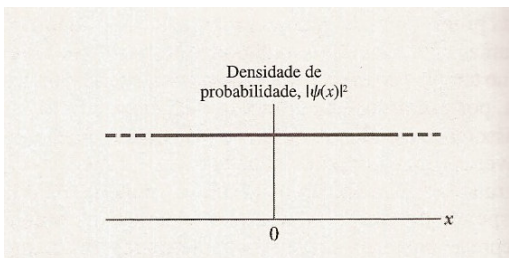


Fig. 3 – Densidade de Probabilidade

Vemos que a densidade de probabilidade  $|\psi|^2$  é a mesma para qualquer valor de  $x$ . Não existe nada que nos permita identificar um determinado ponto sobre o eixo dos  $x$  como a posição mais notável para a partícula, ou seja, todas as posições são igualmente prováveis.

### 3.1 Exemplo

Calcular a densidade de probabilidade para a função de onda de menor energia do oscilador harmônico simples mostrada no exemplo anterior.

A função de onda é

$$\Psi(x,t) = Ae^{-(\sqrt{C.m}/2\hbar)x^2} e^{-(i/2)\sqrt{C/m}t}$$

A densidade de probabilidade é portanto

$$P = (\Psi * \Psi) = Ae^{-(\sqrt{C.m}/2\hbar)x^2} e^{+(i/2)\sqrt{C/m}t} Ae^{-(\sqrt{C.m}/2\hbar)x^2} e^{-(i/2)\sqrt{C/m}t}$$

Ou seja:

$$P = A^2 e^{-(\sqrt{C.m}/\hbar)x^2}$$

Observa que a densidade de probabilidade é independente do tempo, apesar da função de onda depender do tempo. Isto é verdade para qualquer caso onde a partícula associada à função de onda esta em um único estado de energia.

A densidade de probabilidade  $P$  prevista pela mecânica quântica esta mostrada em um gráfico como uma função de  $x$  pela curva sólida na parte superior da Fig. 4. A probabilidade de que uma medida de posição da partícula oscilando seja encontrada em um elemento do eixo  $x$  entre  $x$  e  $x + dx$  é igual a  $Pdx$ .

Como  $P$  tem um máximo em  $x = 0$ , o ponto de equilíbrio do oscilador, a mecânica quântica prevê que a partícula tem maior probabilidade de ser encontrada em um elemento  $dx$  localizado no ponto de equilíbrio. Caminhando em qualquer sentido a partir dessa posição, as chances de encontrá-la em um elemento do mesmo comprimento  $dx$  diminuem bastante rapidamente, mas não

existem limites bem definidos alem dos quais a probabilidade de encontrar a partícula em um elemento do eixo  $x$  seja exatamente zero.

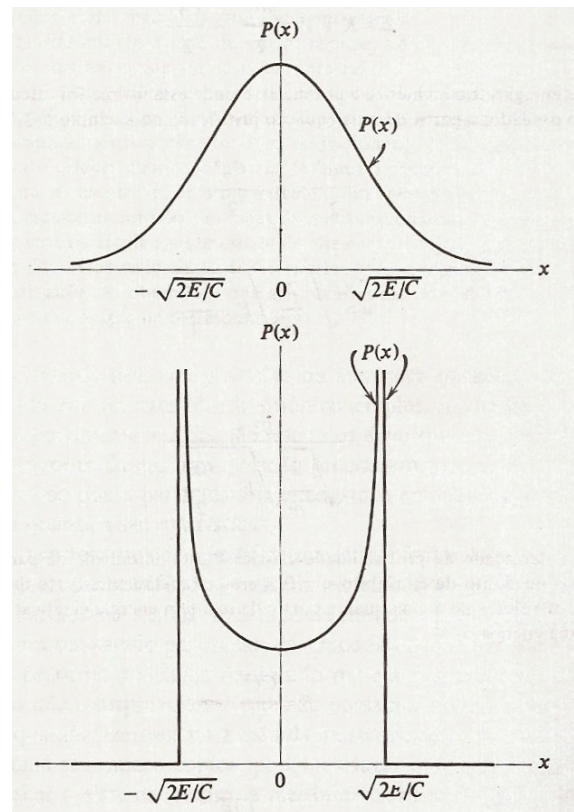


Fig. 4 – Função de Probabilidade

A figura acima ainda mostra a densidade de probabilidade da mecânica quântica e clássica para uma partícula no estado de menor energia de um oscilador harmônico simples. A densidade de probabilidade da mecânica quântica tem um pico na proximidades do ponto de equilíbrio e se estende para alem dos limites bem definidos para o movimento previstos pela física clássica. A densidade de probabilidade clássica é inversamente proporcional á velocidade clássica, e é maior nos pontos do movimento, onde a velocidade se anula.

#### 4. O PRINCÍPIO DE INCERTEZA

No exemplo anterior vimos uma das previsões da mecânica quântica referente ao comportamento de uma partícula em um oscilador harmônico simples. A previsão é típica do tipo de informação que a teoria pode fornecer. Ela não pode nos dizer que uma partícula em um dado estado de energia ser encontrada em uma posição precisa em um certo instante, mas apenas as probabilidades relativas de que a partícula seja encontrada em uma varia posições nesse instante. As previsões da mecânica quântica são estatísticas.

O *Princípio da Incerteza* dá a justificativa fundamental de por que a mecânica quântica se expressa na forma de probabilidades, e não de certezas.

A origem da complementariedade é o princípio de Heisenberg. Esse princípio atesta ser impossível fazer uma observação (um medida) em sistema sem ao mesmo tempo provocar um alteração mínima em seu estado físico. O princípio também estabelece um relação fundamental entre o mínimo de alteração no estado do sistema e a precisão da medida realizada.

Por exemplo, considere a investigação de um oscilador harmônico em alguns estados de energia típico. Para que realmente o sistema está em um estado particular, devemos fazer uma medida de sua energia. A medida, de modo que não é surpreendente que não possamos prever com certeza aonde a partícula será encontrada quando fizemos uma medida de sua posição.

Na mecânica clássica que a energia do sistema seja microscópica, podemos fazer a medida da energia, e qualquer outra medida, se perturba o sistema. Assim a mecânica clássica diz que podemos prever exatamente onde a partícula será encontrada em uma medida subsequente, caso o desejamos. Mas, quando aplicada a sistemas microscópicos, a mecânica clássica esta errada.

Não só impossível prever a partir da mecânica clássica exatamente aonde uma partícula em um sistema microscópico estará em uma medida

subseqüente, como também é impossível prever precisamente, a partir dessa teoria, as probabilidades relativas de encontrar a partícula em, varias posições.

A mecânica quântica no permite fazer previsões precisa a respeito dessa probabilidade relativas, por que ela leva em conta quantitativamente o fato fundamental da vida do mundo microscópico – o principio da incerteza .

O primeiro ponto abordado por Born, a respeito da dependência espacial de  $\Psi$  em alguns instante inicial ser suficiente para determinar completamente sua dependência espacial em qualquer instante posterior, é conseqüência do fato de que  $\Psi$  satisfaz á equação de schrödinger, que contem apenas uma primeira derivada temporal.

Em 1913 Niels Bohr desenvolveu um modelo que apresentava concordância quantitativa precisa com alguns dos dados espectroscópicos ( por exemplo, o espectro do hidrogênio). Tinha a atração adicional de que a matemática envolvida era de fácil compreensão. Sendo assim fora criado os postulados de Bohr:

1) Um elétron em um átomo se move em uma órbita circular em torno do núcleo sob influência da atração coulombiana entre elétron e núcleo, obedecendo as leis da Mecânica Clássica.

2) Em vez da infinidade de órbitas que seriam possíveis segundo a mecânica clássica, um elétron só pode mover em uma órbita na qual seu momento angular orbital é um múltiplo inteiro  $\hbar$  .

3) Apesar de estar constantemente acelerado, um elétron, que se move em uma das órbitas possíveis não admite radiação eletromagnética. Portanto sua energia total permanece constante.

4) É emitida radiação eletromagnética se um elétron que se move inicialmente sobre uma órbita de energia total inicial, muda seu movimento descontinuamente de forma a se mover em uma órbita de energia total final.A

frequência da radiação emitida é igual a quantidade de energia dividida pela constante de Planck.

O segundo ponto, a respeito de não ser capaz de determinar completamente a dependência espacial da função de onda no instante inicial, é se soubermos uma densidade de probabilidade a partir de um conjunto inicial de medidas de um sistema, ainda não poderemos determinar de forma única uma função de onda inicial para associa-la ao sistema. Tudo que podemos determinar é a soma dos quadrados das partes real e imaginaria da função de onda.

#### 4.1 Exemplo

Nesta aplicação, vamos normalizar a função de onda do primeiro exemplo, determinando qual o valor da constante arbitraria  $A$  nesta função de onda que faz com que a probabilidade de encontrar a partícula em qualquer ponto do eixo  $x$  seja um.

A probabilidade total de encontrar a partícula em algum ponto de todo o eixo  $x$  é necessariamente igual a um , se a partícula existe. Essa probabilidade total pode ser obtida matematicamente integrando-se á função densidade probabilidade  $P$  sobre todos os  $x$ . Fazendo isto, e igualando o resultado a um, temos

$$\int_{-\infty}^{\infty} P dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\sqrt{Cm}/\hbar)x^2} dx = 1$$

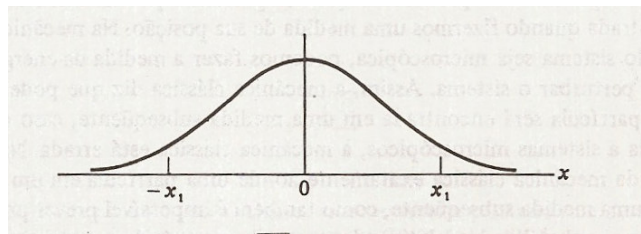


Fig. 5 – Curva Gaussiana

Como o integrando  $e^{-(\sqrt{Cm}/2\hbar)x^2}$  depende de  $x^2$ , ele é uma função par de  $x$ . Isto é, seu valor para um certo  $x$  é igual a seu valor para  $-x$ , como pode ser visto na fig (3.3)(acima). Portanto a contribuição para o valor total da integral obtida na região de  $-\infty$  a 0 é igual a contribuição obtida na região de 0 a  $+\infty$ , e temos

$$A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\sqrt{Cm}/2\hbar)x^2} dx = 2A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\sqrt{Cm}/\hbar)x^2} dx = 1$$

A integral definida pode ser calculada, obtendo

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\sqrt{Cm}/\hbar)x^2} dx = \frac{(\pi\hbar)^{1/2}}{2(Cm)^{1/4}}$$

Então obtemos imediatamente que o valor de  $A$  é:

$$A = \frac{(Cm)^{1/8}}{(\pi\hbar)^{1/4}}$$

Com este valor de  $A$ , a função de onda fica:

$$\Psi(x, t) = \frac{(Cm)^{1/8}}{(\pi\hbar)^{1/4}} e^{-(\sqrt{Cm}/2\hbar)x^2} e^{-(i/2)\sqrt{Cm}t}$$

O processo acima é dito *normalização de um função de onda*, e a função de onda apresentada no final do exemplo é dita, evidentemente, normalizada.

Antes do processo ser efetuado, a amplitude de uma função de onda é arbitrária, porque a linearidade da equação de Schrödinger permite que uma função de onda seja multiplicada por uma constante de valor arbitrário, e ainda assim continue sendo uma solução da equação.

A normalização tem como efeito fixar a amplitude, ao fixar o valor da constante multiplicativa, como foi o caso de  $A$ , no exemplo acima.

Nem sempre é necessário realmente efetuar o cálculo que dá o valor da constante de amplitude, por que resultados úteis podem ser frequentemente obtidos em termos das probabilidades relativas, que são independentes de valores reais das amplitudes. Mas devemos nos lembrar sempre que

$$\int_{-\infty}^{\infty} P dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dx = 1$$

Já que estas integrais dão a probabilidade total de encontrar em algum local a partícula descrita pela função de onda, essa probabilidade tem que ser igual a um para que a partícula exista.

## 4.2 Valores Esperados

Considere uma partícula e sua função de onda associada  $\Psi(x, t)$ . Em uma medida de sua posição no sistema descrito pela função de onda, haveria uma probabilidade finita de encontra-la em qualquer coordenada  $x$  no intervalo de  $x$  a  $x + dx$ , desde que a função de onda fosse não nula nesse intervalo.

Em geral, a função de onda é não nula em uma região extensa do eixo  $x$ . portanto não somos normalmente capazes de afirmar que a coordenada  $x$  da partícula tem um certo valor definido. No entanto, é possível especificar algum tipo de posição média da partícula, da forma que se segue. Vamos imaginar que fazemos uma medida da posição da partícula em um instante  $t$ . A probabilidade de encontra-la entre  $x$  a  $x + dx$  é segundo o postulado de Born

$$P(x, t) dx = \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx \quad (4.1)$$

Imagine que fazemos essa medida uma serie de vezes para sistemas idênticos descritos pela mesma função de onda, sempre para o mesmo valor  $t$ ,

e que registramos os valores observados de  $x$  nos quais encontramos a partícula. Um exemplo seria um conjunto de medidas das posições de elétrons em átomos de hidrogênio, com todos os átomos em seus estados de menor energia. Podemos usar a média dos valores observados para caracterizar a posição em um instante  $t$  da partícula associada à função de onda. Chamamos este valor esperado de  $x$ , que é notado  $\bar{x}$ , será dado por

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} xp(x,t)dx \quad (4.2)$$

A razão é que o integrando nesta expressão é exatamente o valor da coordenada  $x$  ponderada pela probabilidade de observar esse valor. Portanto, obtemos a média dos valores observados ao da função de onda, obtemos

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)x\Psi(x,t)dx \quad (4.3)$$

Esta expressão segue diretamente da interpretação de  $\Psi^*\Psi$  como a densidade de probabilidade. Note que a expressão envolve a integral em  $dx$ , o que elimina qualquer dependência na posição. Como  $\Psi$  é também uma função de  $t$ , o resultado é uma função unicamente do tempo.

Se, por exemplo, uma medida pode resultar em apenas dois valores,  $x_1$  e  $x_2$ , com a mesma probabilidade, o valor esperado será  $\bar{x} = \frac{(x_1 + x_2)}{2}$ , e nenhuma medida resultará neste valor. Embora *valor médio* seja mais apropriado, continuaremos usando também a denominação *valor esperado* porque é o convencional.

## 5. O GATO DE SCHRODINGER

A teoria quântica é a maior criação da ciência, de significado muito maior e prático do que a teoria da relatividade. E, contudo, permite fazer estranhíssimas previsões. O mundo da mecânica quântica é tão estranho que

mesmo Albert Einstein não o conseguiu compreender e recusou-se a aceitar todas as conseqüências da teoria desenvolvida por Schrödinger e outros.

Einstein, como muitos outros cientistas, julgou muito mais adequado supor que as equações da mecânica são um processo matemático que permite uma descrição geral do comportamento das partículas atômicas e subatômicas mas impede o acesso a uma realidade mais profunda de acordo com a nossa experiência cotidiana.

A Mecânica Quântica diz-nos que nada é real, e que não podemos afirmar nada acerca dos fenômenos exceto quando os vemos. O *gato de Schrödinger* foi pensado como exemplo para mostrar claramente as diferenças existentes entre o mundo cotidiano e o mundo quântico.

No mundo quântico já não vigoram mais as leis que nos são familiares. Os acontecimentos são regidos por probabilidades.

Tomemos como exemplo um átomo radioativo. Ele pode transformar-se, digamos que por emissão de um elétron. Mas também pode não o fazer.

É possível mostrar uma experiência de tal modo que num certo intervalo de tempo haja uma probabilidade de exatamente 50% de um dos átomos de uma amostra radioativa se transmutar e que, a dar-se essa desintegração, ela seja detectada por um dispositivo.

Schrödinger, tão preocupado como Einstein com as implicações da teoria quântica, tentou mostrar o absurdo de tais implicações imaginando uma experiência como a referida, que ocorreria numa sala ou caixote fechado, em cujo interior estariam ainda um gato (vivo) e um frasco de gás venenoso, tudo disposto de maneira que se a desintegração radioativa se desse, o frasco seria quebrado e o gato morreria. no mundo cotidiano a morte do gato tem 50% de probabilidade de ocorrer, e, sem olhar para o interior do caixote, podemos dizer com segurança que o gato ou está vivo ou está morto.



Fig. 6 – Gato de Schrödinger

Observe a Fig. 6, acima: No esquema ilustrativo do “gato de Schrödinger”, o decaimento de um átomo, inicialmente em um estado excitado, emite um fóton que aciona um martelo, que quebra o frasco com cianeto, matando o gato. Se o átomo não decai, o gato sobrevive. Em instantes intermediários, o estado do sistema envolve uma superposição de estados, correspondentes ao gato morto (átomo decaído) e ao gato vivo (átomo excitado).

Mas aqui deparamos com a estranheza do mundo quântico. Segundo a teoria, *nenhuma* das duas possibilidades de concretização (o gato vivo e o gato morto) tem realidade a não ser que seja observada. Assim a desintegração *nem aconteceu nem não aconteceu* e o gato não morreu nem sobreviveu até que tenhamos olhado para o interior do caixote.

Os teóricos que aceitam a versão pura da Mecânica Quântica dizem que o gato existe num estado indeterminado que não é vida nem é morte, até que um observador olhe para dentro do caixote. Nada é real se não é observado.

Essa idéia era um anátema para Einstein, entre outros. "Deus não joga dados", dizia, referindo-se à teoria de que o mundo evolui em consequência de escolhas aleatórias ao nível quântico.

Quanto à irrealidade do estado do gato de Schrödinger, ele justificava-a pela existência de uma engrenagem subjacente, unicamente a partir da qual se tornava possível discernir a realidade fundamental das coisas.

Einstein gastou muitos anos tentando imaginar experiências que pudessem revelar esta realidade subjacente, mas morreu antes que uma tal experiência fosse efetuada. E talvez tenha sido melhor para Einstein não ter vivido até se chegar ao termo da linha de raciocínio por ele iniciada.

No verão de 1982, na Universidade de Paris-Sud, em França, uma equipe chefiada por Alain Aspect concluiu um certo número de experiências destinadas a revelar a existência de uma realidade subjacente à irrealidade quântica.

Tal realidade - a engrenagem fundamental - manifestava-se pela existência de "variáveis ocultas", e a experiência dizia respeito ao comportamento de dois fótons (ou partículas de luz) afastando-se em sentidos opostos a partir de uma fonte comum.

Em suma, podemos descrever a experiência: Dois fótons, emergentes da mesma fonte, são observados por dois detectores, que medem uma propriedade chamada polarização. Segundo a teoria quântica, esta propriedade não existe senão quando é medida. Segundo a hipótese das variáveis ocultas, cada fóton tem uma polarização "real", bem definida, desde o momento que é criado. Como os fótons são emitidos conjuntamente, as suas polarizações estão relacionadas.

Mas a relação existente entre elas não é a mesma nas duas interpretações. O resultado da experiência foi inequívoco. A relação prevista

pela teoria das variáveis ocultas não foi observada, a prevista pela teoria quântica foi-o.

Mais ainda: a medida realizada num dos fótons tem efeito instantâneo sobre a polarização do outro fóton, o que concorda com a teoria quântica. Existe uma espécie de interação entre os dois, embora ambos se movam a velocidade da luz e a teoria da relatividade nos ensine que nenhum sinal pode viajar mais depressa do que a luz.

As experiências mostram uma inexistência de uma realidade subjacente. Assim, não é adequado pensar em termos de realidade quotidiana quando nos debruçamos sobre as partículas elementares que constituem o universo. E contudo, tais partículas parecem intimamente ligadas num todo indivisível, cada uma ciente do que sucede às restantes.

A procura do gato de Schrödinger foi a procura da realidade quântica. A partir deste breve resumo, pode parecer que tal busca foi infrutífera, pois a realidade tal como a conhecemos não existe afinal. Mas isto não é ainda o fim da história, e a procura do gato de Schrödinger pode levar-nos a uma nova compreensão do mundo, compreensão essa que transcende, ainda que inócua, a interpretação convencional da teoria quântica.

O caminho é longo, e começa com um cientista que provavelmente ficaria ainda mais horrorizado do que Einstein se soubesse quais as respostas que hoje temos para as questões que o intrigam. Isaac Newton, ao estudar a natureza da luz há trezentos anos atrás, não podia ter consciência de estar já no caminho que levaria ao gato de Schrödinger.

## **6. APLICAÇÃO: O OSCILADOR HARMÔNICO**

O estudo do oscilador harmônico para sistemas microscópicos é igualmente importante ao estudo de sistemas oscilatórios macroscópicos. Em particular o movimento vibracional de dois átomos numa molécula diatômica é

bem representado por um oscilador harmônico. A análise do oscilador harmônico em mecânica quântica envolve a determinação das soluções da equação de Schrödinger para uma partícula de massa  $m$  e coordenadas  $x$  movendo-se numa região onde a energia potencial  $V(x)$  tem a forma do oscilador harmônico da pela equação;

$$V(x) = k \frac{x^2}{2} \quad (6.1)$$

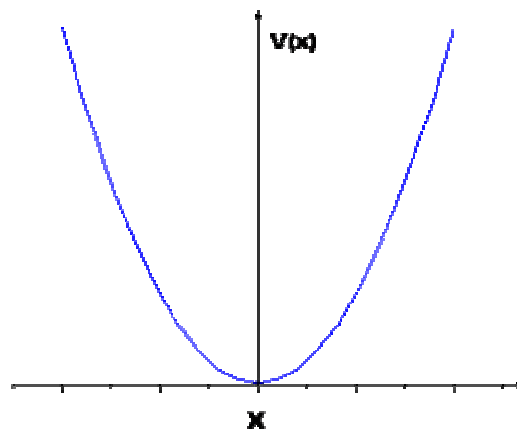
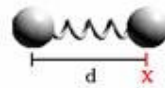


Fig.7 – Energia potencial do oscilador em função do deslocamento

No caso macroscópico, a constante  $k$  define a dureza da mola do oscilador. Num sistema macroscópico a “mola” pode envolver forças elétricas ou nucleares, cuja “dureza” pode ser expressa pelo valor da constante  $k$ .

Mas, como a equação de Schrödinger envolve a energia potencial do sistema, e não a força agindo sobre a partícula, é melhor pensar em  $k$  como uma constante que descreve quão bruscamente a energia potencial do sistema aumenta do seu valor de referência  $V = 0$  na posição de equilíbrio  $x = 0$ , à medida que a partícula se fasta ponto de equilíbrio.

A equação de Schrödinger para o oscilador harmônico pode ser reescrita agora usando a Eq. (6.1) na Eq. (2.22):

$$\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{kx^2}{2} \right) \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} \quad (6.2)$$

Esta é uma equação diferencial que, segundo a mecânica quântica, rege o comportamento do mesmo sistema, que a mecânica newtoniana afirma ser regido por;

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = -\frac{k}{m} x \quad (6.3)$$

Agora veremos que as duas equações levam à soluções correspondentes quando elas são aplicadas a osciladores macroscópicos. Para os osciladores microscópicos, as previsões das duas equações são divergentes, e a experiência mostra que somente aquelas feitas através da equação de Schrödinger são corretas.

Uma forma mais simples de resolver esta equação é transformá-la numa forma mais simples, pela seguinte substituição;

$$\alpha = \frac{2m}{\hbar^2} E \text{ e } \beta = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar} \quad (6.4)$$

Substituindo as equações (6.4) em (6.2), a equação de Schrödinger assume a forma,

$$\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = -(\alpha - \beta^2 x^2) \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} \quad (6.5)$$

Fazendo a mudança de variável  $s = \sqrt{\beta} x$ , tem-se que,

$$\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} = \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial s} \frac{\partial s}{\partial x} = \sqrt{\beta} \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial s} \quad (6.6)$$

Usando este resultado a equação de Schrödinger pode ser re-escrita em função da nova variável  $s$ , como a seguir,

$$\beta \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = - \left( \alpha - \beta^2 \frac{s^2}{\beta} \right) \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} \quad (6.7)$$

ou seja,

$$\frac{\partial^2 \Psi(s,t)}{\partial s^2} = -(\epsilon - s^2) \frac{\partial \Psi(s,t)}{\partial s}$$

onde,

$$\epsilon = \frac{\alpha}{\beta} = \frac{2}{\hbar^2 \sqrt{\frac{k}{m}}} E$$

A Eq. (6.7) é a equação de Schrödinger para o oscilador harmônico, o termo  $\left(\frac{1}{2\pi}\right)\sqrt{\frac{k}{m}}$  é a frequência de um oscilador macroscópico e conseqüentemente  $\epsilon$  é uma quantidade adimensional. Lembre-se também que, de acordo com o postulado de Born,  $\Psi^2$  representa a densidade de probabilidade que neste caso é a densidade de probabilidade por unidade de comprimento.

Um truque para achar a solução desta equação diferencial é obter inicialmente a solução assintótica, ou seja, a solução para valores muito grande de  $s$  e depois *adaptar esta solução* para que seja válida para todo valor de  $s$ , isto é

$$s^2 \gg \epsilon$$

o que implica em

$$\frac{\partial^2 \Psi(s,t)}{\partial s^2} = s^2 \frac{\partial \Psi(s,t)}{\partial s}$$

Uma possível solução desta equação é,

$$\Psi = s^n e^{-\frac{s^2}{2}} \quad (6.8)$$

onde  $n$  é um número inteiro positivo. Derivando duas vezes a equação acima com respeito a variável  $s$ , tem-se

$$\frac{\partial^2 \Psi(s,t)}{\partial s^2} = [n(n-1)s^{n-2} - (2n+1)s^n + s^{n+2}] e^{-\frac{s^2}{2}} = s^{n+2} e^{-\frac{s^2}{2}} = s^2 \frac{\partial \Psi(s,t)}{\partial s} \quad (6.9)$$

quando  $s \gg 1$

Com isto vimos que a equação (6.9) é forma assintótica da solução procurada, a qual sugere que uma solução geral para a equação (6.8), válida para todos os valores de  $s$ , deve ser igual a

$$\Psi(s) = H(s) e^{-\frac{s^2}{2}}, \quad (6.10)$$

onde  $H(s)$  é uma função a ser determinada. Substituindo a equação (6.10) em (6.9), obtém-se,

$$H'' - 2sH' + (\alpha - 1)H = 0, \quad (6.11)$$

onde as aspas indicam a derivada com relação a  $s$ . Agora, escrevemos  $H$  na forma de série de potência:

$$H = \sum_{p=0}^{\infty} a_p s^p, \quad (6.12)$$

Note que potências negativas não são permitidas neste caso, pois esta gera pontos fisicamente não aceitáveis para  $s = 0$ . Então,

$$H' = \sum_{p=0}^{\infty} a_p p s^{p-1} \quad (6.13)$$

e

$$H'' = \sum_{p=0}^{\infty} a_p p(p-1)s^{p-2} = \sum_{p=2}^{\infty} a_p p(p-1)s^{p-2} \quad (6.14)$$

devido ao fato de que os dois primeiros termos do somatório são identicamente nulos. Substituindo as equações (6.12), (6.13) e (6.14) em (6.11), obtemos

$$\sum_{p=0}^{\infty} [(p+1)(p+2)a_{p+2} - (2p+1-\alpha)a_p]s^p = 0, \quad (6.15)$$

Esta equação é válida para qualquer valor de  $s$  somente se o coeficiente de cada potência de  $s$  seja nulo. Assim, obtém-se as seguintes relações de recorrência,

$$\frac{a_{p+1}}{a_p} = \frac{(2p+1-\alpha)}{[(p+1)(p+2)]}, \quad (6.16)$$

Assim, por repetidas aplicações da equação (6.16) pode-se expressar os coeficientes de  $s^p$  como função de  $\alpha$  multiplicado pelas constantes  $a_0$  ou  $a_1$  dependendo se  $p$  é par ou ímpar, respectivamente. Com isto temos as seguintes condições de soluções fisicamente aceitáveis,

$$(i) \quad \alpha = 2n + 1 \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$(ii) \quad a_1 = 0 \quad \text{se } n \text{ é par} \quad \text{e} \quad a_0 = 0 \quad \text{se } n \text{ é ímpar}$$

Para achar solução da equação completa multiplica-se a solução da parte assintótica por um polinômio:  $H(s)$ . Fazendo a substituição desta solução na equação diferencial do oscilador chegamos a uma equação diferencial bem conhecida em matemática: *A equação diferencial de Hermite.*

As soluções desta equação diferencial são os polinômios de Hermite  $H_n(x)$ , que não serão discutidos neste trabalho.

Para que as soluções sejam aceitáveis  $\alpha/\beta - 1 = 2n$ . Neste ponto aparece o número quântico característico do oscilador harmônico  $n$ . Portanto,

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}} \quad \text{ou} \quad E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) h\nu$$

onde  $\nu = 1/2\pi\sqrt{k/m}$  é a frequência do oscilador e  $n = 1, 2, 3, \dots$

A diferença de energia entre dois níveis adjacentes para  $n$  muito grande é dada por;

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} = \frac{\left(n+1 + \frac{1}{2}\right)h\nu - \left(n + \frac{1}{2}\right)h\nu}{E_n} = \frac{h\nu}{E_n} \cong \frac{h\nu}{nh\nu} = \frac{1}{n}$$

cujo valor não é suficientemente grande para ser mensurável para números quânticos grandes, que são característicos dos osciladores harmônicos macroscópicos.

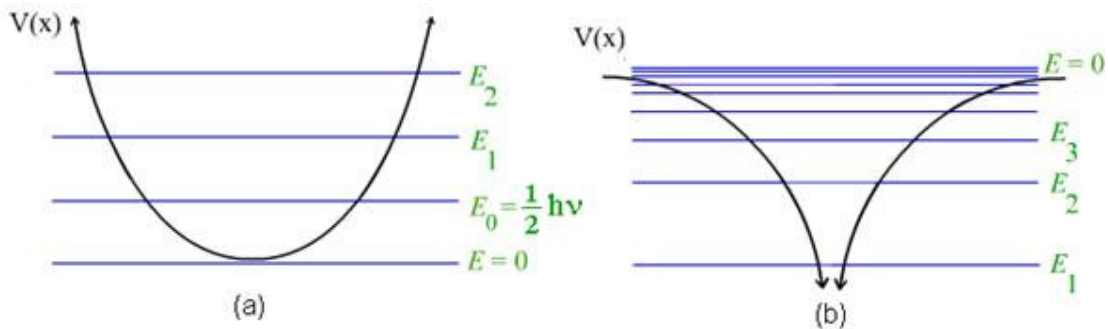


Fig.8 - Curvas de energia potencial e digramas de níveis de energia para

(a) oscilador harmônico e (b) átomo de hidrogênio

## 7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

**Walker, H. R.**, *Fundamentos de Física, Óptica e Física Moderna*, LTC, 6ª ed., vol. 4, 2003.

**Walker, H. R.**, *Fundamentos de Física, Eletro-Magnetismo*, LTC, 6ª ed., vol. 3, 2003.

**Walker H. R.**, *Fundamentos de Física, Gravitação, Ondas e Termodinâmica*, LTC, 6ª ed., vol. 2, 2003.

**Mckelvey, J. P., Grotch, H.**, *Física*, Harbra, Harper&Row do Brasil, 1981.

**Eisberg, R.**, *Física Quântica , Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleo e Partículas*, Ed. Campus, 22ª ed., 2005.

**Chaves, A.**, *Física, Ondas Relatividade e Física Quântica*, Vol. 3, Reichmann & Alfonso Ed., 1ª ed., 2005.

**Nunes, E. dos R., Soler, M. A. G., da Silva, M. de F., Miotto R.**, *GRADOS, Conhecimento, Metodologias e Relações interdisciplinares*, ed. Moderna, 2005.

**Tipler,Paul A.**,*Física Moderna: Mecânica Quântica, Relatividade e a Estrutura da Matéria*, Vol. 3, LTC, 4ª ed., 2000.

**Gaspar, Alberto**,*Física, Eletromagnetismo, Física Moderna*, Vol. 3, ed. Ática,2003.

\_\_\_\_\_ <http://www.math.ist.utl.pt>

\_\_\_\_\_ <http://webbif.ifi.unicamp.br/teses/apresentacao.php>

\_\_\_\_\_ [http://www.Erwin\\_Schrödinger\\_\(1887\\_-\\_1961\).htm](http://www.Erwin_Schrödinger_(1887_-_1961).htm)