

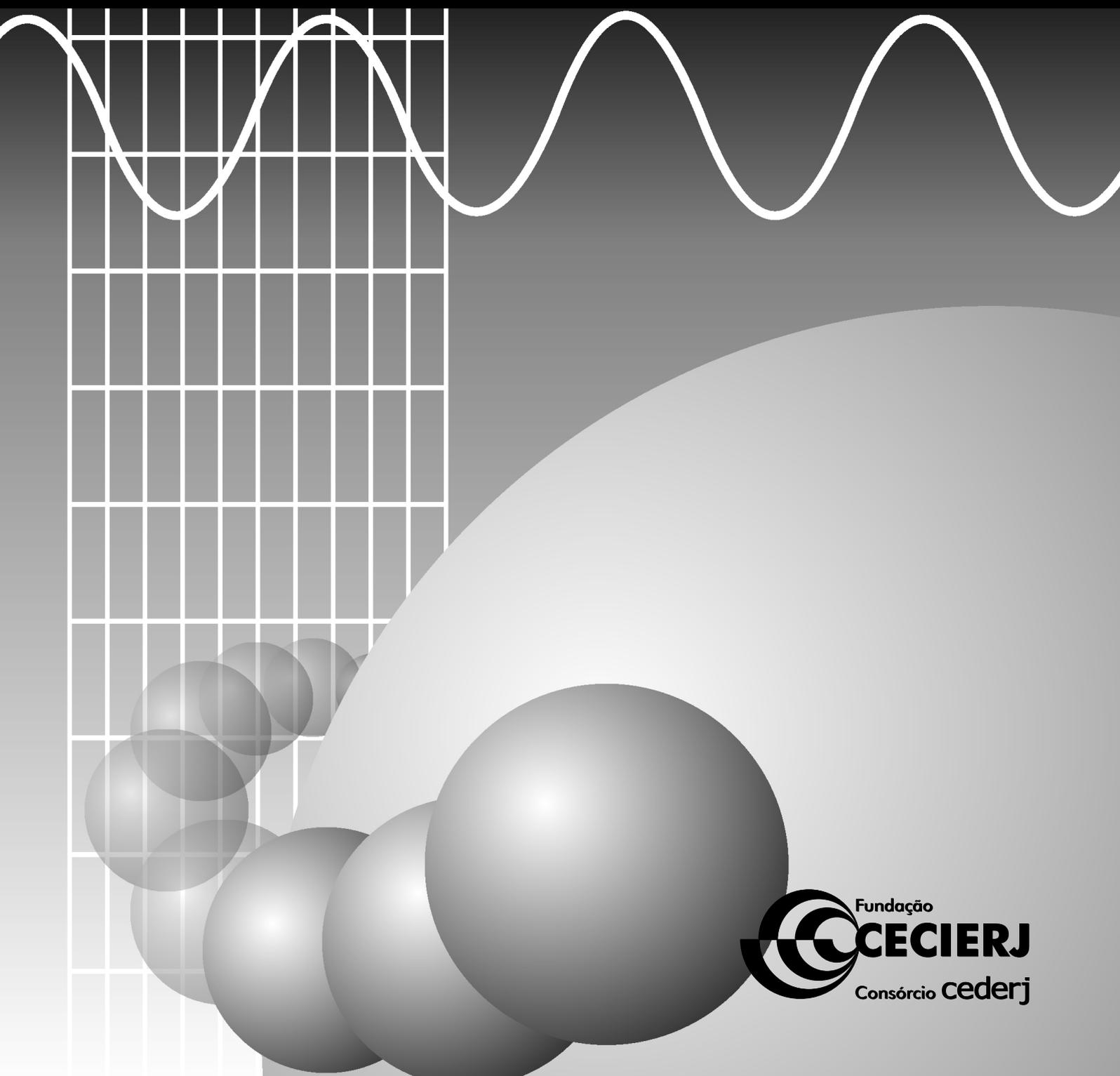
**Módulo 1**

---

Raul José Donangelo  
Rodrigo Barbosa Capaz

**Volume** | 1  
2ª edição

## Introdução à Mecânica Quântica







Fundação

**CECIERJ**

Consórcio **cederj**

Centro de Educação Superior a Distância do Estado do Rio de Janeiro

# Introdução à Mecânica Quântica

Volume 1 - Módulo 1  
2ª edição

Raul José Donangelo  
Rodrigo Barbosa Capaz



SECRETARIA DE  
CIÊNCIA E TECNOLOGIA



Ministério  
da Educação



Apoio:



# Fundação Cecierj / Consórcio Cederj

Rua Visconde de Niterói, 1364 – Mangueira – Rio de Janeiro, RJ – CEP 20943-001  
Tel.: (21) 2299-4565 Fax: (21) 2568-0725

**Presidente**  
Masako Oya Masuda

**Vice-presidente**  
Mirian Crapez

**Coordenação do Curso de Física**  
Luiz Felipe Canto

## Material Didático

### ELABORAÇÃO DE CONTEÚDO

Raul José Donangelo  
Rodrigo Barbosa Capaz

### COORDENAÇÃO DE DESENVOLVIMENTO INSTRUCIONAL

Cristine Costa Barreto

### DESENVOLVIMENTO INSTRUCIONAL E REVISÃO

Marcelo Bastos Matos  
Patrícia Alves

### COORDENAÇÃO DE AVALIAÇÃO DO MATERIAL DIDÁTICO

Débora Barreiros

### AVALIAÇÃO DO MATERIAL DIDÁTICO

Letícia Calhau

## Departamento de Produção

### EDITORA

Tereza Queiroz

### REVISÃO TIPOGRÁFICA

Cristina Freixinho  
Elaine Bayma  
Patrícia Paula

### COORDENAÇÃO DE PRODUÇÃO

Jorge Moura

### PROGRAMAÇÃO VISUAL

Sanny Reis

### ILUSTRAÇÃO

Jefferson Caçador

### CAPA

Jefferson Caçador

### PRODUÇÃO GRÁFICA

Andréa Dias Fiães  
Fábio Rapello Alencar

Copyright © 2007, Fundação Cecierj / Consórcio Cederj

Nenhuma parte deste material poderá ser reproduzida, transmitida e gravada, por qualquer meio eletrônico, mecânico, por fotocópia e outros, sem a prévia autorização, por escrito, da Fundação.

D676m

Donangelo, Raul José.

Introdução à mecânica quântica. v. 1 / Raul José Donangelo;  
Rodrigo Barbosa Capaz. – 2. ed. – Rio de Janeiro : Fundação  
CECIERJ, 2009.

120p.; 21 x 29,7 cm.

ISBN: 978-85-7648-395-3

1. Mecânica quântica. I. Capaz, Rodrigo Barbosa.  
II. Título.

CDD: 531.12

# Governo do Estado do Rio de Janeiro

**Governador**  
Sérgio Cabral Filho

**Secretário de Estado de Ciência e Tecnologia**  
Alexandre Cardoso

## Universidades Consorciadas

**UENF - UNIVERSIDADE ESTADUAL DO  
NORTE FLUMINENSE DARCY RIBEIRO**  
Reitor: Almy Junior Cordeiro de Carvalho

**UERJ - UNIVERSIDADE DO ESTADO DO  
RIO DE JANEIRO**  
Reitor: Ricardo Vieiralves

**UFF - UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE**  
Reitor: Roberto de Souza Salles

**UFRJ - UNIVERSIDADE FEDERAL DO  
RIO DE JANEIRO**  
Reitor: Aloísio Teixeira

**UFRRJ - UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL  
DO RIO DE JANEIRO**  
Reitor: Ricardo Motta Miranda

**UNIRIO - UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESTADO  
DO RIO DE JANEIRO**  
Reitora: Malvina Tania Tuttman



### SUMÁRIO

<b>Aula 1</b> – Experiências com projéteis e ondas _____	<b>7</b>
<i>Raul José Donangelo / Rodrigo Barbosa Capaz</i>	
<b>Aula 2</b> – Experiências com elétrons _____	<b>19</b>
<i>Raul José Donangelo / Rodrigo Barbosa Capaz</i>	
<b>Aula 3</b> – O Princípio da Complementaridade e o papel do observador na Mecânica Quântica _____	<b>31</b>
<i>Raul José Donangelo / Rodrigo Barbosa Capaz</i>	
<b>Aula 4</b> – Função de onda e Equação de Schrödinger _____	<b>39</b>
<i>Raul José Donangelo / Rodrigo Barbosa Capaz</i>	
<b>Aula 5</b> – Operadores momento e energia e o Princípio da Incerteza _____	<b>49</b>
<i>Raul José Donangelo / Rodrigo Barbosa Capaz</i>	
<b>Aula 6</b> – O caso estacionário em uma dimensão _____	<b>59</b>
<i>Raul José Donangelo / Rodrigo Barbosa Capaz</i>	
<b>Aula 7</b> – A partícula livre _____	<b>71</b>
<i>Raul José Donangelo / Rodrigo Barbosa Capaz</i>	
<b>Aula 8</b> – O degrau de potencial. Caso I: energia menor que o degrau _____	<b>83</b>
<i>Raul José Donangelo / Rodrigo Barbosa Capaz</i>	
<b>Aula 9</b> – O degrau de potencial. Caso II: energia maior que o degrau _____	<b>95</b>
<i>Raul José Donangelo / Rodrigo Barbosa Capaz</i>	
<b>Aula 10</b> – Exercícios _____	<b>105</b>
<i>Raul José Donangelo / Rodrigo Barbosa Capaz</i>	
<b>Referências</b> _____	<b>119</b>



# AULA 1

## Experiências com projéteis e ondas

### Meta da aula

Descrever experiências de interferência por uma fenda dupla com projéteis e ondas.

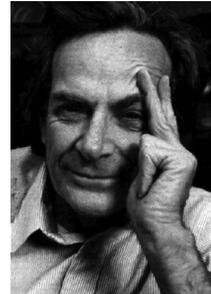
## objetivos

- analisar o comportamento de projéteis ao passar por uma fenda dupla;
- avaliar o comportamento de ondas ao passar por uma fenda dupla;
- lembrar o conceito de interferência em ondas.

### Pré-requisitos

Para esta aula, é importante revisar interferência de ondas: Aula 12 da disciplina Física 2B e Aula 8 da disciplina Física 4A.

Não leve essa aula muito a sério... apenas relaxe e desfrute dela. Vou contar para vocês como a natureza se comporta. Se você admitir simplesmente que ela tem esse comportamento, você a considerará encantadora e cativante. Não fique dizendo para si próprio: "Mas como ela pode ser assim?" porque nesse caso você entrará em um beco sem saída do qual ninguém escapou ainda. Ninguém sabe como a natureza pode ser assim.



Richard Feynman  
Prêmio Nobel de Física 1965

## A MECÂNICA DOS OBJETOS MICROSCÓPICOS

Iniciamos nosso estudo de Física pela chamada mecânica newtoniana ou mecânica clássica. A mecânica clássica, que foi o objeto de estudo nas disciplinas Física 1A e Física 1B, é a mecânica dos objetos *macroscópicos*, ou seja, aqueles de dimensões palpáveis ou visíveis a olho nu: bolas, projéteis, carros, aviões, planetas etc. Aprendemos que tais objetos obedecem muito bem às leis de Newton. Em muitas situações, podem ser descritos como *partículas* ou *corpúsculos*, ou seja, sua estrutura interna pode muitas vezes ser ignorada e eles podem ser descritos como objetos pontuais que se movem no espaço. O comportamento destes objetos consiste na física mais corriqueira do nosso dia-a-dia, aquela que aprendemos de forma intuitiva desde que somos bebês, de modo que pensamos ter uma noção bem clara de como deve se comportar uma partícula em uma determinada situação.

Em seguida, aprendemos a física das *ondas* na disciplina Física 2A. Por exemplo, vimos que as ondas sonoras ou as ondas na superfície de um lago apresentam um comportamento bem diferente daquele das partículas (apesar de o ar e a água, os meios onde estas ondas se propagam, serem formados por partículas). Surgem, por exemplo, os fenômenos de *difração* e *interferência*, que não podem ser descritos pela mecânica das partículas. Aprendemos, ainda, na disciplina Física 4A, que a luz é um tipo de onda eletromagnética.

Neste curso, iremos introduzir uma mecânica completamente nova e diferente da mecânica clássica e da mecânica ondulatória. É a mecânica que descreve os objetos microscópicos, como átomos e elétrons, por exemplo. Veremos que tais objetos se comportam em muitas situações como partículas e, em outras, como ondas. Mas não são nem uma coisa nem outra! Eles obedecem às leis da *mecânica quântica*.



Você teve uma breve introdução a algumas idéias e experimentos iniciais da física quântica na disciplina Física 4B. Na presente disciplina, vamos explorar com muito mais profundidade o mundo quântico.

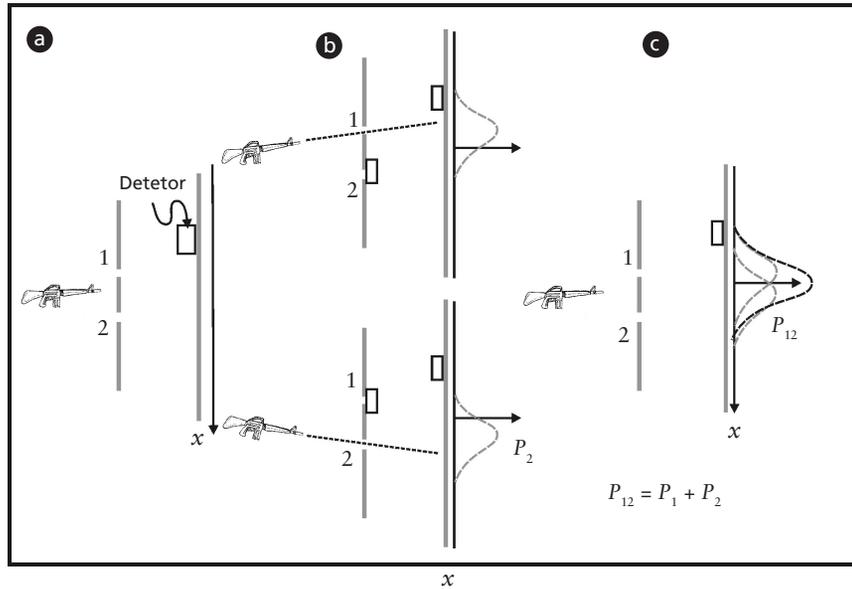
Apesar de lidar com objetos de dimensões atômicas, pouco familiares a nós, a mecânica quântica não é uma teoria abstrata ou sem aplicações no mundo real. Pelo contrário, muitas invenções que fazem parte do nosso dia-a-dia só foram possíveis por causa da mecânica quântica: o computador, o laser, a energia nuclear, as imagens de ressonância magnética etc. Em 2000, a revista *Scientific American* estimou que 1/3 do produto interno bruto dos EUA estava ligado à mecânica quântica!

Apesar de estarmos descrevendo-a como “nova”, a mecânica quântica já é uma anciã, tem mais de 100 anos de idade! E ela não surgiu de uma inspiração teórica, pelo contrário, foi uma necessidade imposta (a contragosto de muitos) pelos experimentos realizados naquela época, que mostravam resultados em contradição marcante com a física clássica. A história destes experimentos e do desenvolvimento e aceitação graduais da nova teoria quântica está descrita em vários livros e é extremamente rica e interessante, mas está além dos objetivos desta disciplina.

## UMA EXPERIÊNCIA COM PROJÉTEIS

Para mostrar que os objetos microscópicos não se comportam nem como ondas nem como partículas, escolhemos um experimento onde este comportamento se manifesta de forma marcante: a experiência de interferência por uma fenda dupla. Você se lembra quando viu esta experiência no caso de ondas de luz na Aula 8 da disciplina Física 4A? Tornaremos a tratar deste caso (ondas) em breve, mas, inicialmente, iremos descrever o comportamento de projéteis (balas de canhão ou bolinhas de gude, por exemplo) ao passar por uma fenda dupla. Em seguida, iremos analisar o comportamento das ondas e, finalmente, o de objetos microscópicos, como os elétrons.

O aparato experimental está esquematizado na **Figura 1.1.a**. Há uma metralhadora que dispara projéteis, um de cada vez, em direções aleatórias. Em frente à metralhadora, há uma parede que impede a passagem dos projéteis, exceto por dois pequenos buracos. Mais adiante, há um anteparo, onde os projéteis que conseguem passar pelos buracos se alojam, e sua chegada é verificada por um detetor deslocável. Este detetor pode ser uma caixa com areia, por exemplo, onde os projéteis se depositam. Depois, podemos contar quantos projéteis chegaram em cada posição da parede em um certo intervalo de tempo. A posição ao longo da parede é descrita por uma coordenada  $x$ , medida a partir do centro.



**Figura 1.1:** (a) Esquema do experimento de fenda dupla com projéteis. (b) Situação experimental e distribuições de probabilidades obtidas quando uma das fendas é fechada. (c) Situação experimental e distribuição de probabilidade obtida quando as duas fendas estão abertas.

Nossa primeira observação parece um pouco óbvia, dada nossa grande intuição com partículas clássicas: cada projétil chega intacto ao detetor, como se fossem “pacotes” idênticos, um de cada vez. É claro, estamos supondo que são projéteis indestrutíveis... Não se observa a chegada de “meio projétil” ou a chegada de dois projéteis simultaneamente em lugares diferentes. *Projéteis sempre chegam em pacotes idênticos.*

Em seguida, usando esse aparato simples, podemos tentar responder à seguinte pergunta: “Qual a probabilidade de um projétil acertar a posição  $x$ ?” Naturalmente, temos de falar em probabilidades, pois é impossível saber com certeza absoluta a trajetória de cada partícula, já que elas são lançadas em direções aleatórias e podem ricochetear de forma imprevisível nas bordas dos buracos. Mas a probabilidade pode ser facilmente medida, tomando-se a fração de projéteis que chegam a uma certa posição em relação ao número total de projéteis que acertam todo o anteparo, no mesmo intervalo de tempo. Se fizermos a medida, obteremos a distribuição de probabilidades  $P_{12}$  mostrada na **Figura 1.1.c**, que tem este nome porque os projéteis podem passar tanto pelo buraco 1 como pelo buraco 2. A curva  $P_{12}$  tem um máximo em torno de  $x = 0$  e decai para valores muito pequenos se tomamos valores de  $x$  muito distantes da origem.

Mas por que o valor máximo de  $P_{12}$  fica em torno de  $x = 0$ ? De fato, isto acontece apenas se a distância entre os buracos for suficientemente pequena (veja a Atividade 1 desta aula), mas é com esta situação que queremos lidar. Podemos entender isto se fizermos novamente o experimento, mas, desta vez, fechando um dos buracos, como mostra a **Figura 1.1.b**. Se fechamos o buraco 2, medimos a distribuição de probabilidades  $P_1$  mostrada no painel superior. E se fechamos o buraco 1, medimos a distribuição  $P_2$  mostrada do painel inferior. Como esperado, a distribuição  $P_1$  tem seu valor máximo na posição  $x$  na parede que está ao longo da reta tracejada que vai da metralhadora ao buraco 1. E a distribuição  $P_2$  se comporta de forma análoga.

A distribuição conjunta  $P_{12}$  é simplesmente a soma das distribuições parciais:

$$P_{12} = P_1 + P_2 \quad (1.1)$$

Ou seja, o efeito obtido quando temos os dois buracos abertos é a soma dos efeitos de cada buraco individualmente. Isto quer dizer que *projéteis não sofrem interferência*, como veremos a seguir que ocorre com ondas.

Isto resume nosso entendimento sobre projéteis incidindo em uma fenda dupla: primeiro, eles chegam em pacotes idênticos; segundo, não apresentam interferência.

### ATIVIDADE



Uma metralhadora despeja balas em uma fenda dupla, como mostrado na **Figura 1.1**. As balas passam pelo buraco 1. Elas, então, se depositam no anteparo, de acordo com uma distribuição de probabilidades que pode ser aproximada por uma gaussiana com largura  $\sigma$  e máximo em  $x = d$ , ou seja,  $P_1(x) = Ae^{-(x-d)^2/2\sigma^2}$ , onde  $A$  é um fator de normalização. Já as balas que passam pelo buraco 2 se depositam em torno de  $x = -d$  de forma análoga:  $P_2(x) = Ae^{-(x+d)^2/2\sigma^2}$ . Se a largura  $\sigma$  for muito maior que  $d$ , a distribuição resultante ( $P_{12} = P_1 + P_2$ ) terá um único pico, como na **Figura 1.1.c**. Porém, se  $\sigma$  for muito menor que  $d$ , a distribuição resultante terá dois picos. Encontre, em função de  $d$ , o valor de  $\sigma$  que separa estes dois regimes.

---



---



---

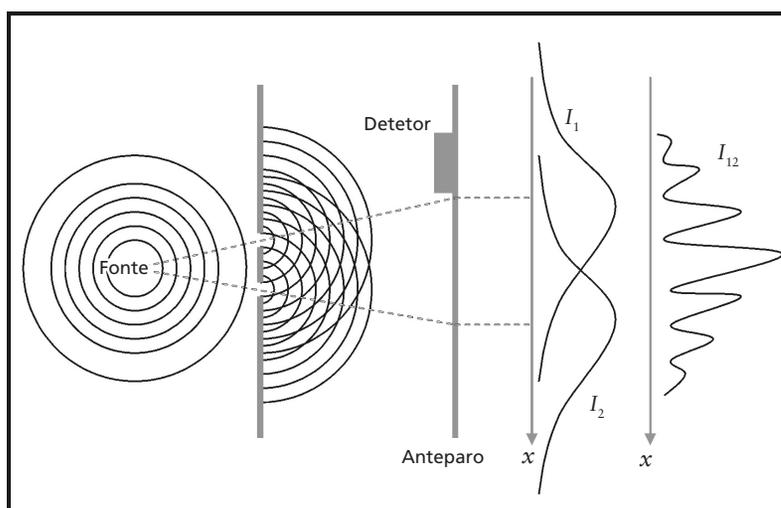
**RESPOSTA COMENTADA**

Graficamente, é muito claro observar se uma curva tem um pico ou dois picos. A dificuldade deste problema está em expressar matematicamente estas situações. Bem, sabemos que uma função que apresenta um máximo local tem derivada nula neste ponto e derivada segunda negativa. Já se a função tiver um mínimo local, ela terá derivada nula e derivada segunda positiva. Faça agora um esboço da distribuição  $P_{12}$  nas duas situações: com um pico e com dois picos. Quais as diferenças essenciais entre os dois gráficos que você fez? Uma delas é óbvia: uma distribuição tem um pico e a outra tem dois. Mas repare também no comportamento de  $P_{12}$  na posição  $x = 0$ . Note que  $P_{12}$  será máxima neste ponto se tiver um pico (na verdade, o pico ocorre precisamente em  $x = 0$ ) ou será mínima se tiver dois picos. Como dissemos, o que distingue matematicamente estas duas situações é o sinal da derivada segunda. Assim, o valor limítrofe de  $d$  que separa estes dois regimes pode ser encontrado impondo a condição de derivada nula, ou seja, nem positiva nem negativa. Portanto, imponha a condição  $\left. \frac{d^2 P_{12}}{dx^2} \right|_{x=0} = 0$  que você chegará na resposta depois de fazer um pouco de álgebra.

**UMA EXPERIÊNCIA COM ONDAS**

Vamos ver agora o que acontece quando usamos o mesmo aparato experimental para estudar o comportamento de ondas de água (e não mais de projéteis). O esquema da experiência está mostrado na **Figura 1.2**. No lugar do canhão, temos agora um dispositivo gerador de ondas circulares, uma *fonte de ondas*. Pode ser, por exemplo, um pequeno objeto que oscila para cima e para baixo na superfície da água. Temos ainda a parede com dois buracos e, mais adiante, um anteparo absorvedor de ondas, construído de modo que as ondas não sejam refletidas ao incidirem sobre ele (uma praia em miniatura, por exemplo). No anteparo absorvedor, coloca-se um pequeno detetor da intensidade das ondas, do qual podemos variar a posição  $x$ . Este detetor pode ser uma pequena bóia que oscila para cima e para baixo, ao sabor das ondas que chegam até ela. Lembre-se da Aula 11 de Física 2A: a intensidade da onda não é exatamente a amplitude da oscilação deste objeto, mas sim proporcional ao quadrado da amplitude!

O que observamos quando fazemos o experimento? Em primeiro lugar, observa-se que a onda que chega ao detetor pode ter qualquer intensidade. Ou seja, a bóia pode ser mover com qualquer amplitude, ainda que seja muito pequena. Este resultado é bastante diferente do que observamos com projéteis: partículas “chegam” ou “não chegam” em pacotes iguais, ou seja, com intensidades “discretas” ou “quantizadas”. Já as ondas chegam com qualquer intensidade, ou seja, a intensidade varia de forma “contínua”.



**Figura 1.2:** Esquema do experimento de fenda dupla com ondas. As intensidades  $I_1$  e  $I_2$  correspondem às situações onde apenas os buracos 1 ou 2 estão abertos, respectivamente. Já a intensidade  $I_{12}$  corresponde à situação em que os dois buracos estão abertos simultaneamente.

Quando medimos a intensidade da onda  $I_{12}$  em função da posição  $x$  do detetor, obtemos o gráfico mostrado na **Figura 1.2**. Note que a intensidade oscila fortemente com a posição, passando por valores máximos (picos) e mínimos (vales). Este gráfico nos é familiar dos nossos estudos em física ondulatória e ótica (Física 2A e Física 4A): trata-se do conhecido padrão de *interferência* por uma fenda dupla. Conceitualmente, ele pode ser entendido a partir da idéia de que os buracos atuam como geradores de novas ondas circulares, que interferem construtiva ou destrutivamente. Se tamparmos um dos buracos, a interferência desaparece. A curva  $I_1$  da referida figura corresponde à situação em que apenas o buraco 1 é deixado aberto e, para a curva  $I_2$ , apenas o buraco 2 é aberto. Note que estas curvas não têm as oscilações fortes da curva  $I_{12}$ , de modo que, claramente, notamos que  $I_{12} \neq I_1 + I_2$ .

Se  $I_{12} \neq I_1 + I_2$ , como podemos então obter matematicamente uma expressão para a intensidade  $I_{12}$ ? Lembre-se: quando há interferência, a função que representa a onda resultante é a soma das funções das ondas que a compõem. No caso de ondas na superfície da água, a função de onda apropriada é a altura do nível da água. Se soubermos a altura como função da posição e do tempo, teremos a informação completa sobre a propagação da onda. Assim, podemos representar a altura da onda que chega no detector a partir do buraco 1 pela seguinte função:

$$h_1(x) = A_1(x)e^{i\omega t}, \quad (1.2)$$

onde  $x$  é a posição do detector. O fator exponencial complexo  $e^{i\omega t}$  dá conta da dependência temporal da altura, enquanto a amplitude  $A_1$  é um número real e positivo, que depende da posição  $x$ . Como dissemos, a intensidade desta onda é proporcional a  $A_1^2$ . Para nossa argumentação, não é necessário saber exatamente quanto vale o fator de proporcionalidade, de modo que podemos definir a intensidade desta onda simplesmente como

$$I_1 = A_1^2. \quad (1.3)$$

De forma semelhante, a altura  $h_2$  da onda que chega no detector a partir do buraco 2 é dada por:

$$h_2(x) = A_2(x)e^{i(\omega t + \delta)}. \quad (1.4)$$

Note que surge uma *diferença de fase*  $\delta$  entre as duas ondas devido à diferença entre as distâncias percorridas desde os dois buracos até o ponto  $x$ . Da mesma forma, a intensidade é dada pelo quadrado da amplitude:

$$I_2 = A_2^2. \quad (1.5)$$

Na verdade, a altura deve ser uma quantidade real, de modo que a altura da onda que vem do buraco 1 é, de fato, a *parte real* de  $h_1(x)$ . O mesmo vale para a onda 2. Mas usamos o já familiar artifício matemático de generalizar as funções de onda para valores complexos, de modo a facilitar as contas, tendo sempre o cuidado de tomar a parte real no final delas. Note que a intensidade é real, como deve ser!

Estamos agora prontos para obter a altura da onda resultante  $h_{12}$ . Basta somarmos as alturas das duas ondas:

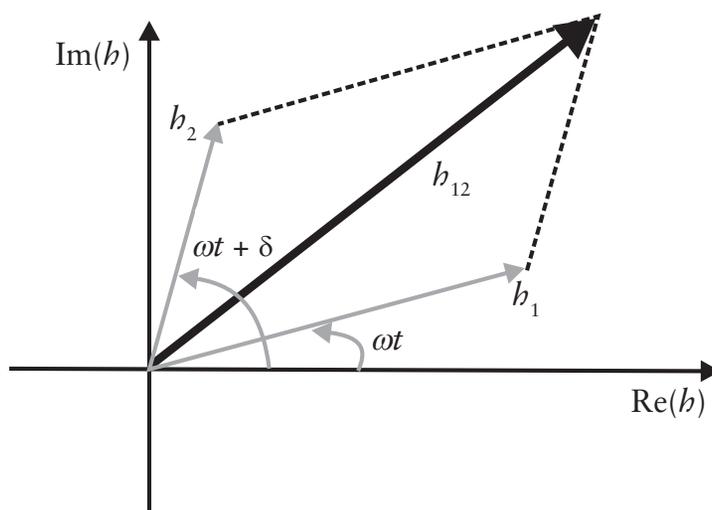
$$h_{12}(x) = h_1(x) + h_2(x) = A_1(x)e^{i\omega t} + A_2(x)e^{i(\omega t + \delta)}. \quad (1.6)$$

É mais fácil fazer esta soma graficamente, usando o conceito de *fasores*, como você viu na Aula 19 de Física 4A. Isto está mostrado na **Figura 1.3**. A partir da lei dos cossenos, obtemos a intensidade da onda resultante:

$$I_{12} = A_{12}^2 = A_1^2 + A_2^2 + 2A_1A_2 \cos \delta. \quad (1.7)$$

ou, em termos das intensidades:

$$I_{12} = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos \delta. \quad (1.8)$$



**Figura 1.3:** Esquema da soma das duas funções complexas  $h_1$  e  $h_2$  através de fasores.

O último termo é precisamente o *termo de interferência*. É por causa dele que  $I_{12} \neq I_1 + I_2$ .

Podemos, então, resumir nosso entendimento sobre o experimento da fenda dupla com ondas de água nos seguintes resultados principais: primeiro, a intensidade pode ter qualquer valor; segundo, há interferência.

Vamos recordar os conceitos mais importantes associados à interferência? Diz-se que há *interferência construtiva* quando a intensidade atinge um valor máximo (picos na curva  $I_{12}$ ). Isto ocorre quando as ondas provenientes dos dois buracos estão em fase (ou seja,  $\delta = 0$ ). Note que a intensidade da onda resultante é maior que a soma das intensidades das duas ondas! Geometricamente, esta condição é obtida quando a diferença entre as distâncias percorridas pelas duas ondas, desde os respectivos buracos até o detetor, for um múltiplo inteiro  $n$  do comprimento de onda  $\lambda$ :

$$|d_1 - d_2| = n\lambda \quad (\text{interferência construtiva})$$

Já a situação de *interferência destrutiva* corresponde aos mínimos de intensidade, ocorrendo quando as duas ondas estiverem fora de fase (ou, mais precisamente, com uma diferença de fase de  $\pi$ ). Esta condição é obtida quando a diferença das distâncias percorridas for um múltiplo inteiro ímpar de um meio comprimento de onda:

$$|d_1 - d_2| = (2n + 1) \frac{\lambda}{2} \quad (\text{interferência destrutiva})$$

### ATIVIDADE FINAL

Obtenha algebricamente a Equação (1.8) a partir da Equação (1.6).

---



---



---

#### RESPOSTA COMENTADA

Para chegar à resposta, você precisará apenas lembrar que  $e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$  e, depois de chegar a uma expressão para  $h_{12}$ , obter seu módulo ao quadrado  $|h_{12}|^2$ .

**RESUMO**

Analisamos o experimento de fenda dupla realizado de duas formas distintas: uma com projéteis e a outra com ondas. Observamos que projéteis chegam ao detetor em pacotes idênticos e não apresentam interferência. Em contraste com este comportamento, as ondas podem ser detetadas com qualquer intensidade e apresentam interferência. Esses comportamentos são característicos das partículas e das ondas clássicas. Será interessante compará-los com o comportamento de partículas quânticas, o que faremos na próxima aula.

**INFORMAÇÃO SOBRE A PRÓXIMA AULA**

Na próxima aula, descreveremos o experimento de fenda dupla realizado com partículas quânticas, como elétrons.



## Experiências com elétrons

AULA

# 2

### Meta da aula

Descrever uma experiência de interferência por uma fenda dupla com partículas quânticas.

- analisar o comportamento de elétrons ao passar por uma fenda dupla;
- comparar este comportamento com o de projéteis e ondas, descritos na aula anterior desta disciplina;
- introduzir o conceito de interferência de elétrons.

### Pré-requisitos

Para uma melhor compreensão desta aula, é importante a revisão dos seguintes conteúdos: interferência por uma fenda dupla com ondas (Aula 8 de Física 4A); fótons e dualidade onda-partícula (Aula 8 de Física 4B); ondas de matéria e o comprimento de onda de de Broglie (Aula 9 de Física 4B).

**CONTADOR GEIGER**

Instrumento usado para detectar elétrons ou outros tipos de partículas quânticas. É formado por um tubo de gás (normalmente argônio) que conduz a eletricidade quando uma partícula passa por ele, ionizando-o. O instrumento amplifica o sinal, produzindo um “clique” para cada partícula que passa pelo gás.

**UMA EXPERIÊNCIA COM ELÉTRONS**

Vamos ver agora o que acontece quando realizamos o mesmo experimento de fenda dupla, mas agora com elétrons. Para isso, usamos um canhão de elétrons. Este pode ser um fio metálico de tungstênio (como o filamento de uma lâmpada) que, quando aquecido, emite elétrons. Como nos dois experimentos descritos na aula anterior, os elétrons incidem sobre uma parede que tem dois buracos e atingem um anteparo no qual há um detector deslocável. Um detector para elétrons pode ser um **CONTADOR GEIGER** ou um multiplicador de elétrons que, conectado a um alto-falante, produz um ruído toda vez que for atingido por um elétron.

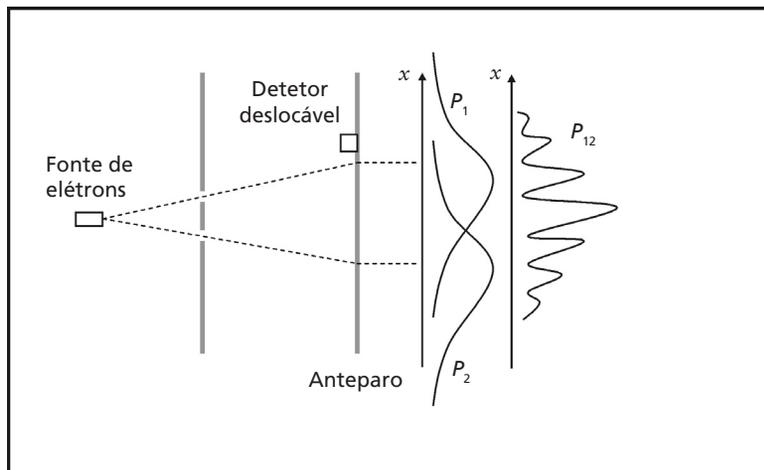
A primeira coisa que notamos é que a chegada dos elétrons no detector produz sons de “cliques” bem definidos, vindos do alto-falante. Se interpretamos um som de “clique” como sendo a chegada de um elétron no detector, quase todas as nossas observações levam a crer que os elétrons se comportam como projéteis:

a. Todos os “cliques” são idênticos: não existem “meios-cliques”, por exemplo. Portanto, os *elétrons chegam em pacotes idênticos*.

b. Os “cliques” acontecem de forma aleatória, ou seja, ouve-se algo como: clique.... clique..... clique-clique.. clique..... clique-clique-clique..... clique. A análise desse padrão parece indicar que o instante de chegada de cada elétron é imprevisível.

c. Nunca escutamos dois “cliques” simultaneamente, mesmo que coloquemos vários detectores cobrindo totalmente o anteparo. Isso quer dizer que os elétrons chegam um de cada vez.

d. Se aumentarmos a temperatura do fio, teremos mais elétrons chegando ao detector por unidade de tempo. Assim como fizemos com projéteis, podemos associar a taxa média de chegada dos elétrons à probabilidade de chegada, para cada posição  $x$  no anteparo.



**Figura 2.1:** Esquema do experimento de fenda dupla com elétrons. As probabilidades  $P_1$  e  $P_2$  correspondem, respectivamente, às situações nas quais apenas os buracos 1 ou 2 estão abertos. Já a probabilidade  $P_{12}$  corresponde à situação em que os dois buracos estão abertos simultaneamente.

O que acontece então quando computamos esta probabilidade? Bem, todos os resultados descritos anteriormente parecem ser consistentes com o fato de o elétron ser um projétil, como uma pequeníssima bolinha de gude. Portanto, nada mais razoável do que esperar que observemos a mesma curva descrita na **Figura 1.1** da Aula 1 desta disciplina. Aliás, toda a nossa intuição clássica nos leva a pensar no elétron como uma “bolinha”. Pois bem, este é o momento crucial em que nossa intuição falha. A probabilidade  $P_{12}$  que medimos para o elétron está mostrada na **Figura 2.1**. Note que ela tem oscilações que não existiam no caso dos projéteis. De fato, elas lembram muito as oscilações que observamos no caso das ondas e que interpretamos como *interferência*.

Decididamente, o elétron não é uma “bolinha”...

## INTERFERÊNCIA DE ONDAS DE ELÉTRONS

Mas como pode surgir um padrão de interferência de projéteis? Vimos, no caso das ondas, que há uma interferência entre as ondas que passam pelo buraco 1 e as que passam pelo buraco 2. As ondas passam ao mesmo tempo pelos dois buracos. Poderiam os elétrons que passam pelo buraco 1 estar interferindo de alguma forma com os que passam pelo buraco 2? Sabemos que os elétrons são partículas carregadas negativamente e que, portanto, devem interagir entre si de acordo com a Lei de Coulomb, como vimos na disciplina Física 3A. Poderia o padrão complicado de interferência surgir por meio da interação coulombiana ou, em outras palavras, a partir de um intrincado mecanismo de colisões entre os elétrons?

Podemos testar experimentalmente esta hipótese. Já dissemos que os elétrons chegam um de cada vez no anteparo. Mas talvez eles estejam sendo emitidos com uma taxa muito alta, de modo que possamos ter vários elétrons “em vôo” ao mesmo tempo e, portanto, interferindo uns nas trajetórias dos outros. Mas se reduzirmos bastante a temperatura do filamento, podemos diminuir cada vez mais a taxa de emissão de elétrons, até o limite em que tivermos certeza de que há *apenas um* elétron viajando de cada vez desde o emissor até o anteparo. Dessa forma, não há como ocorrer uma interação entre eles. Se fizermos o experimento, a taxa de detecção dos elétrons no anteparo realmente diminui bastante. Os “cliques” se tornam cada vez mais espaçados.

Mas, depois de deixarmos o experimento funcionando por um longo tempo, vai se formando, lentamente, o mesmo padrão de interferência que observamos anteriormente. Nada muda. Parece incrível, mas os elétrons passam um de cada vez pelos buracos e, ainda assim, interferem! É como se o elétron “interferisse com ele mesmo”!

Dizer que um elétron interfere com ele mesmo parece ser uma contradição. Afinal, a própria palavra “interferência” sugere a atuação de dois ou mais objetos no processo. Quem primeiro propôs esta expressão, propositalmente contraditória, para enfatizar a natureza não-intuitiva da interferência quântica, foi o físico inglês Paul Dirac. Na ocasião, ele se referia à experiência de fenda dupla realizada com fótons, as partículas de luz que foram apresentadas a você na Aula 8 de Física 4B. Mas a mesma idéia vale para elétrons também.

Na sua edição de setembro de 2002, a revista *Physics World* elegeu o experimento de fenda dupla com elétrons como o mais belo da história da Física! Veja este artigo em <http://physicsweb.org/articles/world/15/9/1>.

### ATIVIDADE



1. Há vários *sites* na internet nos quais você pode explorar o experimento de fenda dupla de forma “virtual”. Um deles é:

<http://www.physik.uni-muenchen.de/didaktik/Computer/Doppelspalt/dslit.html>

Vamos aprender a interagir com este experimento virtual, pois ele será muito útil para nos ajudar a entender o fenômeno que estamos descrevendo. Siga os seguintes passos:

- a. Entre no *site* e inicie o programa.
- b. Você verá um quadro com retratos dos grandes nomes da Física Quântica. Selecione a linguagem que lhe é mais familiar e clique “ok”. O programa se iniciará imediatamente, abrindo uma janela.
- c. Você verá a montagem do experimento de fenda dupla, reproduzida na **Figura 2.2**. Esta montagem consiste em uma fonte de partículas, uma fenda dupla, uma lâmpada e um anteparo.

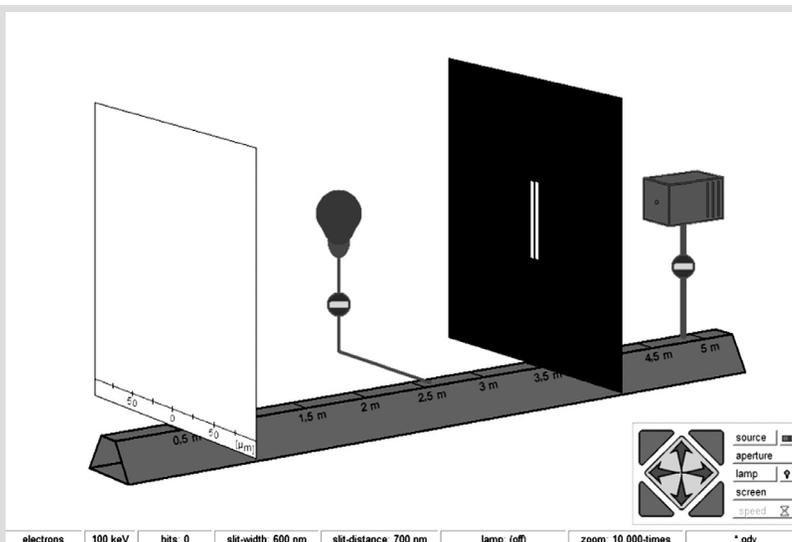


Figura 2.2: Montagem experimental e painel de controle do experimento virtual de interferência por uma fenda dupla.

d. No canto inferior direito da janela, você verá um pequeno painel de controle. Do lado esquerdo deste painel, há setas para posicionar o ângulo de visão do experimento da maneira que você achar melhor. Do lado direito, há vários botões de controle pequenos. Vamos descrevê-los um a um:

**Fonte (source):** Aqui você selecionará o tipo de partícula que irá jogar de encontro à fenda. Você pode optar por projéteis clássicos ou por diferentes partículas quânticas. Poderá também selecionar a energia das partículas que, no caso de partículas quânticas, está relacionada ao comprimento de onda das mesmas. O pequeno botão vermelho à direita do “Fonte” dá início à simulação.

**Abertura (aperture):** Controla as propriedades da fendas, como a largura das mesmas (*slit width*) e o espaçamento entre elas (*slit distance*). Pode-se também abrir ou fechar cada fenda separadamente.

**Lâmpada (lamp):** Com este botão, podemos controlar a intensidade e o comprimento de onda dos fótons que podemos fazer incidir nos elétrons para visualizar sua trajetória, como será descrito na próxima aula. À direita deste botão, o pequeno botão com a figura de uma lâmpada ativa o fluxo de fótons.

**Anteparo (screen):** Aqui você controla as diversas opções de visualização de seus resultados. A visualização normal corresponde a fazer aparecer na tela pequenos pontos vermelhos nas posições em que cada elétron incidiu no anteparo. Se a opção “resultado teórico” (*theo. result*) for ativada, aparecerá, em azul, a distribuição de probabilidades prevista teoricamente para aquelas condições do experimento. Se a opção “contagem” (*evaluation*) for acionada,

surgirá na tela um histograma, em vermelho, com a contagem do número de partículas que chegam em cada ponto do detetor. É possível ainda combinar as opções “resultado teórico” e “contagem”, para que elas apareçam simultaneamente na simulação. Há ainda botões para controlar a ampliação (*zoom*), apagar os resultados para iniciar uma nova simulação (*reset*) e para guardar fotografias de seus resultados em arquivos (*photos*).

Depois dessa longa (mas necessária) explicação sobre o funcionamento do experimento virtual, você deve estar ansioso para fazer sua primeira simulação. Está pronto? Então vamos lá: selecione a fonte para “elétrons” com energia cinética de 100 keV, correspondendo a um comprimento de onda de 4 pm (vamos relembrar, ainda nesta aula, como se relaciona a energia do elétron a seu comprimento de onda). Ajuste a largura das fendas para 400 nm e a distância entre as mesmas para 700 nm. Deixe a lâmpada desligada. Inicie o experimento e veja o que acontece.

#### RESPOSTA COMENTADA

*Observe que os elétrons colidem um de cada vez com o anteparo. Mas, gradualmente, surgirá na tela o padrão de interferências! Não é interessante?*

Ora, mas se os elétrons são pacotes *idênticos e indivisíveis*, poderíamos dizer que, diferentemente das ondas, eles passam ou por um buraco ou pelo outro, e não pelos dois ao mesmo tempo, certo? Está aí uma hipótese que poderíamos testar:

**Hipótese A:** *Cada elétron passa ou pelo buraco 1 ou pelo buraco 2.*

Pela nossa intuição com partículas clássicas, nada parece mais certo do que isso. Supondo que isto seja correto, todos os elétrons que atingem o anteparo se dividem em dois grupos: aqueles que passaram pelo buraco 1 e aqueles que passaram pelo buraco 2. Se isto for verdade, a curva  $P_{12}$  deve ser obtida pela soma de duas curvas:  $P_1$ , ou seja, a distribuição de probabilidades computada usando apenas os elétrons que passaram pelo buraco 1, e  $P_2$ , idem para o buraco 2. Será que podemos fazer este experimento? Bem, parece fácil: basta fechar um dos buracos de cada vez e repetir o experimento, como fizemos com os projéteis na aula passada.



### ATIVIDADE

2. Vamos retornar ao nosso experimento virtual. Agora deixe apenas uma das fendas aberta. Observe o que acontece.

---



---



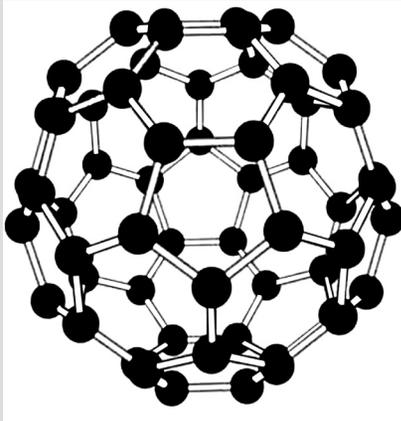
---

### RESPOSTA COMENTADA

*Veja que as oscilações rápidas que caracterizam a interferência desaparecem. Porém, perceba que algumas oscilações de menor periodicidade permanecem. Elas ocorrem devido à difração dos elétrons pela fenda que está aberta, do mesmo modo que ocorre com a luz (lembre-se da Aula 8 de Física 4A). Não nos preocupamos muito com a difração porque queríamos concentrar nossa atenção no fenômeno da interferência. Por isso, as curvas  $P_1$  e  $P_2$  da **Figura 2.1** não mostram as oscilações de difração. Estas são curvas apenas esquemáticas. De fato, a difração existe e é também uma manifestação da natureza ondulatória dos elétrons, mas no momento ela não é importante para a nossa argumentação. Porém, é preciso deixar este ponto bem esclarecido.*

Bem, fizemos o experimento e o resultado está reproduzido esquematicamente na **Figura 2.1**. Espere um minuto. Nosso resultado experimental mostra que  $P_{12} \neq P_1 + P_2$ !

Tudo parece muito misterioso. Elétrons chegam em “pacotes” e, ainda assim, exibem interferência típica das ondas. Este é um dos mistérios fundamentais da mecânica quântica: a *dualidade onda-partícula*, que você estudou na Aula 8 de Física 4B, no contexto do fóton. Como o físico americano Richard Feynman sugeriu no início deste módulo, vamos deixar de lado as tentativas de entender esse mistério. Tenha certeza de que muitos físicos famosos dedicaram boa parte de suas vidas tentando fazê-lo, sem sucesso. Vamos apenas *aceitá-lo* e explorá-lo um pouco mais. Ainda vamos descobrir coisas muito interessantes em consequência dele!



**Figura 2.3:** Uma molécula de  $C_{60}$ , ou *buckyball*, formada por 60 átomos de carbono dispostos de forma idêntica a uma bola de futebol.

A experiência de interferência de elétrons por uma fenda dupla foi realizada pela primeira vez por Claus Jönsson, em 1961. Mais recentemente, em 1991, Carnal e Mlynek realizaram a mesma experiência com átomos em vez de elétrons. Sim, átomos, que são milhares de vezes mais pesados que os elétrons, e ainda assim são partículas quânticas. Surpreso? Pois bem, em 1999, Arndt e colaboradores viram interferência de fenda dupla com moléculas de  $C_{60}$ , também chamadas de *buckyballs*. Estas moléculas, mostradas na **Figura 2.3**, contêm 60 átomos de carbono, dispostos como se formassem uma bola de futebol. São centenas de milhares de vezes mais pesadas que um elétron. Então, qual o limite que separa o mundo clássico do mundo quântico? Será que um dia poderemos ver interferência entre bolas de futebol de verdade? Voltaremos a esta questão em breve.

Se  $P_{12} \neq P_1 + P_2$ , haverá alguma outra maneira de obtermos  $P_{12}$  a partir de  $P_1$  e  $P_2$ ? Surpreendentemente, a resposta é bastante simples. Basta usarmos a matemática das ondas, que relembramos na aula passada. Note que a curva  $P_{12}$  é muito parecida com a curva de intensidades  $I_{12}$  que obtivemos na Aula 1 para as ondas. Como no caso das ondas, a intensidade não é a quantidade fundamental, mas sim a função de onda. Lembre-se: para ondas na superfície da água, a *função de onda* mais conveniente era a da altura do nível da água, que consideramos como uma variável complexa, para facilitar a matemática.

Vimos na Aula 9 de Física 4B que o físico francês Pierre de Broglie foi o primeiro a associar uma onda ao elétron. Na ocasião, chamamos essas ondas de “ondas de matéria”. Segundo de Broglie, um elétron (ou qualquer partícula microscópica) que se desloca com momento linear  $p$  tem associada a si uma onda com comprimento de onda  $\lambda$  tal que:

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad (2.1)$$

onde  $h = 6,63 \times 10^{-34}$  J.s é a constante de Planck. Iremos mais a fundo nesta idéia e vamos supor que o elétron é descrito por uma função de onda complexa  $\psi$ . Cada situação corresponde a uma função de onda diferente: se apenas o buraco 1 estiver aberto, teremos a função de onda  $\psi_1$ ; se apenas o buraco 2 estiver aberto, teremos a função de onda  $\psi_2$ ; e se ambos os buracos, 1 e 2, estiverem abertos, teremos a função de onda  $\psi_{12}$ . Em analogia com as ondas, temos  $\psi_{12} = \psi_1 + \psi_2$ . A partir daí, como podemos obter a probabilidade? Você se lembra do caso das ondas, onde a intensidade era proporcional ao quadrado da amplitude da onda? Algo análogo ocorre com o elétron, sendo que agora *a probabilidade é proporcional ao módulo quadrado da função de onda*. Como fizemos com as ondas na aula anterior, ignoramos, por enquanto, o coeficiente de proporcionalidade e escrevemos:

$$\begin{aligned} P_1 &= |\psi_1|^2 \\ P_2 &= |\psi_2|^2 \\ P_{12} &= |\psi_1 + \psi_2|^2 \end{aligned} \quad (2.2)$$

Diz-se que a função de onda de uma partícula quântica é uma amplitude de probabilidade.

Lembre-se: para calcular o módulo ao quadrado de um número complexo, multiplica-se o número pelo seu complexo conjugado, ou seja,  $|\psi|^2 = \psi\psi^*$ . Repare que  $|\psi|^2$  deve ser um número real e positivo. Afinal, toda probabilidade que se preza deve ser real e positiva.

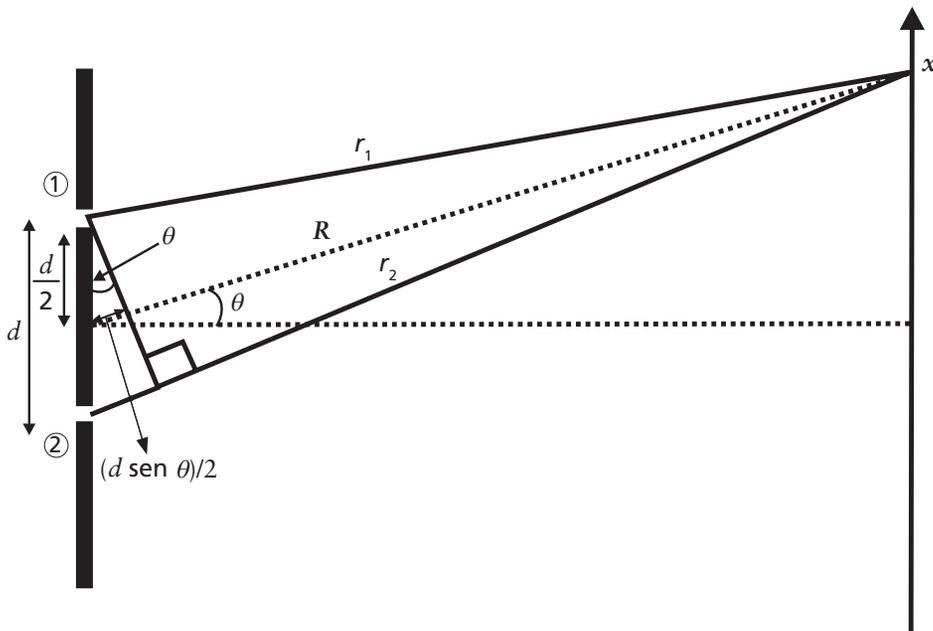
Como se vê, a matemática das ondas nos explica naturalmente o resultado encontrado no experimento, pois dela surge naturalmente o fenômeno de interferência. Mas então, se a soma dos efeitos de cada um dos buracos é diferente do efeito conjunto dos dois buracos abertos, a Hipótese A está incorreta! Não é verdade que os elétrons passam por um buraco ou pelo outro. Mas como pode ser isto, se eles chegam em pacotes? Será que eles fazem algo complicado, como se dividir em dois, passar pelos buracos e depois se juntar novamente em um só? Somos tentados a imaginar qualquer coisa, por mais absurda que seja, para salvar os conceitos clássicos de partícula e trajetória, bastante consolidados em nossa intuição física. Esta nos parece tão afrontada que não resistimos: temos de fazer um outro experimento para testar a Hipótese A. Será que não é possível observar os elétrons e ver por onde eles passam? Faremos isso na próxima aula.

### ATIVIDADE FINAL

1. Vamos estudar de forma mais quantitativa a interferência de elétrons. Vamos supor que nossa fonte emita elétrons com energia cinética de 10eV.

a. Qual o comprimento de onda da onda associada aos elétrons?

b. Suponha agora que os dois buracos são fontes de ondas circulares, exatamente como na experiência de interferência de luz descrita na Aula 8 de Física 4A. Reproduzimos a seguir a **Figura 8.5** daquela aula, que descreve a geometria do problema.



**Figura 2.4:** Descrição geométrica da experiência de fenda dupla.

Por analogia com aquela situação (veja a Equação (8.18) da Aula 8 de Física 4A), podemos propor as seguintes expressões para as funções de onda  $\psi_1$  e  $\psi_2$  no ponto  $x$ :

$$\psi_1 = Ae^{ikr_1}; \psi_2 = Ae^{ikr_2}, \quad (2.3)$$

onde  $A$  é uma constante. Usando as relações geométricas  $r_1 \approx R - \frac{d}{2} \sin \theta$  e  $r_2 \approx R - \frac{d}{2} \sin \theta$ , e expressando  $\sin \theta$  em termos da coordenada  $x$ , obtenha  $\psi_1$  e  $\psi_2$  em função de  $x$ . Dica: Use o limite  $R \gg d$ , onde  $\sin \theta \approx \tan \theta$ .

c. Calcule as probabilidades  $P_1$ ,  $P_2$  e  $P_{12}$  em função de  $x$ . O que você pode comentar sobre o seu resultado?

d. Tome os valores numéricos  $d = 1\text{mm}$  e  $R = 1\text{m}$ . Qual é a distância entre dois máximos consecutivos de probabilidade no padrão de interferência?

e. Repita o item (d) para uma molécula de  $C_{60}$  e para uma bola de futebol de cerca de  $1\text{kg}$ . Nos dois casos, considere que a energia cinética não se altera, sendo ainda  $10\text{eV}$  (ainda que seja muito difícil imprimir uma energia cinética tão baixa a uma bola de futebol!). Considere apenas a variação na massa. Você agora consegue entender por que a manifestação interferência quântica se torna impossível com objetos macroscópicos?

### RESPOSTA COMENTADA

Inicialmente, no item a, você terá de encontrar o comprimento de onda dos elétrons, usando a relação de de Broglie ( $\lambda = h/p$ ) e a relação entre momento linear e energia cinética de uma partícula ( $E = p^2/2m$ ). Tome cuidado com a conversão de unidades!

No item b, você deverá usar a aproximação  $\sin \theta \approx d/R$  (você consegue entender por quê?) e chegar ao seguinte resultado:

$$\psi_1 = Ae^{ikR} e^{-iqx}; \quad \psi_2 = Ae^{ikR} e^{iqx}, \quad \text{onde } q = \frac{kd}{2R}.$$

No item c, usando a receita da Equação (2.2), você chegará ao resultado  $P_1 = P_2 = |A|^2$ , ou seja, a probabilidade é constante, não depende de  $x$ . Assim, não há as oscilações típicas de interferência. Mas você pode agora estar confuso, pois as probabilidades  $P_1$  e  $P_2$  mostradas na **Figura 2.1** não são constantes, e sim curvas com forma de sino. Não se preocupe com este ponto. A razão disso é que o caminho que leva às expressões (2.3) envolve algumas aproximações. Estas aproximações estão melhor descritas na Aula 8 de Física 4A. Mais uma vez, o ponto que queremos enfatizar é que não aparecem as oscilações de interferência.

No entanto, essas oscilações aparecem claramente na distribuição de probabilidades, no caso de ambos os buracos estarem abertos. Você deve encontrar  $P_{12} = 4|A|^2 \cos^2(qx)$ . No item d, usando os valores numéricos propostos, você deverá encontrar algo da ordem de  $0,1\text{mm}$  para distâncias entre máximos consecutivos de probabilidade. É pequeno, mas mensurável.

*Em contrapartida, no item e, você verá que essas distâncias se tornam muito pequenas quando a massa da partícula aumenta. No caso de  $C_{60}$ , você deve encontrar distâncias cerca de mil vezes menores que no caso de elétrons. No caso de uma bola de futebol, a distância entre máximos consecutivos é menor por um fator  $10^{-17}$  em comparação com o caso eletrônico, tornando-se impossível de ser medida!*

Explore um pouco mais o experimento virtual de interferência por uma fenda dupla descrito nesta aula. Entre no *site* e brinque um pouco com ele, explorando e modificando os diversos parâmetros, tentando entender os resultados de cada experimento.

## RESUMO

Partículas microscópicas, como elétrons, têm um comportamento peculiar ao passar por uma fenda dupla. Este comportamento é diferente tanto de projéteis como de ondas. Ele tem características de ambos, o que designamos como *dualidade onda-partícula*. É necessário aprender também a usar a matemática das ondas para calcular as probabilidades de encontrar o elétron em determinadas posições do espaço.

## INFORMAÇÃO SOBRE A PRÓXIMA AULA

Na próxima aula, tentaremos mais uma vez fazer uma medida da trajetória dos elétrons, ou seja, procuraremos determinar por qual buraco eles passam. Veremos que isto vai nos levar a efeitos muito interessantes!

# O Princípio da Complementaridade e o papel do observador na Mecânica Quântica

AULA

3

## Metas da aula

Descrever a experiência de interferência por uma fenda dupla com elétrons, na qual a trajetória destes é observada por partículas de luz (fótons), e discutir o Princípio da Complementaridade e o papel do observador na Mecânica Quântica.

## objetivos

- analisar o desaparecimento do padrão de interferência de elétrons, quando tentamos observá-los com fótons;
- rever o conceito de fótons, as partículas de luz;
- discutir o Princípio da Complementaridade;
- discutir o papel do observador na Mecânica Quântica.

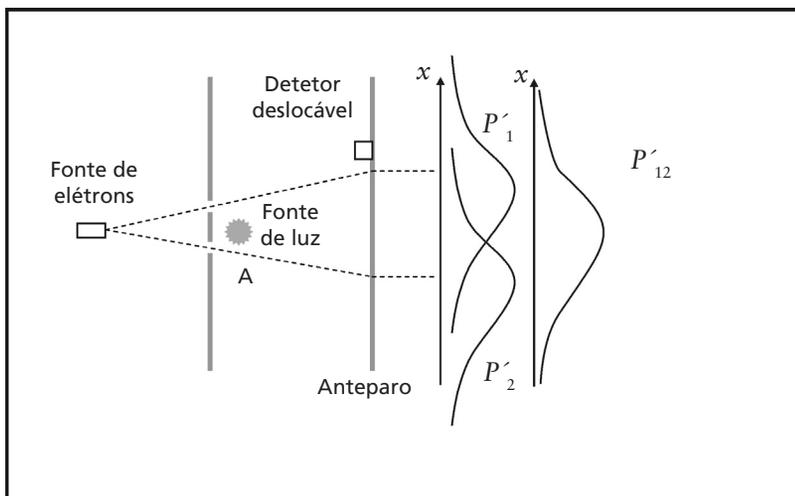
## Pré-requisitos

Para uma melhor compreensão desta aula, é importante que você revise: fótons e dualidade onda-partícula (Aula 8 de Física 4B); ondas de matéria e o comprimento de onda de de Broglie (Aula 9 de Física 4B).

## OBSERVANDO OS ELÉTRONS

Como prometemos na Aula 2, vamos agora modificar um pouco nosso experimento para tentar observar os elétrons. Atrás da parede com fenda dupla, introduzimos uma fonte de luz muito brilhante, como mostra a **Figura 3.1**. Sabemos que os elétrons espalham a luz, de maneira que veremos um *flash* luminoso toda vez que um elétron passar próximo à fonte de luz. Se o *flash* estiver vindo das proximidades do buraco 2, como por exemplo do ponto *A* da **Figura 3.1**, saberemos que o elétron passou pelo buraco 2. Idem para o buraco 1. Se virmos *flashes* simultâneos vindos das proximidades dos dois buracos, poderemos concluir que o elétron se dividiu em dois. Parece simples, vamos então fazer o experimento!

**Figura 3.1:** Esquema do experimento de fenda dupla com elétrons sendo observados por fótons. As probabilidades  $P'_1$  e  $P'_2$  correspondem às situações nas quais apenas os buracos 1 ou 2 estão abertos, respectivamente. Já a probabilidade  $P'_{12}$  corresponde à situação em que os dois buracos estão abertos simultaneamente.



### ATIVIDADE



1. Vamos voltar ao nosso experimento virtual da fenda dupla descrito na Aula 2. Ajuste as condições do experimento de forma idêntica ao que foi feito na Atividade 1 da Aula 2, com uma única diferença: ajuste a lâmpada, para que ela tenha uma intensidade máxima (100%) e um comprimento de onda de 380nm (cor azul). Execute o experimento com a lâmpada ligada. O que você observa?

---

---

---

**RESPOSTA**

*Veja que a interferência desaparece quando ligamos a lâmpada!*

O que aconteceu? Se pudéssemos analisar o experimento com mais detalhe, iríamos observar que sempre que ouvimos um “clique” do nosso detector, não importa onde ele esteja, vemos também um *flash* vindo do buraco 1 ou do buraco 2, mas nunca dos dois ao mesmo tempo. Ficamos um pouco aliviados: seria mesmo um pouco complicado descrever um elétron que se divide. Concluímos, por esse experimento, que a hipótese A é correta, ou seja, que os elétrons passam por um buraco ou pelo outro! Mas espere um minuto... Na aula passada, tínhamos concluído exatamente o oposto, a partir da análise das probabilidades (ou seja, que  $P_{12} \neq P_1 + P_2$ ).

Vamos então computar novamente as probabilidades, desta vez com a nossa fonte de luz ligada. Cada vez que um elétron chega ao detector, olhamos a posição do *flash* para sabermos por onde ele passou. Assim, podemos computar duas curvas de probabilidade:  $P'_1$  (contendo apenas os elétrons que passaram pelo buraco 1) e  $P'_2$  (contendo apenas os elétrons que passaram pelo buraco 2). Essas curvas estão mostradas na **Figura 3.1**. Note que elas são bem parecidas com as curvas  $P'_1$  e  $P'_2$ , que computamos na Aula 2, fechando um dos buracos de cada vez. De fato, as curvas são idênticas, ou seja,  $P'_1 = P_1$  e  $P'_2 = P_2$ . Isto é ótimo! Significa que não faz diferença a maneira como determinamos por qual buraco o elétron passa, o resultado final é o mesmo. Ou seja, não importa se essa determinação é feita bloqueando um dos buracos ou observando a trajetória do elétron com luz, pois obteremos o mesmo resultado para as distribuições de probabilidade. Temos a sensação de que estamos aos poucos “domando” nosso experimento.

Mas o que obtemos agora para a probabilidade total  $P'_{12}$ ? Na verdade, é bem simples obtê-la, basta somarmos:  $P'_{12} = P'_1 + P'_2 = P_1 + P_2$ . É como se fizessemos de conta que não prestamos atenção no *flash* que indica por qual buraco o elétron passou. A distribuição de probabilidades total é também mostrada na **Figura 3.1**. Ora, então concluímos que, *quando observamos os elétrons, o padrão de interferência desaparece!* Se desligamos a fonte de luz, a interferência volta a existir.

Como pode acontecer isto? A luz parece alterar o movimento dos elétrons de alguma forma, pois com luz eles se distribuem de uma forma no anteparo, sem luz, de outra forma. É como se os elétrons fossem muito delicados, e a luz desse um “empurrão” neles, quando o *flash* fosse produzido, alterando seu movimento. Isso faz algum sentido, pois, como sabemos, a luz é uma onda eletromagnética, e o campo elétrico da luz pode produzir uma força no elétron.

Bem, talvez possamos usar uma fonte de luz não tão brilhante. Pode ser que, diminuindo a intensidade da luz, possamos diminuir o “empurrão” que ela dá no elétron, recuperando assim o padrão de interferência e, ainda assim, observarmos o buraco por onde passa o elétron. Vamos tentar?

Diminuindo cada vez mais a intensidade da luz, observamos um efeito interessante. Nem todos os elétrons que chegam ao anteparo têm sua trajetória marcada por um *flash*. Alguns passam sem serem vistos. Porém, *todos os flashes que ocorrem têm a mesma intensidade*. Interessante... Você se lembra do conceito de fóton, que foi introduzido na Aula 8 de Física 4B? Naquela ocasião, já sabíamos que a luz era uma onda, mas aprendemos que ela também pode se comportar como um “pacote” ou partícula, da mesma forma que os elétrons. Essas partículas de luz são chamadas fótons. Quando diminuímos a intensidade da luz, reduzimos a taxa em que os fótons são emitidos. É por isso que às vezes os elétrons passam sem serem vistos. Provavelmente, não havia um fóton nas proximidades dos buracos, quando eles passaram. Mas cada fóton é idêntico aos demais. Por isso, produzem o mesmo *flash*, quando esbarram nos elétrons.

Bem, vamos levar adiante o experimento com a luz de intensidade reduzida. Desta vez, podemos classificar os elétrons em três tipos: (1) aqueles que são vistos passar pelo buraco 1; (2) aqueles que são vistos passar pelo buraco 2; (3) e aqueles que não são vistos. Ao computarmos as distribuições de probabilidades para cada um dos três tipos de elétrons, encontramos o seguinte: os elétrons do tipo 1 se distribuem como  $P'_1$ , os do tipo 2 se distribuem como  $P'_2$  e os do tipo 3 (aqueles que não são vistos) se distribuem como  $P_{12}$ , ou seja, com interferência. Bem, parece ser esta a conclusão de nosso experimento: *elétrons que são vistos não mostram interferência, elétrons que não são vistos mostram interferência*. Parece ser impossível, reduzindo a intensidade da luz, observar os elétrons e ao mesmo tempo manter o padrão de interferência.



### ATIVIDADE

2. Verifique, no experimento virtual, o fenômeno que acabamos de discutir. Para isso, reduza a intensidade da luz para 50% e execute o experimento novamente.

---



---



---

### RESPOSTA COMENTADA

*Você verá que o padrão observado na tela parece ser uma mistura dos padrões com interferência e sem interferência. Isso corresponde exatamente ao que discutimos anteriormente, ou seja, elétrons que são observados não interferem, enquanto os elétrons que não são observados interferem.*

A dificuldade essencial é que, ao reduzirmos a intensidade da luz, não reduzimos a “intensidade” de cada fóton ou, de forma mais precisa, a energia que ele transporta. Apenas reduzimos o número de fótons. Como é possível reduzir a energia de cada fóton? Como vimos na Aula 8 de Física 4B, uma das primeiras hipóteses da teoria quântica diz que a energia de cada fóton é proporcional à frequência da onda associada a ele:

$$E = h\nu, \quad (2.1)$$

onde  $\nu$  é a frequência da luz e  $h$  é a constante de Planck. Por exemplo, fótons de luz vermelha (frequência menor) têm energia menor do que fótons de luz azul (frequência maior). Eis então uma saída possível para o nosso enigma: em vez de diminuirmos a intensidade da luz, vamos mudar sua cor. Assim, os fótons terão energia e momento linear menores e vão dar “empurrões” menores nos elétrons. Quem sabe poderemos chegar a uma situação em que os elétrons poderão ser vistos e, ainda assim, mostrar interferência?

Voltamos ao laboratório. Fazemos o experimento. Iniciamos com luz de alta frequência (pequeno comprimento de onda): como antes, enxergamos os elétrons passar pelos buracos 1 ou 2, mas não há interferência. Vamos, gradualmente, diminuindo a frequência da luz (aumentando seu comprimento de onda) até um certo ponto em que

recuperamos o padrão de interferência. Tudo parece funcionar bem. Mas quando olhamos agora para os *flashes*, temos uma surpresa desagradável. Continuamos a vê-los, mas eles agora estão maiores, mais difusos, como grandes borrões. Tão grandes que não conseguimos dizer se vêm da região do buraco 1 ou do buraco 2! Ou seja, ao tentarmos usar fótons de baixa energia, de modo que eles não atrapalhem o movimento dos elétrons, esses fótons não permitem uma definição da trajetória do elétron.

Desistimos...

O que aconteceu? Na verdade, este é um efeito familiar da ótica. Se temos dois objetos muito próximos, eles só são distinguíveis entre si se forem observados com uma luz de comprimento de onda menor que a distância entre eles. Caso contrário, os dois objetos aparecerão juntos, como um borrão, sem que possamos distingui-los. Diz-se, então, que não temos *resolução* para identificar os dois objetos separadamente.

Esta é a razão fundamental pela qual os microscópicos óticos têm um poder de aumento limitado. Não importa o quão poderoso seja o sistema de lentes destes aparelhos, sua capacidade de amplificação está fundamentalmente limitada pelo comprimento da luz visível, ou seja, não é possível distinguir objetos ou características menores que este comprimento de onda. Mas você já deve ter ouvido falar que os microscópios eletrônicos têm maior poder de aumento que os microscópios óticos, certo? E agora você pode entender como isto ocorre. Como estamos percebendo, os elétrons se comportam como ondas, e essas ondas podem ter comprimento de onda muito menor que o da luz visível, permitindo que possamos "enxergar" objetos muito menores com essas ondas eletrônicas.

## O PRINCÍPIO DA COMPLEMENTARIDADE E O PAPEL DO OBSERVADOR NA MECÂNICA QUÂNTICA

As conclusões finais do nosso experimento são as seguintes:

1. Elétrons são descritos por *funções de onda*  $\psi$  que fornecem a *amplitude de probabilidade* de que certos eventos aconteçam. A probabilidade é dada pelo módulo quadrado da função de onda:

$$P = |\psi|^2.$$

2. Quando um evento pode ocorrer de duas formas distintas, a função de onda é dada pela soma das funções de onda correspondentes a cada uma das possibilidades:  $\psi = \psi_1 + \psi_2$ , e a probabilidade é dada por  $P = |\psi_1 + \psi_2|^2$ . Portanto, há *interferência*.

3. Quando fazemos uma medida que permita determinar de qual das duas maneiras o evento ocorreu, perdemos a interferência, e a probabilidade é dada por  $P = P_1 + P_2$ .

Esta última conclusão merece uma discussão mais profunda. Você se lembra de que falamos sobre a dualidade onda-partícula, isto é, que os objetos quânticos apresentavam características tanto de partículas como de ondas? Pois bem, há um outro princípio quântico relacionado a este conceito: o *Princípio da Complementaridade*, enunciado pela primeira vez pelo físico dinamarquês Niels Bohr. Segundo ele, as características de onda e partícula são complementares e nunca se manifestam simultaneamente, ou seja, se fizermos um experimento no qual fique claramente caracterizada a natureza ondulatória de um objeto quântico, suas características de partícula não irão se manifestar; e vice-versa. No caso da experiência da fenda dupla, assim que conseguimos determinar a trajetória (um conceito típico das partículas) do elétron, o padrão de interferências (um conceito típico das ondas) desapareceu completamente.

Toda esta discussão traz consigo aspectos interessantes no que se refere ao papel do observador na Mecânica Quântica. Ao observarmos a trajetória do elétron, destruimos sua natureza ondulatória. Na Física clássica, sempre imaginamos o “observador”, isto é, a pessoa que realiza o experimento, como um ente passivo, que não interfere com o objeto de medida. É assim, por exemplo, quando observamos as estrelas no céu: elas não alteram seu movimento por causa de nossa observação. Porém, na Mecânica Quântica, o observador adquire um papel “ativo” e fundamental para a teoria. Torna-se impossível realizar uma medida sem interferir com o objeto que estamos medindo. A medição destrói a interferência quântica, causando o chamado “colapso da função de onda”. Assim, o efeito de observar o estado do sistema faz, como consequência, que esse estado seja alterado. É importante enfatizar que isso ocorre não apenas no caso do elétron passando pela fenda dupla, mas com todos os sistemas quânticos. Dessa forma, na Física Quântica, a distinção entre observador e observado deixa de ser clara; deve-se considerar que o observador é também um sistema físico que interage com o objeto de medida.

A interpretação probabilística e do papel do observador na Física Quântica que descrevemos aqui é conhecida como *interpretação de Copenhague*, e seu principal formulador e defensor foi o físico dinamarquês Niels Bohr. Essa é a interpretação aceita pela grande maioria dos físicos hoje em dia. Mas sempre houve físicos que discordaram dessa interpretação, entre eles ninguém menos que Albert Einstein. Segundo este, "a crença em um mundo exterior independente do observador é a base de toda a ciência natural".

Os debates entre Bohr e Einstein sobre esse e outros aspectos da Física Quântica são uma das páginas mais interessantes da Física e de seus aspectos filosóficos. Você pode aprender mais sobre esses debates em [http://en.wikipedia.org/wiki/Bohr-Einstein\\_debates](http://en.wikipedia.org/wiki/Bohr-Einstein_debates), por exemplo.

Intrigante a Mecânica Quântica, não? É certamente uma das disciplinas mais fascinantes de toda a Física. Nas próximas aulas, entraremos a fundo em seus aspectos mais formais. Com isso, iremos nos capacitar para prosseguir em nossa exploração do mundo quântico.

## RESUMO

Podemos utilizar fótons para visualizar a trajetória dos elétrons, quando estes passam por uma fenda dupla. Mas, quando isso acontece, a natureza ondulatória dos elétrons, caracterizada pelo padrão de interferência, desaparece completamente. Entendemos isso como uma manifestação do Princípio da Complementaridade.

## INFORMAÇÃO SOBRE A PRÓXIMA AULA

Na próxima aula, iniciaremos nosso estudo dos aspectos mais formais da Mecânica Quântica, enunciando seus postulados fundamentais.

# Função de onda e Equação de Schrödinger

AULA

# 4

## Meta da aula

Introduzir a função de onda e a Equação de Schrödinger.

## objetivos

- interpretar fisicamente a função de onda;
- obter informação sobre um sistema microscópico, a partir da função de onda.

## Pré-requisito

Para uma melhor compreensão desta aula, é preciso que você reveja o conceito de equações em derivadas parciais, tais como a equação de ondas, vista na Aula 11 de Física 2B.

## FUNÇÃO DE ONDA E EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER

Vimos, nas aulas do Módulo 1 desta disciplina, que as partículas microscópicas, como os elétrons, não se movem seguindo as leis clássicas do movimento, dadas pela Mecânica Newtoniana. Essas partículas, porém, seguem outras leis que parecem ser mais apropriadas para a propagação de ondas. Isso ficou claro, de forma qualitativa, na Aula 2, na qual vimos surgir um padrão de interferência, quando um feixe de elétrons passa através de uma fenda dupla. Neste módulo, iniciaremos um estudo *quantitativo* da dinâmica das partículas quânticas, por meio de seus postulados e de sua formulação matemática precisa. Afinal, quais são as leis que regem o movimento das partículas microscópicas?

Vamos considerar uma partícula microscópica (por exemplo, um elétron) que se movimenta em três dimensões. Vamos aceitar, como postulado, que o estado dessa partícula, em um instante de tempo  $t$ , é completamente definido por uma quantidade complexa chamada *função de onda*, e indicada pelo símbolo  $\Psi(x,y,z,t)$ , em que  $(x,y,z)$  são as coordenadas espaciais.

O que queremos dizer com a expressão “estado de uma partícula”? Na mecânica clássica, o estado de uma partícula é conhecido por meio de sua posição e de sua velocidade em um determinado instante. Este conhecimento, somado ao conhecimento da força (ou, se preferirem, da energia potencial) que atua sobre esta partícula, permite a descrição completa da sua trajetória subsequente através da integração da 2ª Lei de Newton. Já um movimento ondulatório, como vimos no Módulo 1, será totalmente conhecido, se soubermos a dependência espacial e temporal da função de onda. Por exemplo, no caso de ondas na superfície da água, vimos que uma função de onda apropriada era a altura do nível da água. Note que, no caso das partículas quânticas, a descrição matemática é muito mais parecida com a das ondas do que com a das partículas clássicas.

Como vimos na Aula 11 de Física 2B, no caso de ondas clássicas, a função de onda é a solução de uma equação em derivadas parciais conhecida como equação da onda. Então, é razoável supor que a função de onda de uma partícula quântica deve também satisfazer a uma *equação de onda*. Que equação é esta? Veremos a seguir.

Suponha que a partícula quântica tenha massa  $m$  e se mova sob a influência de uma energia potencial  $V(x,y,z,t)$ . Postula-se, então, que a função de onda satisfaça à seguinte equação em derivadas parciais:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right] + V(x,y,z,t)\Psi \quad (4.1)$$

em que  $\hbar = h/2\pi$ , sendo  $h$  a constante de Planck. Esta é a famosa *Equação de Schrödinger*, proposta pelo físico austríaco Erwin Schrödinger (Figura 4.1), em 1926. Note que essa equação parece um pouco mais complicada que a equação da onda clássica que conhecemos. Mas não se preocupe, em breve você estará bastante familiarizado com ela.

Notem que estamos *postulando* que o estudo de um sistema microscópico consiste em encontrar a função de onda  $\psi$ , a qual satisfaz a Equação de Schrödinger. A única justificativa para a descrição da Física Quântica ser baseada nessas suposições é que elas funcionam. Em outras palavras, a Física Quântica baseada nessas suposições descreve corretamente todos os fenômenos aos quais tem sido aplicada. Existem, na literatura, apresentações da Equação de Schrödinger como sendo derivada da equação de onda, fazendo, com isso, diversas considerações que tentam mostrar a sua plausibilidade. Nós preferimos, entretanto, tratá-la como de fato ela é: um postulado. Não é possível chegar à Física Quântica a partir da Física Clássica apenas por uma argumentação lógica!

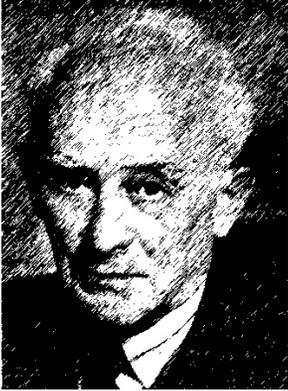


**Figura 4.1:** O físico austríaco Erwin Schrödinger (1887-1961), que, por seu trabalho de 1926, no qual propôs a equação que ganhou seu nome para a descrição da dinâmica das partículas quânticas, foi agraciado, juntamente com o físico inglês Paul Dirac, com o Prêmio Nobel de Física de 1933.

A partir de agora, vamos nos restringir ao caso unidimensional, em que  $x$  é a única coordenada. Além de levar a uma maior simplicidade, esse caso será suficiente para estudar a maioria das aplicações que consideraremos neste curso. No caso unidimensional, a Equação (4.1) se escreve:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t). \quad (4.2)$$

Vemos imediatamente que, pelo fato de ser solução de uma equação complexa em derivadas parciais, a função de onda será necessariamente uma função complexa. Este fato será discutido no próximo item. A função de onda  $\Psi(x,t)$  é uma função contínua e, sempre que o potencial  $V(x,t)$  for finito, com derivada também contínua.



**Figura 4.2:** O físico alemão Max Born (1882-1970), que formulou a interpretação probabilística da função de onda e, por isso, foi agraciado com o Prêmio Nobel de Física de 1954.

## INTERPRETAÇÃO FÍSICA DA FUNÇÃO DE ONDA

Antes de começarmos a resolver a Equação de Schrödinger em situações específicas, o que será feito nas próximas aulas, vamos entender melhor o significado da função de onda. Até o momento, ela parece apenas como uma quantidade abstrata. Será mesmo assim? Bem, vemos que, pelo fato de a função de onda ser uma quantidade complexa, ela não pode ser medida diretamente por nenhum instrumento físico. Isso significa que não há um sentido físico imediato para essa função! Portanto, vamos deixar bem estabelecido que, de fato, *a função de onda de um sistema nada mais é do que uma representação matemática abstrata do estado do sistema*. Ela somente tem significado no contexto da teoria quântica. Então, de que nos serve esta função? Podemos utilizá-la, de alguma forma, para descrever o mundo físico?

Max Born, em 1926, *postulou* que a densidade de probabilidade  $p(x,t)$  de se encontrar a partícula na posição  $x$ , no instante  $t$ , poderia ser obtida a partir da função de onda pela relação:

$$p(x,t) = |\Psi(x,t)|^2, \quad (4.3)$$

de modo que a probabilidade de encontrarmos a partícula em uma região  $a \leq x \leq b$  no instante  $t$  é dada por:

$$P[a,b] = \int_a^b |\Psi(x,t)|^2 dx. \quad (4.4)$$

Note que esta é apenas uma versão matematicamente mais precisa do que encontramos em nossos experimentos de fenda dupla descritos na Aula 2. Esse resultado é conhecido como “interpretação probabilística da função de onda”. Como toda probabilidade que se preza,  $P[a,b]$  deve ser real e positiva, qualquer que seja o intervalo considerado. Isto é garantido pelo fato de que  $|\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$  é real e positivo. Lembre-se: é o módulo ao quadrado de um número complexo! Além disso, a probabilidade deve ser normalizada, ou seja, a probabilidade de se encontrar a partícula em *qualquer* região do espaço, num dado instante de tempo, deve ser igual a 1:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1. \quad (4.5)$$

Esta condição é conhecida como “normalização da função de onda”. Toda função de onda que se preza deve estar devidamente normalizada. Em três dimensões, a relação correspondente é

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx dy dz |\Psi(x, y, z, t)|^2 = 1 \cdot$$

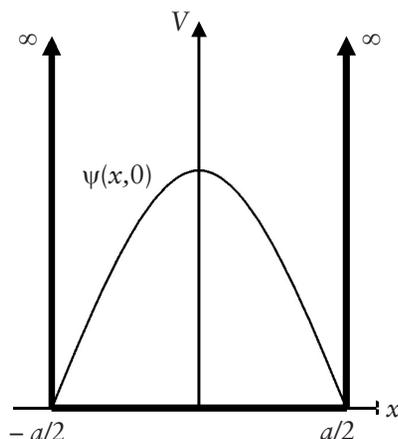


Figura 4.3: Energia potencial e função de onda em  $t = 0$  do estado de mais baixa energia do poço infinito.

### ATIVIDADE



1. Vamos exercitar alguns conceitos associados à interpretação probabilística da função de onda? A **Figura 4.3** mostra, em  $t = 0$ , a função de onda do chamado *estado fundamental* (o estado de energia mais baixa) do poço de potencial infinito. O poço infinito é aquele em que a energia potencial é zero numa certa região (no caso mostrado na **Figura 4.3**, em  $-a/2 < x < a/2$ ) e infinita em todo o resto do espaço. Trata-se de uma idealização, mas é muito útil para estudar os poços de potencial encontrados na natureza. Veremos, nas próximas aulas, como resolver a Equação de Schrödinger para o poço infinito, mas este não é o nosso foco no momento. Conhecemos a solução e vamos trabalhar um pouco com ela.

A função de onda do estado fundamental é a seguinte:

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

em que  $E$  é a energia da partícula no referido estado e  $A$  é um número real chamado de “constante de normalização”, a ser determinado.

- Usando o postulado de Born, obtenha a densidade de probabilidade  $p(x,t)$  de se encontrar a partícula em um ponto qualquer do eixo  $x$ , no instante  $t$ . Verifique que esta densidade é real e positiva.
- Imponha a condição de normalização e encontre a constante  $A$ .
- Ache a probabilidade de se encontrar a partícula na metade direita do poço ( $x > 0$ ).

#### RESPOSTA COMENTADA

a. Para calcular a densidade de probabilidade, basta usar o postulado de Born. Assim, obtemos

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

Como um cosseno ao quadrado é sempre real e positivo, a densidade de probabilidade também é real e positiva. Note ainda que a densidade é máxima na origem.

b. A condição de normalização é imposta da seguinte forma:  $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1$ . Assim, podemos obter a constante  $A$ :

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = \int_{-a/2}^{a/2} A^2 \cos^2 \frac{\pi x}{a} dx = 1 \Rightarrow A^2 \frac{a}{2} = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}}.$$

c. A probabilidade de encontrarmos a partícula na metade direita do poço é dada pela Equação (4.5):

$$P[0, \infty] = \int_0^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = \int_0^a \frac{2}{a} \cos^2 \frac{\pi x}{a} dx = \frac{1}{2} = 50\%.$$

Ou seja, a partícula pode estar com igual probabilidade do lado direito e do lado esquerdo do poço. Isto é esperado, visto que o potencial é simétrico com relação à origem!

## OPERADORES E VALORES ESPERADOS

A esta altura, você já deve estar convencido da natureza probabilística do mundo quântico (ou, ao menos, deve ter se conformado com ela). Vimos, na experiência de fenda dupla (Aula 2), que não podemos prever o resultado de um único evento (como a posição do impacto de um elétron no anteparo). Podemos, porém, fazer uma análise estatística

de um número muito grande de eventos. Por exemplo, se fizermos várias medidas da posição  $x$  do elétron no anteparo, que valor médio ou *valor esperado* da posição  $\langle x \rangle$  iremos obter?

O resultado importantíssimo descrito no item anterior nos permite fazer este cálculo. Uma vez que temos a distribuição de probabilidades, isto se torna simples, basta usar um resultado bem conhecido de estatística elementar:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi(x,t)|^2 dx . \quad (4.6)$$

Seguindo essa receita, podemos calcular outras quantidades de interesse, tais como o valor esperado  $\langle f \rangle$  de uma função qualquer da posição  $x$ ,  $f(x)$ . Essa quantidade é dada pela expressão usual para o valor esperado:

$$\langle f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) |\Psi(x,t)|^2 dx , \quad (4.7)$$

mas que escreveremos na forma

$$\langle f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) f(x) \Psi(x,t) dx. \quad (4.8)$$

A Equação (4.8) é completamente equivalente à Equação (4.7). Mas, então, qual é a vantagem de escrevê-la desta forma? Na verdade, a Equação (4.8) é apenas um caso particular do seguinte resultado mais geral:

$$\langle O \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) O [\Psi(x,t)] dx, \quad (4.9)$$

em que  $O$  é um *operador quântico* e  $\langle O \rangle$  é seu valor esperado. Um operador quântico “opera” ou atua sobre uma função de onda, e o resultado é uma outra função. Indicamos por  $O[\Psi(x,t)]$  o resultado da operação do operador  $O$  sobre a função de onda  $\Psi$ . No caso mais simples, um operador pode ser uma função  $f(x)$ . Quando isso acontece, o resultado da operação é simplesmente o produto da função  $f$  pela função de onda  $\Psi$ , ou seja,  $O[\Psi(x,t)] = f(x)\Psi(x,t)$ . Neste caso, a expressão (4.9) se reduz à (4.8). Porém, no caso mais geral, um operador quântico pode envolver operações mais complicadas, como, por exemplo, a diferenciação. Veremos exemplos desse tipo na Aula 5.

Afinal, para que servem os operadores quânticos e a Equação (4.9)? Certamente não são apenas uma curiosidade matemática, muito pelo contrário. Os operadores desempenham um papel central no formalismo da Física Quântica. Este papel é definido pelo seguinte postulado: *A cada grandeza física corresponde um operador quântico.* E mais: supondo uma partícula no estado quântico definido pela função de onda  $\Psi$ , o valor esperado da medida da grandeza física correspondente ao operador  $O$  (ou seja, o valor médio estatístico de muitas medidas desta grandeza) é dado pela Equação (4.9).

Vale a pena meditar sobre a importância desse resultado. Na Aula 2, aprendemos que na Física Quântica é impossível prever, com certeza, o resultado de uma única medida. Na ocasião, você pode ter sentido uma limitação repentina em suas possibilidades de conhecer a dinâmica de um sistema físico, algo que não existia na Física Clássica. Agora, observamos que ao menos o valor médio de um número muito grande de medidas pode ser predito pela teoria. Recuperamos, ainda que parcialmente, nosso poder preditivo.

Na próxima aula, conheceremos dois operadores bastante importantes, associados à energia e ao momento linear. Veremos que eles não podem ser definidos por uma simples função da posição  $f(x)$ . Mas, antes, que tal trabalharmos um pouco com alguns operadores mais simples?

### ATIVIDADE FINAL

Considere mais uma vez a função de onda do estado fundamental do poço infinito – Equação (4.6).

- a. Calcule o valor esperado da posição  $x$  e interprete seu resultado.
- b. Além do valor esperado de um conjunto de muitas medidas, podemos calcular o desvio-padrão  $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$ . O desvio-padrão mede a faixa de valores em que a probabilidade de medida é alta. Dessa forma, ele dá uma idéia da incerteza da medida. Calcule o desvio-padrão da posição para o estado fundamental do poço infinito.

**RESPOSTA COMENTADA**

a. O valor esperado da posição é obtido da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \Psi^*(x,t) x \Psi(x,t) dx = \int_{-a/2}^{a/2} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{\pi x}{a} e^{iEt/\hbar} x \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{\pi x}{a} e^{-iEt/\hbar} dx = \\ &= \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} x \cos^2 \frac{\pi x}{a} dx = 0. \end{aligned}$$

Podemos entender este resultado por simetria: a partícula tem igual probabilidade de ser encontrada do lado direito e do lado esquerdo do poço, de modo que o valor mais provável é  $x = 0$ .

b. Calcular a incerteza  $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} x^2 \cos^2 \frac{\pi x}{a} dx = \frac{a^2}{2\pi^2} \left( \frac{\pi^2}{6} - 1 \right) = 0,033a^2$$

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle} = 0,18a.$$

**RESUMO**

O estado quântico de uma partícula é descrito por sua função de onda, que satisfaz à Equação de Schrödinger. O módulo ao quadrado da função de onda nos dá a amplitude de probabilidade de encontrarmos a partícula numa certa posição. A cada grandeza física corresponde um operador quântico. Assim, com o conhecimento da função de onda, é possível obter o valor esperado das medidas dessa grandeza.

**INFORMAÇÕES SOBRE A PRÓXIMA AULA**

Na próxima aula, vamos conhecer os operadores energia e momento linear e descreveremos o Princípio da Incerteza de Heisenberg.



# Operadores momento e energia e o Princípio da Incerteza

## AULA 5

### Metas da aula

Definir os operadores quânticos do momento linear e da energia e enunciar o Princípio da Incerteza de Heisenberg.

## objetivos

- calcular grandezas associadas aos operadores momento linear e energia;
- aplicar o Princípio da Incerteza de Heisenberg.

### Pré-requisitos

Para uma melhor compreensão desta aula, é importante que você revise a Aula 4 desta disciplina e o fenômeno de difração da luz (Aula 8 de Física 4A).

## OPERADORES QUÂNTICOS DO MOMENTO LINEAR E DA ENERGIA

Vimos, na Aula 4 desta disciplina, que devemos associar um operador quântico a cada grandeza física. Observamos também que o conhecimento da função de onda nos permite calcular o valor esperado (ou valor médio) de um conjunto muito grande de medidas dessa grandeza física. O momento linear (ou quantidade de movimento) e a energia de um sistema são duas quantidades de importância fundamental na Mecânica Clássica e isto não é diferente na Mecânica Quântica. Então, quais são os operadores quânticos associados a essas grandezas?

Podemos reescrever a equação de Schrödinger, Equação (4.2), de uma forma um pouco diferente:

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

Note que, como esta equação deve ser válida para qualquer solução  $\Psi(x, t)$ , ela é equivalente à relação entre operadores diferenciais:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t). \quad (5.2)$$

Se compararmos esta relação com a relação clássica

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

vemos que podemos associar as quantidades clássicas energia  $E$  e momento linear  $p$  aos seguintes operadores diferenciais:

$$p \leftrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad E \leftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}. \quad (5.4)$$

Portanto, postular a equação de Schrödinger, como fizemos na Aula 4, é equivalente a postular a associação entre as quantidades clássicas e as quânticas (5.4).

O procedimento baseado na associação entre as quantidades clássicas e as quânticas (5.4) foi, essencialmente, o seguido por Schrödinger para derivar a sua equação.

A partir da definição do operador momento linear, primeira das associações da Equação (5.4), podemos calcular o valor esperado do momento, utilizando a receita prescrita na Equação (4.9):

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) p \Psi(x,t) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x,t) dx \quad (5.5) \\ \Rightarrow \langle p \rangle &= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} dx . \end{aligned}$$

Da mesma forma, podemos calcular o valor esperado da energia,

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) E \Psi(x,t) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi(x,t) dx \quad (5.6) \\ \Rightarrow \langle E \rangle &= i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} dx . \end{aligned}$$

### ATIVIDADE



1. Considere mais uma vez a função de onda do estado fundamental do poço infinito, descrita na Aula 4.

a. Calcule o valor esperado do momento linear  $p$  e interprete seu resultado.

---

b. Calcule o desvio-padrão ou incerteza  $\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$  para o estado fundamental do poço infinito.

---

### RESPOSTA COMENTADA

a. O valor esperado do momento linear é dado por:

$$\langle p \rangle = \int_{-a/2}^{a/2} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{\pi x}{a} e^{iEt/\hbar} (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} \left( \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{\pi x}{a} e^{-iEt/\hbar} \right) dx = \frac{2i\hbar}{a} \frac{\pi}{a} \int_{-a/2}^{a/2} \cos \frac{\pi x}{a} \operatorname{sen} \frac{\pi x}{a} dx = 0$$

Mais uma vez, podemos entender este resultado por argumentos de simetria. Como o poço é simétrico, há a mesma probabilidade de se encontrar a partícula com velocidade (ou momento) para a direita ou para a esquerda, de modo que o valor esperado do momento é nulo.

b. A incerteza no momento linear é obtida por:

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \sqrt{\langle p^2 \rangle}$$

$$\langle p^2 \rangle = \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} \cos \frac{\pi x}{a} \left( -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \cos \frac{\pi x}{a} dx = \frac{2\hbar^2 \pi^2}{a^3} \int_{-a/2}^{a/2} \cos^2 \frac{\pi x}{a} dx = \left( \frac{\hbar \pi}{a} \right)^2$$

$$\Delta p = \frac{\hbar \pi}{a}.$$

## O PRINCÍPIO DA INCERTEZA DE HEISENBERG

Como já dissemos anteriormente, conheceremos o estado de uma partícula clássica se soubermos sua posição e sua velocidade (ou momento) em um dado instante de tempo. Na Física Clássica, não há limitação teórica para a precisão com que podemos conhecer essas grandezas. Ou seja, classicamente, podemos conhecer a posição e a velocidade com precisão absoluta (ou incerteza nula); o que nos limita é apenas a precisão de nossos instrumentos de medida. Em princípio, poderíamos tornar nossos instrumentos tão precisos quanto quiséssemos.

Mas o mesmo não acontece na Física Quântica. Vimos na aula passada que, na Física Quântica, a relação entre um sistema físico e o observador é bem diferente que na Física Clássica. Para observar um sistema ou medir alguma de suas propriedades é preciso, necessariamente, interferir ou interagir com ele. Essa interação dá origem a imprecisões ou incertezas intrínsecas nas medidas que tentamos realizar. Esta é uma propriedade fundamental da natureza, da qual não podemos nos ver livres, ainda que melhoremos ao máximo nossos instrumentos de medida!

Essa propriedade da natureza pode ser enunciada através do famoso *Princípio da Incerteza*, formulado pelo físico alemão Werner Heisenberg (**Figura 5.1**). Segundo ele, a incerteza  $\Delta x$  na medida da posição de uma partícula quântica está relacionada à incerteza na medida de seu momento  $\Delta p$  pela seguinte desigualdade:

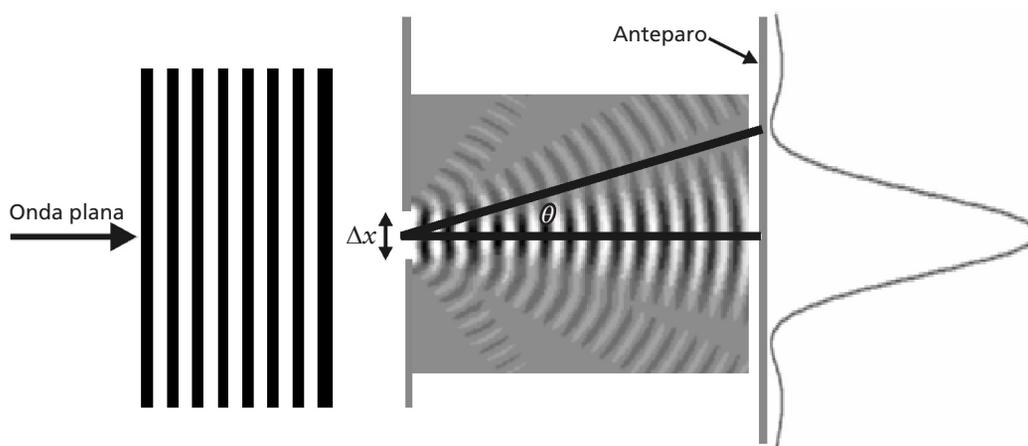
$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (5.7)$$

Isto quer dizer que é impossível determinar com precisão absoluta (incerteza nula) a posição e o momento de uma partícula quântica, simultaneamente. Se fizermos uma medida muito precisa da posição, teremos uma imprecisão grande no momento (e vice-versa), de modo que o produto das incertezas nunca é menor que  $\hbar/2$ .

O Princípio da Incerteza parece incompatível com nosso conceito clássico de partícula, algo que sempre imaginamos como tendo uma posição e uma velocidade bem definidas. Mas isto, mais uma vez, apenas reflete a inadequação de aplicarmos esse conceito aos objetos quânticos. Lembre-se: temos de usar a matemática das ondas! E, se pensarmos em ondas de probabilidade, o Princípio da Incerteza surge de forma muito natural e nada misteriosa. Podemos ver como isso funciona, se analisarmos um fenômeno ondulatório já bem conhecido de todos nós: a difração, que estudamos na Aula 8 de Física 4A.



**Figura 5.1:** O físico alemão Werner Heisenberg (1901-1976), que formulou o Princípio da Incerteza. Heisenberg ganhou o Prêmio Nobel de Física de 1932.



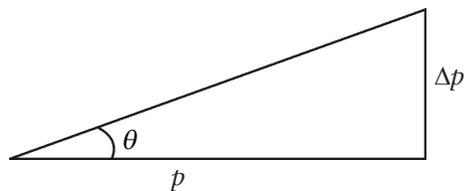
**Figura 5.2:** Difração de uma onda plana por uma fenda de largura  $\Delta x$ .

Vamos relembrar este fenômeno? Veja a **Figura 5.2**. Ela mostra a difração de uma onda plana, vinda da esquerda, por uma fenda de largura  $\Delta x$ . A fenda difrata a onda, espalhando-a em várias direções. A curva no painel à direita mostra a intensidade da onda detectada no anteparo. Note que o pico central tem uma largura angular  $\theta$ , que você calculou na Aula 8 de Física 4A:

$$\theta \approx \text{sen } \theta = \frac{\lambda}{\Delta x} \cdot \quad (5.8)$$

Vamos agora lembrar que, na Física Quântica, as ondas estão associadas à probabilidade de se encontrar partículas. Suponhamos, então, que a onda da **Figura 5.2** representa um elétron incidente da esquerda com momento linear na direção horizontal. O elétron passa pela fenda. Note que esta informação é suficiente para localizarmos sua posição com uma incerteza  $\Delta x$  quando ele passa por ali. E o que acontece com o momento linear do elétron? Observe que, para que os elétrons atinjam o anteparo formando a curva característica da difração (que agora deve ser interpretada como a distribuição angular da probabilidade de se encontrar o elétron), seu momento linear  $\vec{p}$ , que antes se encontrava na direção horizontal, deve adquirir uma componente vertical  $\Delta p$ . A magnitude média de  $\Delta p$  pode ser estimada pela largura  $\theta$  da curva de distribuição de probabilidades (veja as **Figuras 5.2 e 5.3**). Obtemos então:

$$\theta \approx \tan \theta = \frac{\Delta p}{p} . \quad (5.9)$$



**Figura 5.3:** Para ser desviado de forma a produzir no anteparo uma distribuição angular com largura  $\theta$ , o momento do elétron deve adquirir uma componente vertical  $\Delta p$ .

Combinando as Equações (5.8) e (5.9) com a relação de de Broglie  $\lambda = h/p$ , chegamos ao resultado:

$$\Delta x \Delta p \approx h . \quad (5.10)$$

Essa relação, obtida de forma muito simplificada, está próxima ao resultado mais rigoroso expresso pela Equação (5.7). Trata-se de uma maneira simples de mostrar que o Princípio da Incerteza não tem nada de misterioso, é apenas uma consequência da natureza ondulatória das partículas quânticas!

**ATIVIDADE**



2. Use os resultados que você obteve para  $\Delta x$  e  $\Delta p$  na Atividade Final da Aula 4 desta disciplina e na Atividade 1 desta aula, respectivamente, para mostrar que o Princípio da Incerteza é obedecido pelo estado fundamental do poço de potencial infinito.

---



---



---

**RESPOSTA COMENTADA**

Encontramos  $\Delta x = 0,18a$  na Atividade Final da Aula 4 e  $\Delta p = \hbar\pi/a$  na Atividade 1 desta aula. Portanto, temos o produto  $\Delta x \Delta p = 0,56\hbar$ . Como isto é maior que  $\hbar/2$ , a função de onda do estado fundamental do poço de potencial infinito satisfaz ao Princípio da Incerteza, expresso pela Equação (5.7).

O Princípio da Incerteza de Heisenberg, por seu aspecto pouco intuitivo (se interpretado segundo os conceitos da Física Clássica), é uma das idéias da Física Quântica que têm maior penetração na sociedade em geral, ainda que, muitas vezes, de forma incorreta. Há, inclusive, várias piadas sobre o Princípio da Incerteza!



**ATIVIDADES FINAIS**

1. Considere novamente a função de onda do estado fundamental do poço infinito:

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

a. Mostre que  $E$  é o valor esperado da energia.

b. Calcule o desvio-padrão ou incerteza  $\Delta E = \sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}$  para este estado.

**RESPOSTA COMENTADA**

a. Utilizando a expressão (5.6), obtemos:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \int_{-a/2}^{a/2} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{\pi x}{a} e^{iEt/\hbar} \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{\pi x}{a} e^{-iEt/\hbar} dx \\ &= \frac{2i\hbar}{a} \int_{-a/2}^{a/2} \cos^2 \frac{\pi x}{a} e^{iEt/\hbar} \left( -\frac{iE}{\hbar} \right) e^{-iEt/\hbar} dx = \frac{2E}{a} \int_{-a/2}^{a/2} \cos^2 \frac{\pi x}{a} dx = E \end{aligned}$$

b. Para calcularmos o desvio-padrão, temos que obter  $\langle E^2 \rangle$ :

$$\begin{aligned} \langle E^2 \rangle &= \int_{-a/2}^{a/2} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{\pi x}{a} e^{iEt/\hbar} \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{\pi x}{a} e^{-iEt/\hbar} dx \\ &= -\frac{2\hbar^2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} \cos^2 \frac{\pi x}{a} e^{iEt/\hbar} \left( \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) e^{-iEt/\hbar} dx = \frac{2E^2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} \cos^2 \frac{\pi x}{a} dx = E^2 \end{aligned}$$

Portanto, o desvio-padrão neste é  $\Delta E = \sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2} = \sqrt{E^2 - E^2} = 0$

Assim, não há incerteza na medida da energia neste caso! Na próxima aula, entenderemos o significado deste resultado.

2. Mostre que, para uma partícula livre, podemos escrever a relação de incerteza também na forma  $\Delta\lambda\Delta x \geq \lambda^2 / 4\pi$ , em que  $\Delta x$  é a incerteza na posição do pacote de ondas e  $\Delta\lambda$  é a incerteza simultânea no comprimento de onda (Eisberg-Resnick, Problema 15, Capítulo 3).

**RESPOSTA COMENTADA**

Usando a relação de de Broglie,  $p = h / \lambda$ , vamos considerar uma incerteza  $\Delta p$  no momento e ver qual a incerteza correspondente  $\Delta\lambda$  no comprimento de onda:

$$p \pm \Delta p = \frac{h}{\lambda \mp \Delta\lambda} = \frac{h}{\lambda} \left( \frac{1}{1 \mp \Delta\lambda / \lambda} \right).$$

Supondo  $\Delta\lambda / \lambda \ll 1$  temos:

$$p \pm \Delta p = \frac{h}{\lambda \mp \Delta\lambda} = \frac{h}{\lambda} (1 \pm \Delta\lambda / \lambda) \Rightarrow \Delta p = \frac{h\Delta\lambda}{\lambda^2}.$$

Note que o mesmo resultado poderia ser obtido apenas tomando a derivada:

$p = h/\lambda \Rightarrow dp = -(h/\lambda^2)d\lambda$  e aproximando  $|dp| \approx \Delta p$  e  $|d\lambda| \approx \Delta\lambda$ . Usando agora a relação de incerteza  $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$ , obtemos finalmente:

$$\frac{h\Delta x \Delta\lambda}{\lambda^2} \geq \frac{\hbar}{4\pi} \Rightarrow \Delta x \Delta\lambda \geq \frac{\lambda^2}{4\pi}.$$

3. Se  $\Delta\lambda/\lambda = 10^{-7}$  para um fóton, qual o valor correspondente de  $\Delta x$  para  
a.  $\lambda = 5,00 \times 10^{-4} \text{ \AA}$  (raio  $\gamma$ )? b.  $\lambda = 5,00 \text{ \AA}$  (raio X)? c.  $\lambda = 5000 \text{ \AA}$  (luz)?

(Eisberg-Resnick, Problema 16, Capítulo 3).

#### RESPOSTA COMENTADA

Basta aplicarmos a fórmula obtida na Atividade Final 2 desta aula:  
 $\Delta\lambda \Delta x \geq \lambda^2 / 4\pi$ . Assim, obtemos: a.  $398 \text{ \AA}$ ; b.  $398 \text{ }\mu\text{m}$ ; c.  $0,398 \text{ m}$ .

4. a. Considere um elétron em algum ponto dentro de um átomo de diâmetro  $1 \text{ \AA}$ . Qual é a incerteza no momento do elétron? Isto é consistente com a energia de ligação de elétrons em átomos? b. Imagine que um elétron esteja em algum ponto no interior de um núcleo de  $10^{-12} \text{ cm}$ . Qual é a incerteza no momento do elétron? Isto é consistente com a energia de ligação dos constituintes do núcleo? c. Considere agora um nêutron, ou um próton, como estando dentro desse núcleo. Qual é a incerteza no momento do nêutron, ou do próton? Isto é consistente com a energia de ligação dos constituintes do núcleo? (Eisberg-Resnick, Problema 22, Capítulo 3).

**RESPOSTA COMENTADA**

a. Se  $\Delta x = 1 \text{ \AA}$ , então, pelo Princípio da Incerteza,  $\Delta p = 5,3 \times 10^{-25} \text{ kg.m/s}$ . Ou seja, ainda que o valor esperado de  $p$  seja nulo, há uma probabilidade apreciável de que seja feita uma medida cujo resultado seja  $p \approx \Delta p$  (em valor absoluto). Como a energia cinética se relaciona ao momento linear por  $E_c = \frac{p^2}{2m}$ , isto significa que há uma probabilidade apreciável de que o elétron tenha energia cinética da ordem de  $E_c = \frac{\Delta p^2}{2m} = 1,0 \text{ eV}$ . Este valor é menor do que a energia de ligação de um elétron em um átomo de H (que tem um diâmetro aproximado de  $1 \text{ \AA}$ ), que é de  $13,6 \text{ eV}$ . Isto faz sentido, já que a energia cinética não pode ser maior que a energia de ligação: se fosse, o elétron poderia “escapar” do átomo.

b. Repetindo a mesma análise para um elétron confinado em um núcleo, obtemos  $\Delta p = 5,3 \times 10^{-21} \text{ kg.m/s}$  e uma energia cinética da ordem de  $10^8 \text{ eV} = 100 \text{ MeV}$ . Isto é muito maior que a energia de ligação típica dos constituintes do núcleo, que é da ordem de poucos MeV (por núcleon). Por isso, um elétron, ainda que fosse submetido às forças responsáveis pela coesão nuclear, nunca ficaria confinado ao núcleo: sua alta energia cinética o faria escapar.

c. Tanto o nêutron quanto o próton têm uma massa cerca de 1.840 vezes maior do que a do elétron. Assim, apesar de a incerteza no momento linear ser a mesma calculada no item anterior, isto corresponde a uma energia cinética 1.840 vezes menor, ou seja, de apenas  $0,05 \text{ MeV}$ . Esta energia é muito menor que as energias de coesão nucleares e, portanto, os prótons e nêutrons não escapam dos núcleos.

**RESUMO**

As grandezas físicas energia e momento linear correspondem aos operadores quânticos  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$  e  $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ , respectivamente. Na Física Quântica, a posição e o momento de uma partícula não podem ser medidos simultaneamente com precisão absoluta.

Suas incertezas devem satisfazer ao Princípio da Incerteza de Heisenberg:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} .$$

**INFORMAÇÕES SOBRE A PRÓXIMA AULA**

Na próxima aula, aprenderemos o que são as soluções estacionárias da Equação de Schrödinger e conheceremos a Equação de Schrödinger independente do tempo.

# O caso estacionário em uma dimensão

AULA

# 6

## Meta da aula

Aplicar o formalismo quântico no caso de o potencial ser independente do tempo.

## objetivos

- verificar que, no caso de o potencial ser independente do tempo, a equação de Schrödinger tem uma forma mais simples;
- calcular o valor esperado de operadores quânticos, em particular da energia;
- definir os conceitos de autovalor e autofunção de operadores quânticos;
- definir a corrente de probabilidade.

## Pré-requisitos

Para uma melhor compreensão desta aula, é importante que você revise a Aula 5 desta disciplina, o conceito de equações diferenciais ordinárias (visto no curso de Cálculo), o conceito de hamiltoniano (Aula 7 de Mecânica) e o oscilador harmônico simples (Aula 3 de Mecânica).

## FUNÇÃO DE ONDA E EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER NO CASO ESTACIONÁRIO

Nas próximas aulas, vamos estudar alguns exemplos simples de sistemas quânticos unidimensionais sob o efeito de potenciais independentes do tempo. Esses sistemas são chamados de *estacionários*. Este é um caso muito comum em Física: por exemplo, um campo gravitacional e um campo elétrico estáticos produzem uma energia potencial que não depende do tempo, ou seja, em lugar da energia potencial  $V(x, t)$ , devemos usar, na equação de Schrödinger, a forma mais simples  $V(x)$ .



Note, porém, que há muitos outros casos, igualmente importantes, em que o potencial depende do tempo. Por exemplo, no caso de um campo elétrico oscilante devido a uma onda eletromagnética. Entretanto, como é usual, vamos iniciar nossos estudos com o caso mais simples.

Nosso objetivo imediato será o de adquirir familiaridade com a resolução da equação de Schrödinger. No entanto, ao mesmo tempo, vamos analisar vários fenômenos interessantes que aparecem na teoria quântica. O interesse no caso estacionário unidimensional se deve não apenas porque, em muitas ocasiões, o fenômeno físico ocorre, efetivamente, em uma dimensão, mas também porque muitos outros problemas mais complexos podem ser reduzidos à solução de equações análogas à equação de Schrödinger em uma dimensão.

Mas antes de entrar em cada um desses problemas, vamos analisar a teoria quântica para o caso específico de o potencial ser independente do tempo. Se considerarmos uma partícula de massa  $m$  que se movimenta sobre o eixo  $x$  sob a influência de um potencial  $V(x)$ , a equação de Schrödinger terá esta forma:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x,t). \quad (6.1)$$

Nesse caso, em que o potencial é independente do tempo, podemos procurar soluções da Equação (6.1) que separam as partes dependentes de  $x$  e de  $t$ . Trata-se da conhecida técnica de *separação de variáveis*, muito comum no estudo de equações diferenciais parciais. Assim, propomos uma solução que tem a seguinte forma:

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\phi(t). \quad (6.2)$$

Substituindo esta expressão para  $\Psi(x,t)$  na equação de Schrödinger, obtemos:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [\psi(x)\phi(t)] = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [\psi(x)\phi(t)] + V(x) [\psi(x)\phi(t)] \Rightarrow \quad (6.3)$$

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

Podemos, agora, dividir ambos os lados da equação por  $\psi(x)\phi(t)$  e chegarmos, assim, ao seguinte resultado:

$$\frac{i\hbar}{\phi(t)} \frac{d\phi(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m\psi(x)} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x). \quad (6.4)$$

Note que o lado esquerdo dessa equação depende apenas da variável tempo ( $t$ ), enquanto o lado direito depende apenas da variável posição ( $x$ ). Obviamente, uma igualdade como essa só pode ser verdadeira, para todo tempo  $t$  e valor da coordenada espacial  $x$ , se ambos os lados forem iguais a uma constante, que chamaremos de  $E$ . Assim, nossa equação a derivadas parciais se torna duas equações diferenciais ordinárias, com as variáveis  $t$  e  $x$  separadas:

$$i\hbar \frac{d\phi(t)}{dt} = E\phi(t), \quad (6.5)$$

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

A primeira equação é simples de ser resolvida, tendo como solução

$$\phi(t) = Ae^{-iEt/\hbar}, \quad (6.6)$$

em que  $A$  é uma constante arbitrária. Assim, mostramos que a solução geral para  $\Psi(x,t)$  tem esta forma:

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}, \quad (6.7)$$

em que a constante  $A$  foi incorporada à função  $\psi(x)$ .

Veamos o que ocorre com a densidade de probabilidade no caso estacionário. Usando a Equação (4.3) da Aula 4 desta disciplina e substituindo a função de onda dada pela Equação (6.7), obtemos o seguinte:

$$p(x,t) = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = \psi^*(x)e^{iEt/\hbar}\psi(x)e^{-iEt/\hbar} = \psi^*(x)\psi(x) = |\psi(x)|^2, \quad (6.8)$$

ou seja,  $p(x,t) = p(x) = |\psi(x)|^2$  se torna independente do tempo. Portanto, a probabilidade de encontrarmos a partícula em uma região  $[a, b]$ , com  $a < b$ , é dada por:

$$P[a,b] = \int_a^b |\psi(x)|^2 dx. \quad (6.9)$$

Do mesmo modo, se  $\Psi(x, t)$  estiver normalizada,  $\psi(x)$  o estará automaticamente:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1. \quad (6.10)$$

Qual é a interpretação física da constante  $E$ ? Até agora, parece que ela surgiu apenas como um artifício matemático. Mas, na verdade, veremos a seguir que  $E$  é nada menos que a energia total da partícula!

### ATIVIDADE



1. Substituindo a função de onda  $\Psi(x, t)$ , dada pela Equação (6.7), na expressão para o valor esperado da energia,  $\langle E \rangle = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} dx$ , verifique que a constante  $E$  efetivamente corresponde ao valor esperado da energia do sistema.

---



---



---

### RESPOSTA COMENTADA

Fazendo a substituição sugerida, obtemos:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} dx = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) e^{iEt/\hbar} \psi(x) \frac{d(e^{-iEt/\hbar})}{dt} dx \\ &= i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) e^{iEt/\hbar} \psi(x) \left( \frac{-iE}{\hbar} \right) e^{-iEt/\hbar} dx = E \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx = E \end{aligned}$$

No último passo, usamos a condição de normalização para  $\psi(x)$ .

Vamos agora olhar com mais atenção para a segunda das equações (6.5), que deve ser satisfeita pela função de onda  $\psi(x)$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (6.11)$$

Essa é uma equação diferencial ordinária conhecida como *equação de Schrödinger independente do tempo*. A função de onda  $\psi(x)$  é sempre uma função contínua e, sempre que o potencial  $V(x)$  for finito, com derivada também contínua. A equação de Schrödinger independente do tempo tem um papel de grande importância prática na Física Quântica: ela aparece com muito mais frequência no dia-a-dia dos físicos do que a própria equação de Schrödinger dependente do tempo. Isso porque, como dissemos antes, as situações em que a energia potencial é independente do tempo são muito frequentes. A grande maioria dos exemplos tratados nesta disciplina envolvem resolver essa equação.

## AUTOVALORES E AUTOFUNÇÕES DE OPERADORES QUÂNTICOS

A equação de Schrödinger independente do tempo (6.11) pode ser escrita da seguinte forma:

$$H\psi(x) = E\psi(x), \quad (6.12)$$

onde

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (6.13)$$

é o *operador hamiltoniano*. Note que, em analogia com a Mecânica Clássica, o operador hamiltoniano é dado pela soma dos operadores energia cinética e energia potencial (lembre-se da Aula 7 da disciplina Mecânica). Utilizando a Equação (5.4) da Aula 5, verificamos que o primeiro termo da Equação (6.13) pode ser associado à energia cinética  $p^2/2m$ .

A Equação (6.12) é um exemplo de *equação de autovalores*. Em geral, uma equação de autovalores tem a forma  $O\psi = \lambda\psi$ , em que  $O$  é um operador e  $\lambda$  é um número, conhecido como *autovalor* do operador. A função  $\psi$  que satisfaz à equação de autovalores é conhecida como *autofunção* do operador. No nosso caso específico, dizemos que a

função de onda que é solução da Equação (6.12) é uma *autofunção do hamiltoniano* e a energia total  $E$  é seu autovalor, também conhecida como *auto-energia*.

Você aprendeu o que são autovalores e autovetores de uma matriz na disciplina de Álgebra Linear II. Aquela situação é completamente análoga à que estamos descrevendo; basta fazer a correspondência matriz  $\leftrightarrow$  operador e autovetor  $\leftrightarrow$  autofunção. De fato, na mesma época em que Schrödinger desenvolveu sua equação, Heisenberg também formulou uma teoria quântica baseada em álgebra de matrizes. No início, pensava-se que as duas teorias eram distintas, mas logo se percebeu que são formulações equivalentes da mesma teoria. Nesta disciplina, trataremos apenas da teoria de Schrödinger. Porém, a formulação de Heisenberg é também bastante interessante e útil, podendo ser aprendida em cursos mais avançados de Física Quântica.

Quando um sistema quântico está em um estado correspondente a uma autofunção da energia, diz-se que ele está em um *estado estacionário*. Um estado estacionário se caracteriza pelo fato de que toda e qualquer medida da energia do sistema dará sempre o mesmo valor  $E$ , a *auto-energia do sistema*. Ou seja, não há incerteza na medida da energia neste caso. Você lembra que vimos um exemplo disso na Atividade Final 1 da aula passada?

### ATIVIDADE



2. O que acabamos de dizer vale não apenas para o operador hamiltoniano, mas também para qualquer operador. Ou seja, se  $\psi$  é uma autofunção do operador  $O$  com autovalor  $\lambda$ , todas as medidas da grandeza física associada ao operador  $O$  darão sempre o mesmo resultado  $\lambda$ . Nesta atividade, você irá demonstrar este resultado.

- Mostre que, se  $\psi$  é uma autofunção do operador  $O$  com autovalor  $\lambda$ , o valor esperado do operador (calculado pela Equação (4.9) da Aula 4) é igual a  $\lambda$ .
- Mostre que, nesse caso, a incerteza  $\Delta O$  é nula.

### RESPOSTA COMENTADA

a. A expressão (4.9) para o valor esperado, no caso estacionário, torna-se  $\langle O \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) O \psi(x) dx$ . Usando o resultado  $O \psi(x) = \lambda \psi(x)$ , obtemos  $\langle O \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \lambda \psi(x) dx = \lambda \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx = \lambda$ , em que utilizamos novamente o fato de que a função de onda  $\psi(x)$  é normalizada.

b. A incerteza é calculada da maneira usual:  $\Delta O = \sqrt{\langle O^2 \rangle - \langle O \rangle^2}$   
 Já calculamos  $\langle O \rangle$  no item anterior, basta agora calcularmos  $\langle O^2 \rangle$ .  
 Isto é feito da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \langle O^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) O^2 \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) O [O \psi(x)] dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) O [\lambda \psi(x)] dx \\ &= \lambda \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) O \psi(x) dx = \lambda \langle O \rangle = \lambda^2 \end{aligned}$$

Assim,  $\Delta O = \sqrt{\lambda^2 - \lambda^2} = 0$ , isto é, a incerteza é nula.

## DENSIDADE DE CORRENTE DE PROBABILIDADE

Como vimos na Aula 3 de Física 4A, ondas clássicas transportam energia. Para essas ondas, podemos definir, por exemplo, o fluxo ou densidade de corrente de energia, ou seja, a energia transportada por unidade de tempo e por unidade de área. Será que podemos definir uma quantidade análoga a essa para as ondas quânticas? Bem, lembre-se de que as ondas quânticas são ondas de matéria. Mais precisamente, são ondas que dão a *probabilidade* de encontrar uma partícula de matéria no espaço. Se essa probabilidade flui como uma onda, então podemos usar a matemática das ondas para calcular a *densidade de corrente de probabilidade* transportada pela onda quântica. Isso parece interessante... Vamos obter este resultado?

Para isso, vamos antes relembrar uma equação muito importante em Física, a *equação de continuidade*. A equação de continuidade aparece em vários contextos na Física. De fato, sempre que há uma lei de conservação de alguma quantidade que flui no espaço (matéria, carga etc.), essa lei é regida por uma equação de continuidade. Vimos uma versão simplificada dessa equação na Aula 3 de Física 2A, você se lembra? Na ocasião, o contexto era a hidrodinâmica. Nesse contexto, obtivemos uma equação de continuidade que expressava a conservação da massa: a variação da massa em um certo volume é dada pela diferença entre a massa que entra e a massa que sai. Para entender isso melhor, veja a **Figura 6.1**. Ela mostra uma certa quantidade de massa  $\Delta M$  em um trecho da reta entre  $x$  e  $x + \Delta x$ . Essa massa pode aumentar ou diminuir,

dependendo do fluxo ou corrente de massa  $j(x,t)$ , definida como a quantidade de massa por unidade de tempo que passa pelo ponto  $x$ , no instante de tempo  $t$  que estamos considerando. De forma precisa,

$$\frac{\partial(\Delta M)}{\partial t} = j(x,t) - j(x + \Delta x, t). \quad (6.14)$$

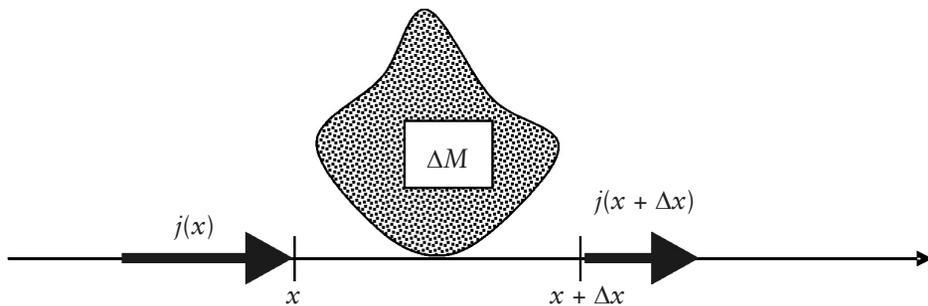
Definindo agora a densidade linear de massa como  $\rho = \Delta M/\Delta x$ , temos  $\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{[j(x + \Delta x, t) - j(x, t)]}{\Delta x}$ , que no limite  $\Delta x \rightarrow 0$  torna-se:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0. \quad (6.15)$$

Essa é a equação de continuidade da massa em uma dimensão. Ela expressa uma física bem simples: o aumento ou diminuição da densidade de massa em um certo ponto depende da derivada espacial da corrente naquele mesmo ponto. Se essa derivada é não-nula, quer dizer que entra mais massa do que sai (ou vice-versa) naquela posição, fazendo com que a densidade de massa varie.



Em três dimensões, a equação de continuidade se escreve como  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0$ , em que  $\rho$  é, neste caso, a densidade volumétrica de massa.



**Figura 6.1:** Conservação da massa em uma dimensão. A massa  $\Delta M$  aumenta ou diminui, dependendo se a corrente de massa que entra,  $j(x)$ , é maior ou menor que a corrente de massa que sai,  $j(x + \Delta x)$ , por unidade de tempo.

Muito bem, vamos aplicar agora esse conceito ao caso no qual estamos interessados. Ou seja, vamos tentar obter uma equação de continuidade para  $|\Psi(x,t)|^2$ . Derivando com relação ao tempo:

$$\frac{\partial |\Psi(x,t)|^2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} [\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)] = \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}. \quad (6.16)$$

Usando a equação de Schrödinger e sua complexa conjugada, a saber:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi \\ -i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + V\Psi^*, \end{aligned} \quad (6.17)$$

podemos escrever

$$\frac{\partial |\Psi(x,t)|^2}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \left[ \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \right] = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right]. \quad (6.18)$$

Note que essa equação pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial |\Psi(x,t)|^2}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0, \quad (6.19)$$

em que

$$j(x,t) = \frac{i\hbar}{2m} \left[ \Psi(x,t) \frac{\partial \Psi^*(x,t)}{\partial x} - \Psi^*(x,t) \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} \right]. \quad (6.20)$$

Compare agora a Equação (6.19) com a Equação (6.15). Veja que interessante: a Equação (6.19) é também uma equação de continuidade! No lugar da densidade de massa, temos agora a densidade de probabilidade  $|\Psi(x,t)|^2$ . Sendo assim, a quantidade  $j(x,t)$ , definida pela Equação (6.20), faz o papel de *densidade de corrente de probabilidade*. O gradiente dessa densidade de corrente, em um certo ponto do espaço e instante de tempo, informa-nos se a probabilidade de encontrarmos a partícula ali aumenta ou diminui.

## ATIVIDADES FINAIS

1. No caso estacionário, em que  $\Psi(x,t)$  é dada pela Equação (6.7):

a. Mostre que a densidade de corrente de probabilidade fica na forma:

$$j(x) = \frac{i\hbar}{2m} \left[ \Psi(x) \frac{d\Psi^*(x)}{dx} - \Psi^*(x) \frac{d\Psi(x)}{dx} \right].$$

b. Derivando essa expressão em relação a  $x$ , e utilizando a equação de Schrödinger independente do tempo, mostre que a densidade de corrente é uma constante, independente de  $x$ .

### RESPOSTA COMENTADA

a. Se substituirmos a Equação (6.7) na Equação (6.20), obteremos:

$$\begin{aligned} j(x,t) &= \frac{i\hbar}{2m} \left[ \Psi(x)e^{-iEt/\hbar} \frac{\partial}{\partial x} (\Psi^*(x)e^{iEt/\hbar}) - \Psi^*(x)e^{iEt/\hbar} \frac{\partial}{\partial x} (\Psi(x)e^{-iEt/\hbar}) \right] \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left[ \Psi(x) \frac{d\Psi^*(x)}{dx} - \Psi^*(x) \frac{d\Psi(x)}{dx} \right]. \end{aligned}$$

Esse é precisamente o resultado que queríamos demonstrar. Perceba que, nesse caso,  $j(x,t) = j(x)$ , ou seja, a densidade de corrente de probabilidade não depende do tempo.

b. Como sugerido, vamos tomar a derivada de  $j(x)$  com relação a  $x$ :

$$\begin{aligned} \frac{dj}{dx} &= \frac{i\hbar}{2m} \left[ \frac{d\Psi}{dx} \frac{d\Psi^*}{dx} + \Psi \frac{d^2\Psi^*}{dx^2} - \frac{d\Psi^*}{dx} \frac{d\Psi}{dx} - \Psi^* \frac{d^2\Psi}{dx^2} \right] \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left[ \Psi \frac{d^2\Psi^*}{dx^2} - \Psi^* \frac{d^2\Psi}{dx^2} \right]. \end{aligned}$$

Usando agora a equação de Schrödinger independente do tempo e sua complexa conjugada, a saber,

$$\begin{aligned} \frac{d^2\Psi}{dx^2} &= \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] \Psi \\ \frac{d^2\Psi^*}{dx^2} &= \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] \Psi^*, \end{aligned}$$

chegamos ao resultado final:

$$\frac{dj}{dx} = \frac{i}{\hbar} [V(x) - E] [\psi\psi^* - \psi^*\psi] = 0$$

Dessa forma, como  $j(x)$  tem derivada nula, ela é uma constante, como queríamos demonstrar.

2. Considere um oscilador harmônico quântico com frequência angular  $\omega$ , em uma dimensão. A energia potencial desse sistema é exatamente igual à do seu análogo clássico:  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ . Veremos, nas próximas aulas, que uma função gaussiana  $\psi(x) = Ce^{-bx^2}$  é a autofunção de menor energia (estado fundamental) do oscilador. Encontre o valor de  $b$  para que essa função seja solução da equação de Schrödinger e obtenha a energia deste estado.

#### RESPOSTA COMENTADA

Vamos substituir a função  $\psi(x) = Ce^{-bx^2}$  na equação de Schrödinger:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \left(\frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\psi &= E\psi \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} (Ce^{-bx^2}) + \left(\frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)(Ce^{-bx^2}) = E(Ce^{-bx^2}) \Rightarrow \\ -\frac{\hbar^2}{2m} (4b^2 x^2 - 2b) e^{-bx^2} + \left(\frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)(e^{-bx^2}) &= E(e^{-bx^2}) \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} (4b^2 x^2 - 2b) + \left(\frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right) = E \Rightarrow \\ \left(\frac{1}{2}m\omega^2 - \frac{2b^2\hbar^2}{m}\right)x^2 &= E - \frac{b\hbar^2}{m}. \end{aligned}$$

Veja que chegamos em uma igualdade em que o lado esquerdo depende de  $x$  e o lado direito, não. Isso não pode acontecer, a menos que os dois termos sejam nulos! Impondo que o lado esquerdo seja nulo, obtemos o valor de  $b$ :

$$\frac{1}{2}m\omega^2 - \frac{2b^2\hbar^2}{m} = 0 \Rightarrow b = \frac{m\omega}{2\hbar}$$

Agora, impondo que o lado direito seja nulo, encontramos o valor da energia:

$$E - \frac{b\hbar^2}{m} = 0 \Rightarrow E = \frac{1}{2}\hbar\omega.$$

Esse é um resultado bastante conhecido. Note que a energia do estado fundamental do oscilador harmônico quântico não é nula. Isso contrasta com o resultado clássico, no qual a situação de menor energia para o oscilador corresponde à situação em que ele está parado na origem, com energia

*cinética e energia potencial nulas, e, portanto, com energia total também nula. Perceba que o Princípio da Incerteza impede que isso ocorra no sistema quântico: é impossível ter uma partícula parada em uma certa posição, pois ela teria, ao mesmo tempo, posição e momento bem definidos. Em outras palavras, para localizar a partícula em uma certa região, paga-se o preço de se aumentar seu momento (e, conseqüentemente, sua energia). A energia do estado fundamental do oscilador harmônico, que encontramos nesta atividade, é também conhecida como “energia de ponto zero”.*

## RESUMO

Se a energia potencial de um sistema não depende do tempo, temos um sistema estacionário, no qual a solução da equação de Schrödinger tem a forma  $\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$ , em que  $E$  é a energia total e a função  $\psi(x)$  é obtida por meio da equação de Schrödinger independente do tempo. Essa equação é um exemplo de equação de autovalores, em que  $\psi(x)$  é a autofunção e  $E$  é o autovalor ou auto-energia. A variação da densidade de probabilidade em um certo ponto do espaço é descrita por uma equação de continuidade, na qual a densidade de corrente de probabilidade  $j(x,t)$  desempenha um papel crucial.

## INFORMAÇÃO SOBRE A PRÓXIMA AULA

Na próxima aula, vamos resolver a equação de Schrödinger para o caso mais simples possível: quando o potencial é nulo em todo o espaço. Isso corresponde a uma partícula que não sofre os efeitos de forças externas, também chamada partícula livre.

## A partícula livre

AULA

# 7

### Meta da aula

Estudar o movimento de uma partícula quântica livre, ou seja, aquela que não sofre a ação de nenhuma força.

- resolver a equação de Schrödinger para a partícula livre;
- analisar fisicamente a energia, o momento linear, as velocidades de fase e de grupo, a densidade de probabilidade e a densidade de corrente de probabilidade de uma partícula livre.

### Pré-requisitos

Para uma melhor compreensão desta aula, é importante que você revise a Aula 6 desta disciplina, o oscilador harmônico simples em uma dimensão (Aula 2 de Física 2B), o conceito de vazão de um fluido em movimento (Aula 3 de Física 2A), a definição de ondas planas propagantes (Aula 3 de Física 4A) e ondas estacionárias (Aula 12 de Física 2B).

## SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER PARA A PARTÍCULA LIVRE

Na Física Clássica, uma partícula livre é aquela que não sofre ação de nenhuma força resultante. Em se tratando de forças conservativas, isto equivale a dizer que a energia potencial da partícula é a mesma em todo o espaço. Lembre-se de que a força é o gradiente da energia potencial, com sinal negativo. Essa é a situação mais simples da dinâmica newtoniana, resultando em um movimento uniforme (velocidade constante) ou ausência de movimento (velocidade nula). Esse é o primeiro tipo de movimento que estudamos na escola. Assim, não lhe parece ser também o primeiro caso que devemos estudar da dinâmica quântica? Vamos então fazê-lo.

Para esse estudo, é preciso considerar a equação de Schrödinger com uma energia potencial constante. Sem perda alguma de generalidade, consideraremos essa constante como sendo zero, ou seja,  $V(x) = 0$ . A equação de Schrödinger independente do tempo (Equação (6.11) da Aula 6) assume a seguinte forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x), \quad (7.1)$$

que pode ser reescrita como:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0 \quad (7.2)$$

em que o valor de  $k$  é dado por:

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (7.3)$$

Conhecemos bem essa equação. Nada mais é do que a equação do oscilador harmônico simples, que estudamos na Aula 2 de Física 2B. Claro, na ocasião, ela estava um pouco diferente: a derivada segunda era temporal e não espacial; além disso era uma equação para  $x(t)$ , e não para  $\psi(x)$ . Mas é exatamente a mesma equação! Não é interessante como, na Física, as mesmas equações matemáticas podem descrever fenômenos completamente diferentes?

Bem, se é a mesma equação, não precisamos resolvê-la, já que sabemos as soluções:  $\sin(kx)$  e  $\cos(kx)$ . Ou, de forma equivalente, podemos escolher  $e^{ikx}$  e  $e^{-ikx}$ , e essa será a forma que adotaremos. Portanto, a solução geral terá a forma:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (7.4)$$

em que  $A$  e  $B$  são constantes complexas arbitrárias. Lembre-se de que a solução geral de uma equação diferencial ordinária de segunda ordem deve ter duas constantes arbitrárias. Essas constantes são determinadas a partir dos dados do problema em questão.

Cabe aqui comentar sobre a normalização da função de onda da partícula livre, descrita pela Equação (7.4). Vamos tomar  $B = 0$ , ou seja,  $\psi(x) = Ae^{ikx}$ . Essa situação corresponde a uma partícula livre se propagando para a esquerda, como veremos em breve. Se usarmos, pura e simplesmente, a condição de normalização expressa pela Equação (6.10) da Aula 6, vamos obter:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx = 1.$$

Parece que temos um problema, pois a integral  $\int_{-\infty}^{\infty} dx$  tem valor infinito, de modo que a única maneira de satisfazer a condição de normalização seria com  $A = 0$ . Esta dificuldade surge porque a situação de uma partícula livre em uma região de extensão infinita é, de fato, não-física. Experimentos reais são sempre realizados em locais com extensão finita, ou seja, limitados pelas paredes de um laboratório ou pelas dimensões de um equipamento. Em sistemas unidimensionais, isto significa impor que função de onda deva ser normalizada em uma "caixa" de comprimento  $L$ . A condição de normalização torna-se então:

$$\int_{-L/2}^{L/2} |\psi(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow |A|^2 \int_{-L/2}^{L/2} dx = 1 \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{L}}.$$

Conseguimos assim obter o valor de  $A$  que normaliza a função de onda. Note que, arbitrariamente, determinamos que  $A$  fosse real. Também arbitrária é a própria escolha do tamanho da caixa  $L$ . Felizmente, todas as propriedades que iremos obter a seguir não dependem do valor da constante  $A$ . Sendo assim, não dependem do tamanho da caixa. Portanto, não é tão importante, do ponto de vista prático, impor que a função de onda da partícula livre seja normalizada.

**ATIVIDADE**



1. Verifique, por substituição na Equação (7.2), que  $\text{sen}(kx)$  e  $e^{ikx}$  são soluções da mesma, para o valor de  $k$ , dado pela Equação (7.3).

---



---

**RESPOSTA COMENTADA**

Basta substituir as expressões sugeridas e tomar a derivada segunda:

$$\frac{d^2}{dx^2}(\text{sen } kx) + k^2 \text{sen } kx = k \frac{d}{dx}(\text{cos } kx) + k^2 \text{sen } kx = -k^2 \text{sen } kx + k^2 \text{sen } kx = 0$$

$$\frac{d^2}{dx^2}(e^{ikx}) + k^2 e^{ikx} = ik \frac{d}{dx}(e^{ikx}) + k^2 e^{ikx} = -k^2 e^{ikx} + k^2 e^{ikx} = 0$$

**ENERGIA**

Nos próximos itens, vamos analisar detalhadamente as características físicas da solução que encontramos. Por exemplo, como se comporta a energia da partícula livre? Antes de mais nada, vemos que a energia  $E$  não pode ser negativa. De fato, se o fosse, de acordo com a Equação (7.3),  $k$  seria um número imaginário puro. Nesse caso, a função de onda  $\psi(x)$  da Equação (7.4) aumentaria exponencialmente em pelo menos um dos limites  $x \rightarrow +\infty$  ou  $x \rightarrow -\infty$ , havendo também a possibilidade de que isso acontecesse nos dois limites. Este crescimento exponencial da função de onda é não-físico, pois impede que a função de onda seja normalizada.

Podemos ver que qualquer valor de  $E \geq 0$  é permitido e, portanto, os valores possíveis para a energia são todos no intervalo  $[0, +\infty)$ . Dizemos, nesse caso, que o *espectro de energias é contínuo*. Esta situação é inteiramente análoga ao caso clássico, em que a energia cinética de uma partícula, que é dada por  $\frac{1}{2}mv^2$ , pode ter qualquer valor positivo.

**MOMENTO LINEAR**

Também podemos fazer uma analogia clássica com o momento linear. Lembramos que, na física clássica, uma partícula livre tem momento bem definido e que não varia no tempo, pois se desloca a uma velocidade constante. No caso quântico, vamos considerar o operador momento,

$$p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (7.5)$$

Podemos mostrar que tanto  $e^{ikx}$  como  $e^{-ikx}$  são autofunções desse operador. De fato, substituindo na Equação (7.5), vemos que

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} e^{ikx} = \hbar k e^{ikx}, \quad (7.6)$$

ou seja,  $e^{ikx}$  é autofunção do operador  $p$  com autovalor  $\hbar k$ . Analogamente, pode-se verificar que  $e^{-ikx}$  é também autofunção de  $p$ , mas com autovalor  $-\hbar k$ . Vemos que as duas funções  $e^{ikx}$  e  $e^{-ikx}$  são autofunções da equação de Schrödinger com o mesmo valor da energia,  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ , mas com diferentes autovalores para o momento,  $\hbar k$  e  $-\hbar k$ , respectivamente. Momentos lineares positivos e negativos correspondem ao deslocamento de partículas para a direita e para a esquerda no eixo  $x$ , respectivamente, como veremos a seguir.

## VELOCIDADE DE GRUPO E VELOCIDADE DE FASE

Se substituirmos a Equação (7.4) na expressão para a função de onda dependente do tempo, Equação (6.7) da Aula 6, obtemos:

$$\begin{aligned} \Psi(x,t) &= (Ae^{ikx} + Be^{-ikx})e^{-iEt/\hbar} \\ &= Ae^{ik(x-vt)} + Be^{-ik(x+vt)} \end{aligned}, \quad (7.7)$$

em que  $v = \frac{E}{\hbar k}$  é uma quantidade com dimensão de velocidade, chamada de *velocidade de fase*, já conhecida na disciplina de Física 2B. Vemos, assim, que a função de onda da partícula livre dada é uma soma ou superposição de duas ondas planas. O termo  $Ae^{ikx}$  leva a uma onda plana que se propaga para a direita,  $Ae^{ik(x-vt)}$ . Já  $Be^{-ikx}$  leva à onda plana  $Be^{-ik(x+vt)}$ , propagando-se para a esquerda. Vimos, ainda em Física 2B, que as ondas planas podem ser escritas de uma forma alternativa:

$$\Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)} + Be^{-i(kx+\omega t)}. \quad (7.8)$$

Desta forma, fica claro que  $k$  é o vetor de onda, e  $\omega$  é a frequência angular da onda. Lembramos, dos nossos estudos de Física 2B, que o vetor de onda se relaciona ao comprimento de onda  $\lambda$  por  $\lambda = 2\pi/k$ . Como o momento da partícula tem módulo  $\hbar k$ , podemos relacionar o momento linear da partícula ao seu comprimento de onda por  $\lambda = h/p$ .

Você reconhece essa relação? Nada mais é que o postulado de de Broglie! Perceba como ele ressurge, de forma bastante natural, da equação de Schrödinger para a partícula livre.

**ATIVIDADE**



2. (a) Mostre que a velocidade de fase tem o valor  $v = \hbar k/2m$ , ou seja, é igual à metade da velocidade de uma partícula de massa  $m$  e momento  $\hbar k$ .

(b) A velocidade da partícula deve ser associada à *velocidade de grupo*,  $v_g = d\omega/dk$ . Esta aparece quando ocorre a superposição de ondas planas de diferentes valores de  $k$ , formando um pacote de ondas. Portanto, mostre também que  $v_g = \hbar k/m$ .

---



---



---

**RESPOSTA COMENTADA**

(a) Basta substituir a expressão para a energia,  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ , na

expressão para a velocidade de fase,  $v = \frac{E}{\hbar k}$ , que chegamos no resultado esperado,  $v = \hbar k/2m$ .

(b) Primeiramente, precisamos obter a relação de dispersão  $\omega(k)$ .

Para isso, usamos a relação de Einstein,  $E = \hbar\omega$ , de modo que

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}. \text{ Finalmente, tomando a derivada, obtemos } v_g = d\omega/dk = \hbar k/m$$

que vem a ser o resultado esperado.

**DENSIDADE DE PROBABILIDADE E DENSIDADE DE CORRENTE DE PROBABILIDADE**

Vamos analisar agora como a densidade de probabilidade e a densidade de corrente de probabilidade, definidas na Aula 6 para o caso estacionário, comportam-se no caso de uma partícula livre. Vamos considerar, inicialmente, uma partícula que se movimenta para a direita. Para isso, basta tomarmos  $B = 0$  na Equação (7.7). Assim, a densidade de probabilidade associada à onda plana  $Ae^{ik(x-vt)}$  é dada por:

$$p = |Ae^{ik(x-vt)}|^2 = |A|^2 \tag{7.9}$$

que é independente da posição. Portanto, a partícula pode ser encontrada com igual probabilidade em qualquer ponto do eixo  $x$ . Desta forma, sua posição é completamente desconhecida, ou seja, tem incerteza infinita. Isso está de acordo com o Princípio de Incerteza de Heisenberg, já que o momento linear da partícula  $\hbar k$  é conhecido com precisão absoluta ou incerteza nula. Lembre-se de que a onda plana é uma autofunção do operador momento. Em resumo, a função de onda  $Ae^{ik(x-vt)}$  representa uma partícula de momento exatamente conhecido, propagando-se para a direita em alguma posição desconhecida do eixo  $x$ .

### ATIVIDADE



3. Calcule a densidade de corrente de probabilidade  $j$ , associada a uma partícula livre que se desloca para a direita. Para isso, use a função de onda  $Ae^{ik(x-vt)}$  e substitua a mesma na Equação (6.20). Mostre que  $j = v_g |A|^2$ , onde  $v_g = \hbar k/m$  é a velocidade de grupo definida na Atividade 2.

### RESPOSTA COMENTADA

Fazendo a substituição sugerida, obtemos:

$$\begin{aligned} j(x,t) &= \frac{i\hbar}{2m} \left[ Ae^{ik(x-vt)} \frac{\partial}{\partial x} (A^* e^{-ik(x-vt)}) - A^* e^{-ik(x-vt)} \frac{\partial}{\partial x} (Ae^{ik(x-vt)}) \right] \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left[ (-ik)Ae^{ik(x-vt)} A^* e^{-ik(x-vt)} - (ik)A^* e^{-ik(x-vt)} Ae^{ik(x-vt)} \right] \\ &= \frac{2\hbar k}{2m} |A|^2 = v_g |A|^2, \end{aligned}$$

em que, ao final, usamos a expressão que encontramos anteriormente para a velocidade de grupo,  $v_g = \hbar k/m$ . Portanto, vemos que, para a partícula livre, a densidade de corrente de probabilidade  $j$  é constante e independe da posição  $x$  e do tempo  $t$ . Lembre-se: foi mostrado na Aula 6 que isso deve mesmo ocorrer sempre que o sistema for estacionário. Note ainda que, combinando o resultado da Atividade 3 com a Equação (7.9), temos  $j = v_g p$ . Compare essa equação com a Equação (3.5) da Aula 3 de Física 2A, que define a vazão de um fluido. O caso quântico é análogo ao de um "fluido" de densidade  $p$ , movendo-se com velocidade  $v_g$ . Repare que a velocidade que surge nessa expressão é a velocidade grupo e não a velocidade de fase!

Podemos agora analisar rapidamente o caso em que a função de onda é dada pela outra onda plana,  $B e^{-ik(x+vt)}$ . Nesse caso,  $p = |B|^2$ , e  $j = -v_g p$ . Assim, podemos considerar que a função de onda  $B e^{-ik(x+vt)}$  representa uma partícula de momento exatamente conhecido, propagando-se para a esquerda em alguma parte do eixo  $x$ . Outro caso interessante é se considerarmos  $A = B$  na Equação (7.8). Esse caso corresponde a duas ondas planas se propagando em direções opostas, mas com a mesma amplitude. Nesse caso, a Equação (7.8) fica assim:

$$\Psi(x,t) = A \left[ e^{ikx} + e^{-ikx} \right] e^{-i\omega t} = 2A \cos kx e^{-i\omega t}, \quad (7.10)$$

ou seja, em vez de termos ondas planas se propagando em uma ou outra direção, temos uma onda estacionária, exatamente como vimos no caso de ondas em uma corda na Aula 12 de Física 2B.

#### ATIVIDADE

4. Mostre que a densidade de probabilidade associada à função de onda dada pela Equação (7.10) é dada por  $p = 4|A|^2 \cos^2 kx$ , e que a densidade de corrente de probabilidade  $j$  é nula nesse caso.

---



---



---

#### RESPOSTA COMENTADA

Usando a definição  $p = |\Psi(x,t)|^2$ , obtemos o resultado  $p = 4|A|^2 \cos^2 kx$ . Para calcularmos a densidade de corrente de probabilidade, utilizamos a definição:

$$\begin{aligned} j(x,t) &= \frac{i\hbar}{2m} \left[ \Psi(x,t) \frac{\partial \Psi^*(x,t)}{\partial x} - \Psi^*(x,t) \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} \right] = \\ &= \frac{i\hbar}{2m} [-2Ak \cos kx \operatorname{sen} kx + 2Ak \cos kx \operatorname{sen} kx] = 0. \end{aligned}$$

Esse resultado pode ser entendido facilmente. A corrente de probabilidade associada à onda plana  $A e^{ik(x+vt)}$  se propagando para a direita,  $v_g |A|^2$ , é cancelada por aquela associada à onda  $A e^{-ik(x+vt)}$  que se propaga para a esquerda, que, como vimos, é igual a  $-v_g |A|^2$ . Dessa forma, podemos associar à onda estacionária da Equação (7.10) uma partícula livre se movimentando no eixo  $x$  com velocidade  $v_g$ . Porém, nesse caso, além de desconhecermos a posição da partícula, ignoramos também a direção do seu movimento.



Para a função de onda descrita pela Equação (7.10), note que a densidade de probabilidade de encontrar a partícula em uma posição  $x$ , calculada na Atividade 4, anula-se para os valores em que  $\cos kx = 0$ , ou seja, para

$$x_n = \frac{\pi}{k} \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad (7.11)$$

em que  $n$  é um número inteiro (positivo ou negativo). Portanto a partícula não poderá ser encontrada em nenhuma das posições  $x_n$  dadas pela Equação (7.11). Esse é um efeito da interferência entre as duas ondas se propagando em direções opostas, sendo, portanto, uma consequência das propriedades ondulatórias associadas à partícula. Perceba que as posições  $x_n$  são completamente equivalentes aos nodos (pontos de amplitude nula) de uma onda estacionária em uma corda vibrante, que vimos na Aula 12 de Física 2B.

### ATIVIDADE



5. Calcule a densidade de probabilidade  $p$  associada à função de onda geral para a partícula livre, dada pela Equação (7.8), e mostre que a densidade de corrente de probabilidade é, nesse caso,  $j = v_g(|A|^2 - |B|^2)$ .

---



---



---

### RESPOSTA COMENTADA

Mais uma vez, partimos da definição de  $j$ :

$$\begin{aligned} j(x, t) &= \frac{i\hbar}{2m} \left[ \Psi(x, t) \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} - \Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \right] \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left\{ \left[ A e^{i(kx - \omega t)} + B e^{-i(kx + \omega t)} \right] \frac{\partial}{\partial x} \left[ A^* e^{-i(kx - \omega t)} + B^* e^{i(kx + \omega t)} \right] - \left[ A^* e^{-i(kx - \omega t)} + B^* e^{i(kx + \omega t)} \right] \frac{\partial}{\partial x} \left[ A e^{i(kx - \omega t)} + B e^{-i(kx + \omega t)} \right] \right\} \\ &= \frac{\hbar k}{2m} \left\{ \left[ A e^{i(kx - \omega t)} + B e^{-i(kx + \omega t)} \right] \left[ A^* e^{-i(kx - \omega t)} - B^* e^{i(kx + \omega t)} \right] - \left[ A^* e^{-i(kx - \omega t)} + B^* e^{i(kx + \omega t)} \right] \left[ -A e^{i(kx - \omega t)} + B e^{-i(kx + \omega t)} \right] \right\} \\ &= \frac{\hbar k}{2m} \left\{ |A|^2 - |B|^2 - AB^* e^{ikx} + BA^* e^{-ikx} + |A|^2 - |B|^2 - A^* B e^{-ikx} + B^* A e^{ikx} \right\} = \frac{\hbar k}{m} \left[ |A|^2 - |B|^2 \right] \\ &= v_g \left[ |A|^2 - |B|^2 \right]. \end{aligned}$$

### ATIVIDADE FINAL

Vamos considerar uma partícula livre em 3 dimensões? Resolva a equação de Schrödinger correspondente (veja a Equação (4.1) da Aula 4) com potencial nulo, a saber:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \Psi(x, y, z) = E\Psi(x, y, z).$$

Obtenha, então, as funções de onda e as expressões para os autovalores da energia em termos do vetor de onda  $\vec{k} = k_x \hat{x} + k_y \hat{y} + k_z \hat{z}$ . Dica: use a técnica de separações de variáveis e suponha uma solução da forma  $\Psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$ .

#### RESPOSTA COMENTADA

Substituindo a solução proposta na equação de Schrödinger, obtemos:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] X(x)Y(y)Z(z) &= EX(x)Y(y)Z(z) \Rightarrow \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ YZ \frac{d^2 X}{dx^2} + XZ \frac{d^2 Y}{dy^2} + XY \frac{d^2 Z}{dz^2} \right] &= E XYZ. \end{aligned}$$

Dividindo ambos os lados por XYZ, obtemos :

$$-\left[ \frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2} + \frac{1}{Y} \frac{d^2 Y}{dy^2} + \frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} \right] = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

Note que, para que essa igualdade seja verdadeira, cada um dos três termos entre colchetes deve ser igual a uma constante. Desta forma, obtemos três equações separadas:

$$\begin{cases} \frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2} = -k_x^2 \\ \frac{1}{Y} \frac{d^2 Y}{dy^2} = -k_y^2 \\ \frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} = -k_z^2 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \frac{d^2 X}{dx^2} + k_x^2 X = 0 \\ \frac{d^2 Y}{dy^2} + k_y^2 Y = 0 \\ \frac{d^2 Z}{dz^2} + k_z^2 Z = 0 \end{cases}$$

em que  $E = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$ . Essa é a relação entre energia e vetor de onda. As soluções das três equações diferenciais são totalmente análogas à descrita pela Equação (7.4) para o caso unidimensional:

$$\begin{cases} X(x) = Ae^{ik_x x} + Be^{-ik_x x} \\ Y(y) = Ce^{ik_y y} + De^{-ik_y y} \\ Z(z) = Fe^{ik_z z} + Ge^{-ik_z z} \end{cases}$$

## RESUMO

Uma partícula livre é aquela que não sofre a influência de nenhuma força e, portanto, tem associada uma energia potencial constante ou nula. Nesse caso, as soluções da equação de Schrödinger são ondas planas, com valores bem definidos de energia e momento linear e, portanto, incerteza infinita na posição. Em outras palavras, a densidade de probabilidade de se encontrar a partícula é constante em todo o espaço, fluindo com uma densidade de corrente também constante.

## INFORMAÇÕES SOBRE A PRÓXIMA AULA

Na próxima aula, vamos resolver a equação de Schrödinger para o potencial degrau. Veremos que, ao contrário do que ocorre na física clássica, uma partícula quântica pode ter uma probabilidade não-nula de ser encontrada em uma região do espaço onde sua energia potencial é *maior* que sua energia total!



# O degrau de potencial. Caso I: energia menor que o degrau

AULA

8

## Meta da aula

Aplicar o formalismo quântico ao caso de uma partícula quântica que incide sobre um potencial  $V(x)$  que tem a forma de um degrau, ou seja, tem um valor 0 para  $x < 0$  e um valor  $V_0 > 0$  para  $x > 0$ . Vamos considerar inicialmente o caso em que a energia da partícula é menor que a altura do degrau.

objetivo

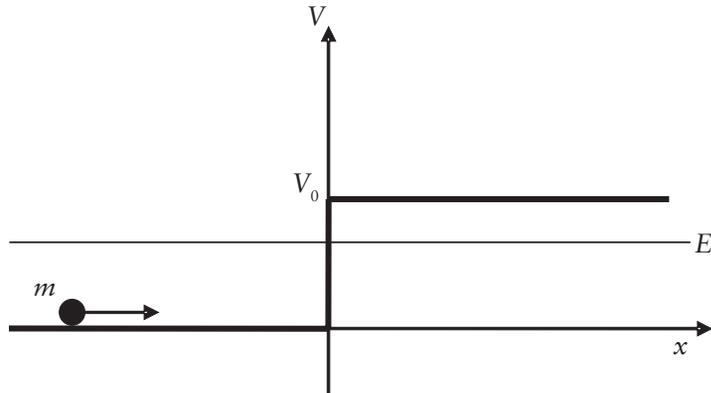
- mostrar que, no caso da energia  $E$  da partícula ser menor do que a altura do degrau ( $V_0$ ), existe a possibilidade de encontrar a partícula na região classicamente proibida.

## Pré-requisito

Para uma melhor compreensão desta aula, é importante que você revise as Aulas 6 e 7 desta disciplina.

## O DEGRAU DE POTENCIAL

Vamos estudar agora o caso de uma partícula de massa  $m$  que se movimenta num potencial  $V(x)$ , em que  $V(x) = 0$  para  $x < 0$  e  $V(x) = V_0 > 0$  para  $x > 0$ , como ilustra a **Figura 8.1**. Este é o chamado *degrau de potencial* ou *potencial degrau*. Podemos supor, por simplicidade, que a partícula incide a partir da esquerda, como mostra a **Figura 8.1**:



**Figura 8.1:** Uma partícula quântica de massa  $m$  que incide em um degrau de potencial com a energia menor que a altura do degrau.

Note que, se  $V_0$  fosse igual a zero, voltaríamos ao caso da partícula livre, discutido na Aula 7. Para o degrau de potencial, da mesma forma que no caso da partícula livre, não existem soluções da equação de Schrödinger com energia  $E < 0$ , já que isso obrigaria a função de onda  $\psi(x)$  a divergir para  $x \rightarrow +\infty$  e/ou  $x \rightarrow -\infty$ . Assim, podemos dividir nosso estudo em dois casos:  $0 < E < V_0$ , ou seja, a energia da partícula é menor do que a altura do degrau de potencial, e  $E > V_0$ , em que a energia é maior do que o degrau. Nesta aula, discutiremos o primeiro caso, enquanto o segundo caso será discutido na próxima aula.

Note que o potencial é contínuo (e constante!) em todo o espaço, sofrendo apenas uma descontinuidade em  $x = 0$ . Este é o primeiro de uma série de exemplos que iremos estudar de potenciais com essas características, ou seja, “contínuos por partes”. A estratégia para solucionar esse tipo de problema é sempre a mesma: resolvemos a equação de Schrödinger separadamente em cada região onde o potencial é contínuo. Depois, tentamos ajustar as diferentes soluções, para que elas sejam consistentes nos pontos de descontinuidade do potencial. Já veremos como isso funciona na prática.

Antes de iniciarmos nosso estudo, vamos lembrar o que acontece no domínio da Física Clássica, ou seja, para sistemas macroscópicos. No primeiro caso (energia menor que a barreira), a partícula clássica não pode penetrar na região do degrau ( $x > 0$ ), sendo refletida elasticamente na origem (*ponto de retorno*). No segundo caso (energia maior que a barreira), a partícula clássica passa sem ser refletida, diminuindo apenas a sua energia cinética e, portanto, a sua velocidade de movimento. Parece simples, não? Pois bem, veremos que, no domínio da mecânica quântica, as coisas não são tão simples assim... É isso que as torna ainda mais interessantes!

### SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER NO CASO $E < V_0$

Como dissemos, nossa estratégia é tratar separadamente as regiões  $x < 0$  e  $x > 0$ . Para  $x < 0$ , onde o potencial é nulo, a equação de Schrödinger pode ser colocada da mesma forma do que para a partícula livre, vista na aula anterior. Portanto, na região esquerda, a solução tem a forma:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad x < 0 \quad (8.1)$$

em que  $k = \sqrt{2mE} / \hbar$ .

Para  $x > 0$ , a equação de Schrödinger adquire uma forma um pouco diferente:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_0\psi(x) = E\psi(x), \quad (8.2)$$

que pode ser reescrita como

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - K^2\psi(x) = 0, \quad (8.3)$$

em que  $K = \sqrt{2m(V_0 - E)} / \hbar$ .

Essa equação diferencial é também nossa conhecida dos cursos de cálculo. Sabemos que a sua solução tem a seguinte forma geral:

$$\psi(x) = Ce^{Kx} + De^{-Kx}, \quad x > 0. \quad (8.4)$$

Porém, lembramos que, para que a função de onda seja aceitável, ela não pode ir para infinito quando  $x \rightarrow +\infty$ . Como  $K$  é positivo, isso implica que o coeficiente  $C$  deve ser nulo e, portanto, a solução geral simplifica-se:

$$\psi(x) = De^{-Kx}, \quad x > 0 \quad (8.5)$$

Portanto, temos a forma geral da solução em  $x < 0$  (Equação (8.1)) e  $x > 0$  (Equação (8.5)). Como havíamos programado, resta agora fazer a “costura” das duas soluções em  $x = 0$ , ou seja, no ponto de descontinuidade do potencial. Como fazer isso? Bem, sabemos que a função de onda  $\psi(x)$  deve satisfazer a condição de ser contínua e ter derivada contínua em todos os pontos do eixo  $x$ . As expressões (8.1) e (8.5) já garantem essas condições para  $x < 0$  e para  $x > 0$ , falta apenas impô-las para  $x = 0$ . Para que a função de onda seja contínua nesse ponto, o valor das duas expressões em  $x = 0$  terá de ser o mesmo, levando à condição:

$$A + B = D. \quad (8.6)$$

Vamos agora impor a condição de continuidade da derivada de  $\psi(x)$  em  $x = 0$ . As derivadas de (8.1) e (8.5) são, respectivamente,

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = ikAe^{ikx} - ikBe^{-ikx}, \quad x < 0 \quad (8.7)$$

e

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = -KDe^{-Kx}, \quad x > 0. \quad (8.8)$$

Dessa forma, a continuidade da derivada da função de onda em  $x = 0$  implica a condição

$$ik(A - B) = -KD. \quad (8.9)$$

Vemos que a solução completa de nosso problema, expressa pelas Equações (8.1) e (8.5), depende de três constantes arbitrárias:  $A$ ,  $B$  e  $D$ . As condições de continuidade da função de onda e de sua derivada permitiram-nos obter as Equações (8.6) e (8.9), que relacionam estas três constantes. Para determinar completamente essas constantes, precisaríamos de uma terceira relação, que pode ser obtida pela condição de normalização da função de onda.

Conseguimos obter duas equações, (8.6) e (8.9), que relacionam as três constantes que queremos determinar. Assim, podemos, por exemplo, determinar  $A$  e  $B$  como função de  $D$ :

$$A = \frac{k + iK}{2k} D, \quad B = \frac{k - iK}{2k} D. \quad (8.10)$$

### ATIVIDADE



1. Mostre que  $A$  e  $B$  têm o mesmo módulo.

---



---

### RESPOSTA COMENTADA

Podemos definir  $z = \frac{k + iK}{2k}$ , de modo que  $A = zD$  e  $B = z^*D$

Escrevendo  $A$ ,  $B$ ,  $z$  e  $D$  em termos de seus módulos e fases, temos

$$|A| = |z||D| = |z^*||D| = |B|.$$

Como  $A$  e  $B$  têm o mesmo módulo, a densidade de corrente de probabilidade  $j$  associada à onda plana se propagando para a direita,  $j = v_g |A|^2$ , calculada na Atividade 3 da Aula 7, é igual à da onda plana se propagando para a esquerda,  $j = v_g |B|^2$ . Dessa forma, a densidade de corrente total, calculada na Atividade 5 da Aula 7, será nula. Se interpretarmos a onda plana se propagando para a direita como uma onda *incidente* sobre o degrau de potencial, então a onda se propagando para a esquerda deve ser considerada como a onda *refletida*. Se definirmos o coeficiente de reflexão como o quociente da densidade de corrente de probabilidade refletida sobre a densidade de corrente de probabilidade incidente,

$$R = \frac{v_g |B|^2}{v_g |A|^2} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = 1, \quad (8.11)$$

vemos que o coeficiente de reflexão  $R$  é igual a 1. Portanto, teremos reflexão total da onda de probabilidade incidente sobre o degrau de potencial. Isto concorda perfeitamente com as previsões da mecânica clássica: partículas com energia  $E < V_0$  são sempre refletidas pelo degrau de potencial.

Se escrevermos os coeficientes complexos  $A$  e  $B$  em termos de seus módulos e fases, ou seja,  $A = |A|e^{i\theta_A}$  e  $B = |B|e^{i\theta_B}$ , e usando o fato de  $A$  e  $B$  terem o mesmo módulo, obteremos

$$\frac{B}{A} = \frac{|B|}{|A|} e^{i(\theta_B - \theta_A)} = e^{i\alpha}, \quad (8.12)$$

em que  $\alpha = \theta_B - \theta_A$  é a diferença entre os ângulos de fase das ondas refletida e incidente, que se conhece também como *deslocamento de fase* da onda refletida.

### ATIVIDADES



2. Usando as Equações (8.10), calcule o deslocamento de fase  $\alpha$  da onda refletida pelo degrau de potencial.

---



---



---

### RESPOSTA COMENTADA

Usando as Equações (8.10) e tomando a razão  $B/A$ , obteremos:

$$\frac{B}{A} = \frac{k - iK}{k + iK} = \frac{e^{i[\tan^{-1}(-K/k)]}}{e^{i[\tan^{-1}(K/k)]}} = e^{i[2\tan^{-1}(-K/k)]} = e^{i\alpha},$$

de modo que  $\alpha = -2 \tan^{-1}(K/k)$ .

3. Mostre que a função de onda para o degrau de potencial pode ser escrita na forma:

$$\psi(x) = 2Ae^{i\alpha/2} \cos(kx - \alpha/2), x < 0$$

$$\psi(x) = 2Ae^{i\alpha/2} \cos(\alpha/2) e^{-Kx}, x > 0$$

**RESPOSTA COMENTADA**

Substituindo  $B = Ae^{i\alpha}$  na Equação (8.1), temos:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Ae^{i\alpha} e^{-ikx} = Ae^{i\alpha/2} \left[ e^{i(kx-\alpha/2)} + e^{-i(kx-\alpha/2)} \right] = 2Ae^{i\alpha/2} \cos(kx - \alpha/2).$$

Esta é a expressão para a função de onda na região  $x < 0$ .

Substituindo agora  $B = Ae^{i\alpha}$  na Equação (8.9), o resultado é:

$$ik(A - Ae^{i\alpha}) = -KD \Rightarrow D = \frac{ikA(e^{i\alpha} - 1)}{K}.$$

Substituindo essa relação na Equação (8.5), temos:

$$\psi(x) = \frac{ikA(e^{i\alpha} - 1)}{K} e^{-Kx} = \frac{ikAe^{i\alpha/2}(e^{i\alpha/2} - e^{-i\alpha/2})}{K} e^{-Kx} = \frac{-2k}{K} Ae^{i\alpha/2} \text{sen}(\alpha/2) e^{-Kx}.$$

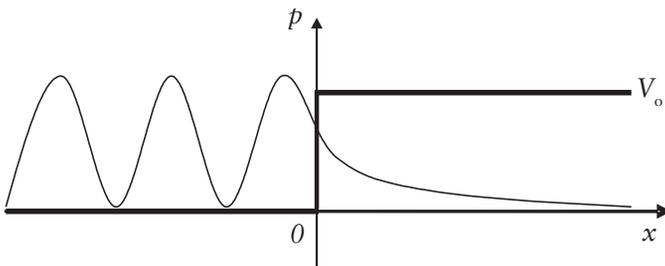
Sabendo ainda, conforme calculado na Atividade 2, que  $-\frac{K}{k} = \tan(\alpha/2)$ , obtemos finalmente, para  $x > 0$ :

$$\psi(x) = 2Ae^{i\alpha/2} \frac{\text{sen}(\alpha/2)}{\tan(\alpha/2)} e^{-Kx} = 2Ae^{i\alpha/2} \cos(\alpha/2) e^{-Kx}$$

### ANÁLISE FÍSICA DA SOLUÇÃO E O EFEITO DE PENETRAÇÃO DE BARREIRA

Estamos agora em condições de interpretar a função de onda  $\psi(x)$  para o degrau de potencial no caso  $E < V_0$ . Veja que, para  $x < 0$ , a superposição das ondas de igual amplitude, propagando-se para a direita e para a esquerda, causa uma onda estacionária. A densidade de probabilidade do lado esquerdo, obtida a partir da expressão para a função de onda obtida na Atividade 3, será:

$$p(x) = 4|A|^2 \cos^2(kx - \alpha/2), \quad x < 0. \quad (8.13)$$



**Figura 8.2:** Densidade de probabilidade para uma partícula quântica em um degrau de potencial. A partícula incide da esquerda com  $E < V_0$ .

Essa função está mostrada esquematicamente na **Figura 8.2**, do lado esquerdo. Note que, nessa região, a amplitude de probabilidade apresenta um comportamento oscilatório que reflete o efeito de interferência entre as ondas incidente e refletida. Os máximos de  $p(x)$  estão separados por intervalos  $\Delta x = \pi/k$ , que corresponde à metade do comprimento de onda de de Broglie da partícula de massa  $m$  e energia  $E$  incidente sobre o degrau de potencial. Vemos que a densidade de

probabilidade é análoga à encontrada para a partícula livre na Atividade 4 da Aula 7. O efeito do potencial aparece apenas na defasagem associada à constante  $\alpha$ .

Vamos agora considerar a função de onda na região  $x > 0$ . Vemos, a partir da Equação (8.5), que a densidade de probabilidade  $p(x)$  será

$$p(x) = |D|^2 e^{-2Kx} = 4|A|^2 \cos^2(\alpha/2) e^{-2Kx}, \quad x > 0. \quad (8.14)$$

Vemos aqui um efeito muito interessante: a probabilidade de encontrarmos a partícula dentro da região  $x > 0$  é não-nula. Isto seria impossível pela Mecânica Clássica, pois, nessa região, a energia total da partícula,  $E$ , é menor do que o valor do potencial,  $V_0$ . Por este motivo, essa região é dita *classicamente proibida*. Perceba, pela **Figura 8.2**, que a probabilidade de encontrarmos a partícula em  $x > 0$  decai exponencialmente à medida que nos afastamos da origem. Este fenômeno não-clássico é chamado *penetração de barreira* e será discutido várias vezes nas próximas aulas, por se tratar de um dos efeitos quânticos mais importantes. Note ainda que esse efeito não é inconsistente com o fato, expresso pela Equação (8.11), de que a partícula é refletida, com 100% de probabilidade, pela barreira. Poderíamos formular a seguinte analogia clássica para descrever o movimento da partícula: ela vem da esquerda, penetra um pouco na região proibida e, depois, com certeza, retorna para o lugar de onde veio.

Apesar de parecer bastante exótico pela visão da mecânica clássica, o efeito de penetração de barreira já era um velho conhecido da física ondulatória. Por exemplo, quando uma onda luminosa incide de um meio de índice de refração maior para outro com índice de refração menor, dependendo do ângulo de incidência, pode ocorrer o efeito de reflexão total da luz. Porém, em perfeita analogia com o efeito quântico de penetração de barreira, o campo eletromagnético ondulatório da luz penetra um pouco na região com índice de refração menor, decaindo exponencialmente quando a distância até a interface entre os dois meios aumenta. Essas ondas penetrantes são conhecidas como ondas evanescentes. Dessa forma, o efeito de penetração de barreira pode ser entendido como mais uma manifestação da natureza ondulatória da matéria.

### ATIVIDADE



4. Mostre, a partir da Equação (8.5), que a densidade de corrente de probabilidade  $j$  é nula para  $x > 0$ .

---



---

### RESPOSTA COMENTADA

Usamos a definição de  $j(x)$  no caso estacionário, obtida na

Aula 6: 
$$j(x) = \frac{i\hbar}{2m} \left[ \psi(x) \frac{d\psi^*(x)}{dx} - \psi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx} \right].$$

Substituindo nesta expressão a função de onda na região  $x > 0$ ,  $\psi(x) = D e^{-Kx}$ , obteremos:

$$j(x) = \frac{i\hbar}{2m} \left[ D e^{-Kx} (-K) D^* e^{-Kx} - D^* e^{-Kx} (-K) D e^{-Kx} \right] = 0.$$

O resultado da Atividade 4 era de se esperar. De fato, como vimos na Aula 6, em qualquer situação estacionária (potencial independente do tempo), a densidade de corrente de probabilidade é constante para todo  $x$ . Como vimos anteriormente que a densidade de corrente de probabilidade é nula do lado esquerdo da barreira, ela deverá ser também nula do lado direito. É importante notar que esse resultado (que a densidade de corrente de probabilidade é nula) é válido apenas no caso estudado nesta aula, em que  $E < V_0$ . No caso  $E > V_0$ , a ser estudado na Aula 9, a densidade de corrente de probabilidade será constante, mas não-nula.

## ATIVIDADES FINAIS

1. Dissemos que a penetração de barreira é um fenômeno quântico. Será que ela não pode mesmo ocorrer com partículas macroscópicas, ainda que muito pequenas? Vamos considerar um grão de poeira, de massa  $m = 1 \times 10^{-14}$  kg, com uma velocidade  $v = 10^{-3}$  m/s. Essa é uma velocidade típica da agitação térmica de uma partícula desse tamanho. Suponha que a partícula incida sobre um degrau de potencial com altura duas vezes maior que sua energia cinética. Qual a distância de penetração na barreira em que a amplitude de probabilidade de se encontrar a partícula caiu para 1% de seu valor na origem?

---



---

### RESPOSTA COMENTADA

A amplitude de probabilidade de se encontrar a partícula na região classicamente proibida é dada pela Equação (8.14):  $p(x) = |D|^2 e^{-2Kx}$ ,  $x > 0$ . A partir dela, podemos calcular a distância  $\Delta x$ , para que a amplitude de probabilidade caia a 1% de seu valor em  $x = 0$ :

$$\frac{p(\Delta x)}{p(0)} = e^{-2K\Delta x} = 0,01 \Rightarrow$$

$$\Delta x = \frac{\ln(100)}{2K}$$

Basta então calcularmos  $K = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ . A partir dos dados do problema, a energia da partícula é  $E = \frac{1}{2}mv^2$ , e a altura do degrau

é duas vezes maior,  $V_0 = 2E = mv^2$ . Assim, temos

$$K = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar = mv/\hbar = 9,5 \times 10^{16} \text{ m}^{-1}$$

com o que podemos finalmente obter

$$\Delta x = 2,4 \times 10^{-17} \text{ m} !$$

Esta distância de penetração é  $10^{-7}$  vezes menor do que o tamanho de um átomo, de modo que não há qualquer esperança de que a penetração de partículas macroscópicas (clássicas) por barreiras de potencial seja verificada experimentalmente.

2. Um elétron no interior de um metal pode, aproximadamente, ser descrito como uma partícula livre. Porém, ao tentar escapar do metal para o vácuo, este elétron sofre a atração das cargas positivas do metal, de modo que há uma barreira de energia para que isso aconteça. A energia adicional ( $V_0 - E$ ) que o elétron teria de ganhar para superar a barreira nada mais é que a função trabalho do metal, nossa conhecida do efeito fotoelétrico (Aula 8 de Física 4B). No cobre, a função trabalho vale 4 eV. Estime, como na Atividade anterior, a distância de penetração de um elétron do cobre, para a região de vácuo, de modo que a amplitude de probabilidade caia para 1% de seu valor inicial.

---

---

---

**RESPOSTA COMENTADA**

Continuam valendo as mesmas relações encontradas na atividade anterior. Utilizando agora o valor da massa do elétron,  $m = 9,11 \times 10^{-31}$  kg, encontramos a constante de decaimento  $K$ :

$$K = \sqrt{2m(V_0 - E)} / \hbar = 1,0 \times 10^{10} \text{ m}^{-1},$$

de modo que a amplitude de probabilidade cai para 1% a uma distância  $\Delta x$  dada por:

$$\Delta x = \frac{\ln(100)}{2K} = 2,3 \text{ \AA}.$$

Esta distância é da ordem das dimensões atômicas. Será que poderia ser medida? Veremos nas próximas aulas!

## RESUMO

Um degrau de potencial é definido por uma energia potencial nula para  $x < 0$  e igual a uma constante  $V_0$  para  $x > 0$ . Se uma partícula incide a partir da esquerda com energia menor que a altura do degrau, essa partícula é refletida com 100% de probabilidade. Porém, consegue penetrar um pouco na região classicamente proibida.

## INFORMAÇÕES SOBRE A PRÓXIMA AULA

Na próxima aula, vamos resolver o segundo caso do degrau de potencial, em que a partícula incidente tem energia maior que a barreira. Veremos que, neste caso, a partícula poderá ser transmitida através do degrau, mas, em desacordo com a mecânica clássica, ainda restará uma probabilidade de que ela seja refletida!

## O degrau de potencial. Caso II: energia maior que o degrau

### Meta da aula

Aplicar o formalismo quântico ao caso de uma partícula quântica que incide sobre o degrau de potencial, definido na Aula 8. Vamos considerar agora o caso em que a energia da partícula é maior que a altura do degrau.

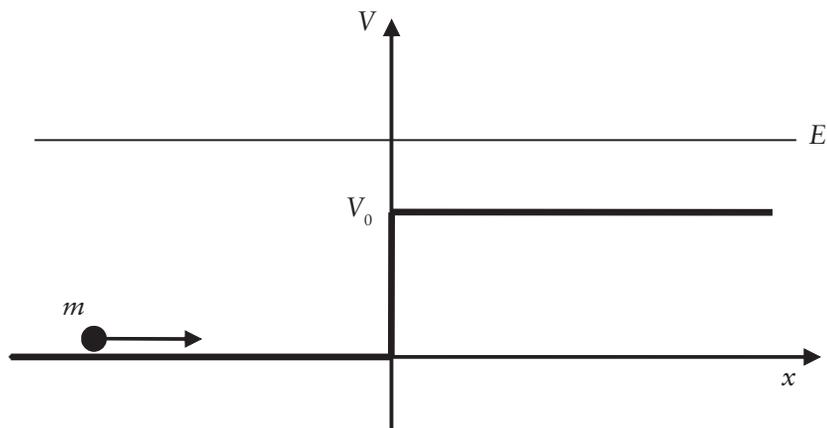
- verificar que, no caso de a energia  $E$  da partícula ser maior do que a altura do degrau ( $V_0$ ), a partícula poderá passar (ser transmitida) pelo degrau ou ser refletida por ele;
- usar as regras da mecânica quântica para calcular as probabilidades de transmissão e reflexão.

### Pré-requisitos

Para uma melhor compreensão desta aula, é importante que você revise a Aula 8 desta disciplina e, também, os conceitos de reflexão e transmissão de ondas na interface entre duas regiões com índices de refração diferentes (Aula 6 de Física 4A).

## SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER NO CASO $E > V_0$

Dando seqüência ao nosso estudo sobre o degrau de potencial, iniciado na Aula 8, vamos agora analisar a situação em que uma partícula quântica de massa  $m$ , vinda da esquerda, incide sobre o degrau de potencial com energia maior que a altura do degrau ( $E > V_0$ ). Esta situação está mostrada na **Figura 9.1**:



**Figura 9.1:** Uma partícula quântica de massa  $m$  que incide sobre um degrau de potencial com energia maior que a altura do degrau ( $E > V_0$ ).

O que deveríamos esperar nesse caso, se valessem as leis da Física Clássica? A resposta é simples: na ausência de atrito ou de outras forças, a partícula deveria simplesmente vencer a barreira de potencial e continuar seu movimento para a direita, até o infinito. Certamente, haveria uma redução em sua velocidade, que poderíamos calcular através da conservação da energia. Mas a partícula nunca poderia inverter o sentido de seu movimento, retornando para a esquerda, ou seja, a probabilidade de ser “refletida” seria nula. Veremos, mais uma vez, que na Mecânica Quântica as coisas são diferentes.

Como fizemos na aula anterior, vamos encontrar as soluções da equação de Schrödinger. Do lado esquerdo do degrau ( $x < 0$ ), a função de onda terá a mesma forma que no caso  $E < V_0$ :

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad x < 0 \quad (9.1)$$

em que, novamente,  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ . Já do lado direito do degrau ( $x > 0$ ), a equação de Schrödinger pode ser reescrita na forma

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k'^2 \psi(x) = 0, \quad x > 0, \quad (9.2)$$

com  $k' = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$ . A solução dessa equação será análoga à Equação (9.1), ou seja,

$$\psi(x) = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x}, \quad x > 0. \quad (9.3)$$

A interpretação física das funções de onda (9.1) e (9.3) é exatamente a mesma da aula passada. O termo  $Ae^{ikx}$  pode ser associado a uma onda se movimentando para a direita na região  $x < 0$ , correspondendo, portanto, à *onda incidente*. Já o termo  $Be^{-ikx}$  é uma onda que se propaga para a esquerda nessa mesma região ( $x < 0$ ), ou seja, é a onda refletida pelo degrau. Da mesma forma, o termo  $Ce^{ik'x}$ , que corresponde a uma onda se propagando para a direita em  $x > 0$ , pode ser considerado como uma *onda transmitida*. O termo restante  $De^{-ik'x}$  poderia ser associado a uma onda incidente adicional, vinda do lado direito. No entanto, a situação física mais comum é aquela em que as partículas incidem apenas a partir de um dos lados da barreira. Portanto, vamos descartar este termo, fazendo  $D = 0$  na Equação (9.3):

$$\psi(x) = Ce^{ik'x}, \quad x > 0. \quad (9.4)$$

Podemos encontrar relações entre as constantes  $A$ ,  $B$ ,  $C$  a partir das condições de continuidade de  $\psi(x)$  e da sua derivada, como fizemos na aula passada. A continuidade de  $\psi(x)$  em  $x = 0$  nos dá a relação:

$$A + B = C. \quad (9.5)$$

Já a continuidade de  $d\psi/dx$  implica:

$$ik(A - B) = ik'C. \quad (9.6)$$

De forma idêntica ao caso discutido na Aula 8, essas duas relações nos permitem determinar  $B$  e  $C$  em termos de  $A$ , que seria determinada pela condição de normalização. Assim, combinando as Equações (9.5) e (9.6), obtemos finalmente:

$$\frac{B}{A} = \frac{k - k'}{k + k'}, \quad \frac{C}{A} = \frac{2k}{k + k'}. \quad (9.7)$$

### ANÁLISE FÍSICA DA SOLUÇÃO E COEFICIENTES DE TRANSMISSÃO E REFLEXÃO

Vamos interpretar fisicamente a solução de nosso problema. Inicialmente, vamos calcular a densidade de probabilidade de encontrarmos a partícula do lado direito e do lado esquerdo do degrau.

#### ATIVIDADE



1. Obtenha a densidade de probabilidade  $p(x)$  de encontrar a partícula em uma posição  $x$ . Considere separadamente as regiões  $x < 0$  e  $x > 0$ . Por simplicidade, use  $k = 2k'$ . Faça um esboço do resultado obtido.

---



---



---

#### RESPOSTA COMENTADA

Usando  $k = 2k'$ , obtemos, pela Equação (9.7):

$$\frac{B}{A} = \frac{k - k'}{k + k'} = \frac{1}{3}; \quad \frac{C}{A} = \frac{2k}{k + k'} = \frac{4}{3}.$$

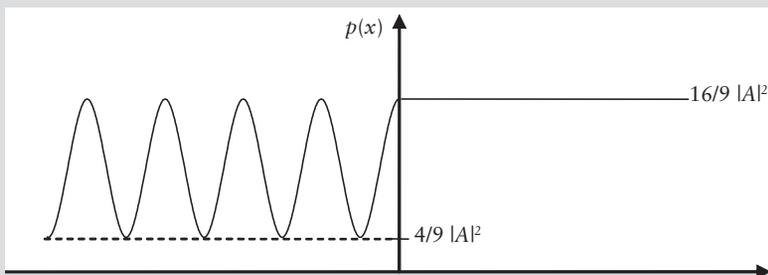
Substituindo esses resultados nas soluções (9.1) e (9.4), obtemos:

$$\begin{cases} \psi(x) = A \left( e^{ikx} + \frac{1}{3} e^{-ikx} \right), & x < 0 \\ \psi(x) = \frac{4A}{3} e^{ik'x}, & x > 0 \end{cases}$$

Calcularemos agora a densidade de probabilidade  $p(x) = \psi^*(x)\psi(x)$

$$\begin{cases} p(x) = |A|^2 \left( \frac{10}{9} + \frac{2}{3} \cos(2kx) \right), & x < 0 \\ p(x) = \frac{16|A|^2}{9}, & x > 0 \end{cases}$$

Podemos agora fazer um esboço desse resultado:



**Figura 9.2:** Densidade de probabilidade para uma partícula sob ação do degrau potencial, para o caso especial  $k = 2k'$ .

Perceba que a densidade de probabilidade é constante na região  $x > 0$ . Já na região  $x < 0$ , ela mostra oscilações resultantes da interferência das ondas incidente e refletida. No entanto, note que essas oscilações nunca levam a densidade de probabilidade a se anular nessa região. Isso ocorre porque as amplitudes das ondas incidente e refletida não são iguais.

Podemos também calcular as densidades de corrente de probabilidade, como fizemos na aula passada, obtendo

$$j = v_g (|A|^2 - |B|^2), \quad x < 0 \quad (9.8)$$

$$j = v'_g |C|^2, \quad x > 0$$

em que a velocidade de grupo  $v_g = \hbar k / m$ , do lado esquerdo, e  $v'_g = \hbar k' / m$  do lado direito.

### ATIVIDADE



2. Substituindo a Equação (9.7) na Equação (9.8), mostre que a densidade de corrente de probabilidade tem o mesmo valor para  $x < 0$  e  $x > 0$ .

---



---



---

### RESPOSTA COMENTADA

Fazendo a substituição sugerida, obtemos, para  $x < 0$ :

$$j = \frac{\hbar k}{m} |A|^2 \left[ 1 - \left( \frac{k - k'}{k + k'} \right)^2 \right] = \frac{4\hbar k^2 k'}{m(k + k')^2} |A|^2.$$

Já para  $x > 0$ , obtemos:  $j = \frac{\hbar k'}{m} |A|^2 \left( \frac{2k}{k+k'} \right)^2 = \frac{4\hbar k^2 k'}{m(k+k')^2} |A|^2$ ,  
como queríamos demonstrar.

O coeficiente de reflexão  $R$ , definido anteriormente como a razão entre as densidades de corrente de probabilidade das ondas refletida e incidente (veja a Equação (8.11) da Aula 8), terá, neste caso, o valor:

$$R = \frac{|A|^2}{|B|^2} = \frac{(k-k')^2}{(k+k')^2} = \frac{[1-\sqrt{1-V_0/E}]^2}{[1+\sqrt{1-V_0/E}]^2}. \quad (9.9)$$

Podemos também calcular o *coeficiente de transmissão*  $T$ , definido como a razão entre as densidades de corrente de probabilidade das ondas transmitida e incidente, ou seja,

$$T = \frac{v'_g |C|^2}{v_g |A|^2} = \frac{4kk'}{(k+k')^2} = \frac{4\sqrt{1-V_0/E}}{[1+\sqrt{1-V_0/E}]^2}. \quad (9.10)$$

### ATIVIDADE



3. Mostre que  $R + T = 1$ .

---



---



---

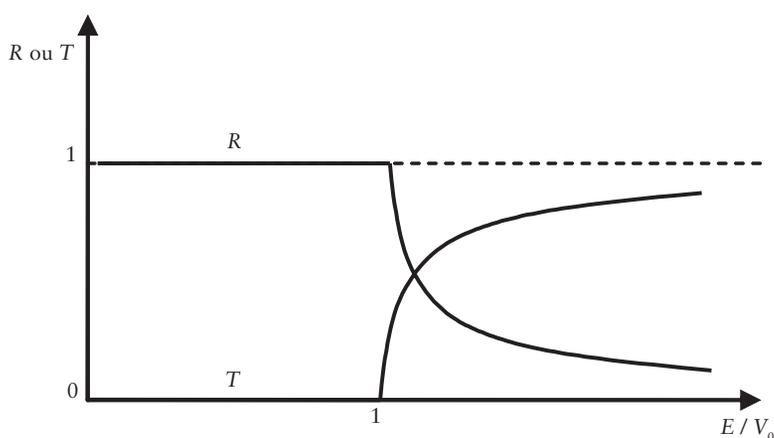
### RESPOSTA COMENTADA

Usando as Equações (9.9) e (9.10), obtemos:

$$\begin{aligned} R + T &= \frac{[1-\sqrt{1-V_0/E}]^2 + 4\sqrt{1-V_0/E}}{[1+\sqrt{1-V_0/E}]^2} \\ &= \frac{1 - 2\sqrt{1-V_0/E} + (1-V_0/E) + 4\sqrt{1-V_0/E}}{[1+\sqrt{1-V_0/E}]^2} = \frac{[1+\sqrt{1-V_0/E}]^2}{[1+\sqrt{1-V_0/E}]^2} = 1 \end{aligned}$$

A condição  $R + T = 1$  aparece também na ótica ondulatória clássica, no contexto da reflexão e da transmissão (refração) de uma onda luminosa pela interface entre dois meios. Na física clássica, essa condição expressa a conservação da energia, ou seja, não há acúmulo de energia na interface entre os dois meios, de modo que a intensidade da luz incidente deve ser a soma das intensidades refletida e transmitida. Já na Física Quântica, como estamos lidando com correntes de probabilidade, essa mesma condição expressa a conservação da probabilidade, ou seja, como não há aumento de probabilidade de se encontrar a partícula em  $x = 0$ , o fluxo de probabilidade incidente deve ser igual à soma dos fluxos refletido e transmitido.

Na **Figura 9.3**, mostramos o comportamento dos coeficientes de reflexão e transmissão como função de  $E/V_0$ . A região  $E/V_0 < 1$  corresponde à situação que estudamos na aula passada, em que a energia da partícula incidente é menor que a altura do degrau. Naquele caso, obtivemos reflexão completa, ou seja,  $R = 1$  e  $T = 0$ . Para  $E/V_0 > 1$ , o coeficiente de reflexão  $R$  diminui e o coeficiente de transmissão  $T$  aumenta. Isto ocorre gradativamente, de modo que, no limite de energias muito altas, o coeficiente de transmissão aproxima-se do valor assintótico igual a 1.



**Figura 9.3:** Coeficientes de reflexão e transmissão de uma partícula quântica que incide sobre um degrau de potencial, em função da energia da mesma.

O fato de o degrau de potencial refletir partículas para as quais  $E > V_0$ , que classicamente seriam transmitidas, é mais uma manifestação das propriedades ondulatórias das partículas quânticas. O fenômeno que acabamos de estudar é completamente análogo ao que acontece na ótica ondulatória clássica, da reflexão parcial da luz na fronteira de duas regiões com índice de refração diferente. No meio à esquerda o comprimento de onda de de Broglie é  $\lambda = 2\pi/k$ , enquanto à direita é  $\lambda' = 2\pi/k'$ . Portanto, a razão entre os índices de refração  $n'$  do meio à direita e  $n$  do meio à esquerda, definida como razão inversa entre os comprimentos de onda, será:

$$\frac{n'}{n} = \frac{\lambda}{\lambda'} = \frac{k'}{k} = \sqrt{1 - V_0/E} . \quad (9.11)$$

Usando essa definição em conjunto com a Equação (9.9), podemos obter uma expressão para o coeficiente de reflexão  $R$  em função dos índices de refração:

$$R = \left( \frac{n - n'}{n + n'} \right)^2 . \quad (9.12)$$

Essa é precisamente a expressão para a refletividade de uma onda eletromagnética com incidência normal sobre a interface entre dois meios de índices de refração diferentes, que você obteve em Física 4A (Equação (6.36) daquela disciplina). A refletividade clássica é a razão entre as intensidades da onda refletida e da onda incidente. Portanto, o resultado quântico coincide com o resultado da ótica ondulatória clássica, se fizermos, mais uma vez, a analogia entre “intensidade clássica” e “probabilidade quântica”.

É tentador explicar o fenômeno que acabamos de descrever da seguinte forma: “A partícula quântica é parcialmente refletida e parcialmente transmitida pelo degrau de potencial.” Afinal, na ótica ondulatória, dizemos algo semelhante com relação às ondas. No entanto, essa explicação não é muito precisa quando nos referimos ao fenômeno quântico; é preciso esclarecer que a partícula não se fragmenta quando incide no degrau. O que acontece é que, numa dada colisão da partícula com o degrau de potencial, ela pode ser refletida com probabilidade  $R$  e transmitida com probabilidade  $T$ . Sendo assim, em um único evento, não podemos medir os valores de  $R$  e  $T$ . Esses só poderiam ser determinados se realizássemos um número muito grande de colisões idênticas, de modo que  $R$  e  $T$  seriam proporcionais ao número de eventos de reflexão e transmissão, respectivamente.

## ATIVIDADE FINAL

Repita o cálculo do degrau de potencial, considerando agora a partícula vindo da região  $x > 0$ , em que  $V(x) = V_0$ , e se movendo no sentido decrescente de  $x$  em direção ao ponto  $x = 0$ , em que o potencial cai ao valor  $V(x) = 0$ . Mostre que os coeficientes de reflexão e transmissão são os mesmos (Eisberg-Resnick, Problema 2, Capítulo 6).

---



---



---

### RESPOSTA COMENTADA

Como o perfil de potencial não muda em relação ao caso que estudamos no início desta aula, a forma da equação de Schrödinger também permanece a mesma. Portanto, as soluções são também idênticas. A única diferença é que devemos agora considerar uma onda refletida na região  $x > 0$ , e haverá apenas uma onda propagando-se para a esquerda na região  $x < 0$ . Assim, a função de onda será:

$$\begin{cases} \psi(x) = Be^{-ikx}, & x < 0 \\ \psi(x) = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x}, & x > 0. \end{cases}$$

Aplicando as condições de continuidade da função de onda e de sua derivada em  $x = 0$ , obtemos:

$$B = C + D, \quad -kB = k'(C - D).$$

Assim, podemos relacionar as constantes  $B$ ,  $C$  e  $D$ :

$$\frac{C}{D} = \frac{k' - k}{k + k'}, \quad \frac{B}{D} = \frac{2k'}{k + k'}.$$

O coeficiente de reflexão será dado por:

$$R = \frac{|C|^2}{|D|^2} = \frac{(k' - k)^2}{(k + k')^2},$$

que é idêntico ao resultado que encontramos quando a partícula incide da esquerda. Como a relação  $R + T = 1$  deve ser obedecida, o coeficiente de transmissão também deve ser idêntico.

Há muitos *sites* na internet em que você pode visualizar as soluções da equação de Schrödinger do degrau de potencial e de outros potenciais em uma dimensão. Por exemplo, visite o *site*:

<http://perg.phys.ksu.edu/vqm/AVQM%20Website/WFEApplet.html>

Selecione o modo *Explorer* no botão superior esquerdo (*Mode*). Escolha o número de regiões do potencial (*Number of Regions*) igual a 2. Assim, você poderá selecionar os valores da energia potencial nas regiões  $x > 0$  e  $x < 0$ . Você pode também variar a energia total da partícula. Nos painéis inferiores, serão mostradas a função de onda e a densidade de probabilidade. Brinque um pouco com esse programa, explorando as diversas situações que discutimos nesta aula e na aula passada.

## RESUMO

Se uma partícula incide sobre um degrau de potencial com energia maior que a altura do degrau, ela pode ser refletida ou transmitida, com probabilidades dadas pelos coeficientes de reflexão e transmissão, respectivamente. Esses coeficientes são funções da razão entre a energia da partícula e a altura do degrau.

## INFORMAÇÕES SOBRE A PRÓXIMA AULA

Na próxima aula, vamos exercitar o que aprendemos nas Aulas 4 a 9 desta disciplina.

# AULA 10

## Exercícios

### Meta da aula

Aplicar o formalismo quântico estudado neste módulo à resolução de um conjunto de exercícios.

# objetivo

- aplicar os conhecimentos adquiridos nas Aulas 4 a 9 por meio da resolução de problemas diversos.

### Pré-requisitos

Os conteúdos das Aulas de 4 a 9 desta disciplina.

## INTRODUÇÃO

Nesta aula, faremos uma revisão das Aulas 4 a 9 do Módulo 2. Para tal, formulamos uma lista de exercícios na qual você poderá aplicar seus conhecimentos e rever alguns conceitos.

### 1. FUNÇÃO DE ONDA E EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER (AULA 4)

1.1. Mostre que se  $\Psi_1(x, t)$  e  $\Psi_2(x, t)$  são soluções da equação de Schrödinger dependente do tempo em uma dimensão,  $\Psi(x, t) = C_1\Psi_1(x, t) + C_2\Psi_2(x, t)$  (onde  $C_1$  e  $C_2$  são constantes arbitrárias) também é solução.

#### RESPOSTA COMENTADA

Se  $\Psi_1(x, t)$  e  $\Psi_2(x, t)$  são soluções da equação de Schrödinger, então:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_1(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_1(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t)\Psi_1(x, t) \quad \text{e}$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_2(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_2(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t)\Psi_2(x, t)$$

Se multiplicarmos a primeira equação por  $C_1$  e a segunda por  $C_2$ , e depois somarmos as duas equações, obtemos:

$$i\hbar \frac{\partial [C_1\Psi_1(x, t) + C_2\Psi_2(x, t)]}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 [C_1\Psi_1(x, t) + C_2\Psi_2(x, t)]}{\partial x^2}$$

$$+V(x, t)[C_1\Psi_1(x, t) + C_2\Psi_2(x, t)]$$

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

como queríamos demonstrar. Este resultado revela uma propriedade das equações diferenciais lineares: uma combinação linear de duas soluções é também uma solução.

## 2. OPERADORES MOMENTO E ENERGIA (AULA 5), PRINCÍPIO DA INCERTEZA (AULA 5) E O CASO ESTACIONÁRIO (AULA 6)

2.1. Um “estado ligado” é um estado quântico que está confinado a uma região do espaço, “ligado” a um poço de energia potencial. Veremos muitos exemplos de estados ligados nas próximas aulas. Matematicamente, podemos dizer que, para um estado ligado em torno de  $x = 0$  em uma dimensão,  $\lim_{x \rightarrow \infty} \psi(x) = \lim_{x \rightarrow -\infty} \psi(x) = 0$ .

(a) Mostre que, no caso estacionário em uma dimensão, a corrente de densidade de probabilidade é nula para um estado ligado, em qualquer ponto do espaço.

(b) Usando o resultado do item anterior, mostre que  $\langle p \rangle = 0$  para um estado ligado em uma dimensão. Dica: Use integração por partes.

### RESPOSTA COMENTADA

(a) Mostramos na Aula 6 que, em qualquer situação estacionária (potencial independente do tempo), a densidade de corrente de probabilidade é constante para todo  $x$ . Basta então olharmos para a definição desta quantidade, a saber:

$$j(x) = \frac{i\hbar}{2m} \left[ \psi(x) \frac{d\psi^*(x)}{dx} - \psi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx} \right],$$

para notarmos que, como  $\Psi(x)$  vai a zero no limite  $x \rightarrow \infty$ ,  $j(x)$  também deve ir a zero nesse limite. Assim, como  $j(x)$  deve ser constante em todo  $x$ , essa constante é nula.

Como  $j(x) = 0$  em todo o espaço, mesmo nos pontos em que  $\Psi(x)$  é não-nula, podemos escrever:

$$\psi(x) \frac{d\psi^*(x)}{dx} = \psi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx}.$$

Este resultado nos será útil no próximo item.

(b) Temos que  $\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \left( -i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi(x) dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx} dx.$

Integrando por partes:  $\langle p \rangle = -i\hbar \left[ \psi^*(x)\psi(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \frac{d\psi^*(x)}{dx} dx \right].$

Pelo resultado encontrado no item anterior, ou seja,  $\psi(x) \frac{d\psi^*(x)}{dx} = \psi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx}$ , podemos escrever:  $\langle p \rangle = -i\hbar \left[ \psi^*(x) \psi(x) \right]_{-\infty}^{\infty} - \langle p \rangle \Rightarrow$

$$\langle p \rangle = -\frac{i\hbar}{2} \left[ \psi^*(x) \psi(x) \right]_{-\infty}^{\infty} = 0.$$

Na última passagem usamos que  $\lim_{x \rightarrow \infty} \psi(x) = \lim_{x \rightarrow -\infty} \psi(x) = 0$ .

2.2. Na Atividade Final 4 da Aula 5, utilizamos o Princípio da Incerteza para estimar a energia cinética de partículas quânticas confinadas em determinadas regiões do espaço. Este procedimento é bastante útil quando queremos obter rapidamente uma estimativa da energia de uma partícula, sem termos que necessariamente resolver a equação de Schrödinger. Vamos utilizar novamente esse procedimento neste exercício, em que vamos usar o Princípio da Incerteza para *estimar* a energia do estado fundamental do oscilador harmônico.

(a) A energia do oscilador harmônico é dada por  $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$ , em que o primeiro termo é a energia cinética e o segundo é a energia potencial. Sabendo que  $\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$  e  $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$ , e que o estado fundamental é um estado ligado, usando o resultado do exercício 2.1 escreva uma expressão para o valor esperado da energia em termos das incertezas  $\Delta p$  e  $\Delta x$ . Note que, por simetria,  $\langle x \rangle = 0$ .

(b) Usando o Princípio da Incerteza e impondo que o estado deva ter incerteza mínima, elimine  $\Delta x$  da expressão obtida no item (a), obtendo uma expressão para  $\langle E \rangle$  que é apenas função de  $\Delta p$ .

(c) Minimize a expressão para  $\langle E \rangle$  obtida no item anterior em relação a  $\Delta p$  e encontre a energia estimada do estado fundamental.

**RESPOSTA COMENTADA**

(a) O valor esperado da energia será dado por:  $\langle E \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle x^2 \rangle$ .

Sabendo que  $\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$  e  $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$ , e usando  $\langle x \rangle = 0$

e  $\langle p \rangle = 0$ , obtemos  $\langle E \rangle = \frac{(\Delta p)^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 (\Delta x)^2$ .

(b) O Princípio da Incerteza diz que  $\Delta x \Delta p \geq \hbar / 2$ . Se impusermos incerteza mínima, temos a igualdade  $\Delta x \Delta p = \hbar / 2$ , de modo que podemos eliminar  $\Delta x$  da expressão para  $\langle E \rangle$ , obtendo  $\langle E \rangle = \frac{(\Delta p)^2}{2m} + \frac{m \hbar^2 \omega^2}{8(\Delta p)^2}$ .

(c) Minimizando, ou seja, impondo que  $\frac{d\langle E \rangle}{d(\Delta p)} = 0$ , obtemos:

$$\frac{\Delta p}{m} - \frac{m \hbar^2 \omega^2}{4(\Delta p)^3} = 0 \Rightarrow (\Delta p)^4 = \frac{m^2 \hbar^2 \omega^2}{4} \Rightarrow (\Delta p)^2 = \frac{m \hbar \omega}{2}$$

Substituindo esse valor na expressão para  $\langle E \rangle$ , obtemos finalmente nossa expressão para a energia do estado fundamental do oscilador harmônico simples:

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar \omega}{4} + \frac{\hbar \omega}{4} = \frac{\hbar \omega}{2}$$

Nesse caso, nossa estimativa foi perfeita! O valor correto da energia do estado fundamental do oscilador harmônico é precisamente  $\hbar \omega / 2$ , e encontramos este valor sem precisarmos resolver a equação de Schrödinger.

**2.3. Vimos na Aula 6 que uma função de onda  $\psi$  é autofunção do operador  $O$  com autovalor  $\lambda$  apenas se a igualdade  $O\psi(x) = \lambda\psi(x)$  for satisfeita. Se  $\psi$  não for autofunção do operador  $O$ , teremos  $O\psi(x) = f(x)\psi(x)$ , onde  $f(x)$  é uma função e não um número. De forma qualitativa, podemos associar  $f(x)$  ao valor local (ou seja, no ponto  $x$ ) da grandeza representada pelo operador  $O$ .**

(a) Em uma região do espaço, uma partícula de massa  $m$  possui uma função de onda dada por  $\psi(x) = Ae^{-x^2/a^2}$  e uma energia dada por  $E = \hbar^2 / ma^2$ , onde  $a$  é um comprimento. Determine, como função de  $x$ , a energia potencial  $V(x)$  e a energia cinética  $K(x)$  da partícula. Faça gráficos de  $V(x)$  e  $K(x)$ .

(b) Repita o item (a) para uma energia total nula.

**RESPOSTA COMENTADA**

(a) O operador energia cinética é  $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$ . Aplicando-o à função de

onda  $\psi(x) = Ae^{-x^2/a^2}$ , obtemos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \left( Ae^{-x^2/a^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{4x^2}{a^4} - \frac{2}{a^2} \right) \left( Ae^{-x^2/a^2} \right).$$

Desta forma, a energia cinética local é  $K(x) = \frac{\hbar^2}{ma^2} \left( 1 - \frac{2x^2}{a^2} \right)$ .

Repare que, para  $|x| > a/\sqrt{2}$ , temos energia cinética negativa. Isso define os pontos de retorno clássicos. De acordo com a física clássica, seria impossível que a partícula fosse encontrada além desses pontos de retorno. No entanto, como vimos também no caso do degrau de potencial, de acordo com a mecânica quântica, existe uma probabilidade não-nula de encontrarmos a partícula nessas regiões.

Podemos obter a energia potencial por  $V(x) = E - K(x) = \frac{2\hbar^2}{ma^4} x^2$ . Veja que temos aqui, mais uma vez, o oscilador harmônico simples. Os gráficos de  $V(x)$  e  $K(x)$  estão mostrados na **Figura 10.1.a**.

(b) A energia cinética será idêntica à do item (a),  $K(x) = \frac{\hbar^2}{ma^2} \left( 1 - \frac{2x^2}{a^2} \right)$ .

Agora temos  $E = 0$ , de modo que a energia potencial será dada por

$$V(x) = -K(x) = \frac{\hbar^2}{ma^2} \left( \frac{2x^2}{a^2} - 1 \right). \text{ Note que esta é uma energia potencial}$$

idêntica à do item (a), a menos de uma constante aditiva igual a  $-\frac{\hbar^2}{ma^2}$ .

Portanto, trata-se apenas de uma definição diferente do zero de energia, que não tem influência alguma na dinâmica da partícula. Os gráficos de  $V(x)$  e  $K(x)$  estão mostrados na **Figura 10.1.b**.

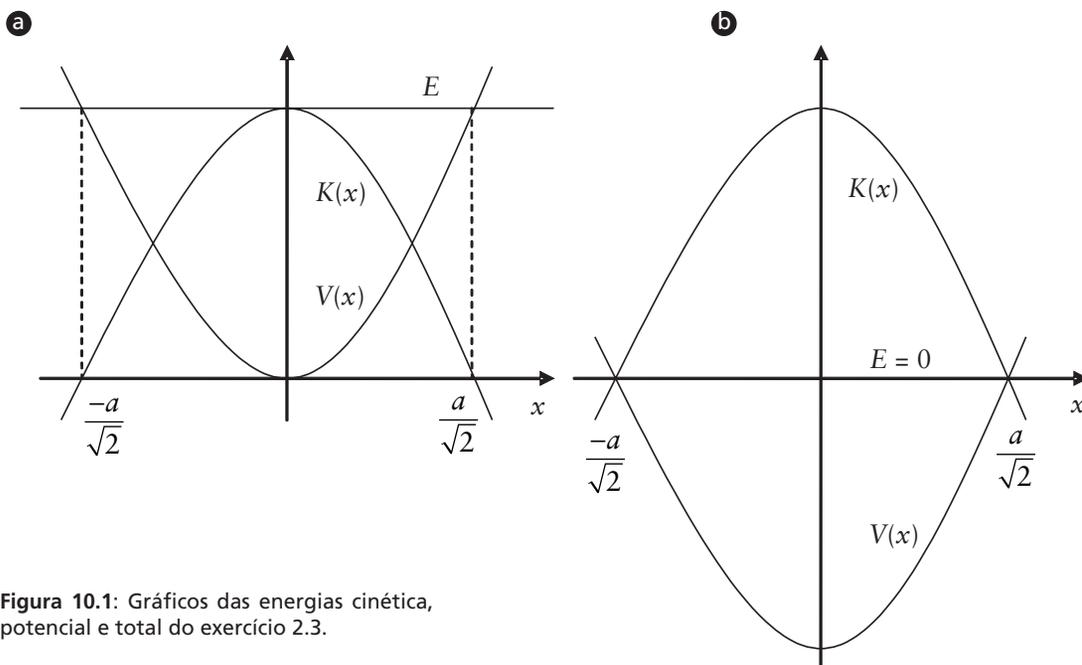


Figura 10.1: Gráficos das energias cinética, potencial e total do exercício 2.3.

2.4. A função de onda de uma partícula livre é dada por  $\psi(x) = A \text{sen}(kx)$ .

(a) Encontre o valor de  $A$  que normaliza a função de onda em uma caixa de comprimento  $L$ .

(b) Calcule o valor esperado do momento da partícula.

(c) Calcule a energia total da partícula.

**RESPOSTA COMENTADA**

(a) Para achar o valor de  $A$ , impõe-se a condição de normalização:

$$\int_{-L/2}^{L/2} |A|^2 \text{sen}^2(kx) dx = 1 \Rightarrow |A|^2 \frac{L}{2} = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}}.$$

(b) O valor esperado do momento é dado por:

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \int_{-L/2}^{L/2} \psi^*(x) \left( -i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi(x) dx = -i\hbar \int_{-L/2}^{L/2} A^* \text{sen}(kx) k A \cos(kx) dx \\ &= -ki\hbar |A|^2 \int_{-L}^{L/2} \text{sen}(kx) \cos(kx) dx = 0 \end{aligned}$$

Podemos entender esse resultado da seguinte forma. A função de onda pode ser escrita como  $\psi(x) = A \sin(kx) = \frac{A}{2i} (e^{ikx} - e^{-ikx})$ . Veja que a

função de onda é uma combinação linear de ondas planas propagando-se para a direita e para a esquerda, com a mesma amplitude. Desta forma, o momento linear efetivo é nulo.

(c) Como se trata de uma partícula livre, a energia total é igual a energia cinética. Seu valor esperado é:

$$\begin{aligned} \langle K \rangle &= \int_{-L/2}^{L/2} \psi^*(x) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \psi(x) dx = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-L/2}^{L/2} A^* \sin(kx) k^2 A \sin(kx) dx \\ &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} |A|^2 \int_{-L/2}^{L/2} \sin^2(kx) dx = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \end{aligned}$$

### 3. PARTÍCULA LIVRE (AULA 7)

3.1 (a) Mostre que a função de onda  $\Psi(x, t) = Ae^{ik(x-vt)}$  satisfaz a equação de Schrödinger dependente do tempo.

3.1 (b) Mostre que a função de onda  $\Psi(x, t) = Ae^{k(x-vt)}$  não satisfaz a equação de Schrödinger dependente do tempo.

#### RESPOSTA COMENTADA

(a) Vamos substituir a função de onda na equação de Schrödinger e tomar as derivadas:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial [Ae^{ik(x-vt)}]}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 [Ae^{ik(x-vt)}]}{\partial x^2} + V(x, t) [Ae^{ik(x-vt)}] \\ \Rightarrow i\hbar(-ikv) [Ae^{ik(x-vt)}] &= -\frac{\hbar^2}{2m} (-k^2) [Ae^{ik(x-vt)}] + V(x, t) [Ae^{ik(x-vt)}]. \end{aligned}$$

Cancelando o fator comum  $[Ae^{ik(x-vt)}]$ , chegamos à seguinte igualdade:

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

Essa igualdade só é possível, para todo  $x$  e  $t$ , se o potencial  $V(x, t)$  for uma constante real. Esse é o caso de uma partícula livre. Podemos, por simplicidade, supor que essa constante é nula. Assim, fica demonstrado que  $\Psi(x, t) = Ae^{ik(x-vt)}$  satisfaz a equação de Schrödinger dependente do tempo, desde que seja válida a relação:

$$\hbar kv = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow v = \frac{\hbar k}{2m},$$

que é precisamente a expressão obtida para a velocidade de fase na Atividade 2 da Aula 7.

(b) Substituindo novamente na equação de Schrödinger e executando os mesmos passos do item (a), chegamos desta vez à seguinte igualdade:

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

Só haveria uma maneira de satisfazer a igualdade na equação anterior, se a energia potencial fosse uma constante complexa. Como a energia potencial tem de ser real, a igualdade não pode ser satisfeita e, portanto a função  $\Psi(x, t) = Ae^{k(x-vt)}$  não satisfaz a equação de Schrödinger.

Vale a pena chamar a atenção sobre as diferenças entre a equação de Schrödinger e a equação de onda clássica:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$$

A função  $\Psi(x, t) = Ae^{k(x-vt)}$  é uma solução da equação de onda, como você pode facilmente demonstrar, mas não da equação de Schrödinger!

**3.2. (a) Mostre que a função de onda  $\Psi(x, t) = A \sin(kx - \omega t)$  não satisfaz a equação de Schrödinger dependente do tempo.**

**(b) Mostre que a função de onda  $\Psi(x, t) = A[\cos(kx - \omega t) + i \sin(kx - \omega t)]$  satisfaz a equação de Schrödinger dependente do tempo.**

**RESPOSTA COMENTADA**

(a) Procedendo de forma idêntica à que fizemos no exercício anterior, chegamos à seguinte igualdade:

$$-i\hbar\omega\cos(kx - \omega t) = \left[ \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(x, t) \right] \sin(kx - \omega t)$$

Mais uma vez, é impossível satisfazer a igualdade dessa equação com um potencial real, de modo que a função proposta não satisfaz a equação de Schrödinger. E vale aqui também o comentário que fizemos no item (b) do exercício anterior:  $\Psi(x, t) = A \sin(kx - \omega t)$  seria uma solução perfeitamente válida da equação de onda.

(b) Poderíamos resolver este item da mesma forma que o anterior, mas vamos proceder de forma diferente. A solução geral da equação de Schrödinger para a partícula livre foi escrita na Equação (7.8) da Aula 7:

$$\Psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} + Be^{-i(kx + \omega t)}$$

Vamos mostrar que a solução proposta  $\Psi(x, t) = A[\cos(kx - \omega t) + i\sin(kx - \omega t)]$  pode ser escrita na forma  $\Psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} + Be^{-i(kx + \omega t)}$ , se escolhermos de forma conveniente as constantes complexas  $A$  e  $B$ . Para tanto, basta notarmos que  $\cos(kx - \omega t) + i\sin(kx - \omega t) = e^{i(kx - \omega t)}$ , de modo que a solução proposta nada mais é do que  $\Psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$ . Ou seja, é um caso particular (correspondendo a  $B = 0$ ), mas perfeitamente válido, da solução geral.

**4. DEGRAU DE POTENCIAL (AULAS 8 E 9)**

**4.1.** Uma partícula livre de massa  $m$  e número de onda  $k_1$  está viajando para a direita. No ponto  $x = 0$ , o potencial muda bruscamente de 0 para  $V_0$  e permanece com este valor para todos os valores positivos de  $x$ . Se a energia inicial da partícula é  $E = \hbar^2 k_1^2 / 2m = 2V_0$ :

- Calcule o número de onda  $k_2$  na região  $x > 0$  como função de  $k_1$ .
- Calcule o coeficiente de reflexão  $R$  do degrau de potencial.
- Qual é o valor do coeficiente de transmissão  $T$ ? Para cada milhão de partículas com número de onda  $k_1$  que incidem no degrau de potencial, quantas continuam a viajar no sentido positivo do eixo  $x$ ? Como se compara este valor com a previsão clássica?

**RESPOSTA COMENTADA**

(a) Trata-se do caso  $E > V_0$  estudado na Aula 9. O número de onda  $k_2$  é dado por  $k_2 = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$ . Usando  $E = \hbar^2 k_1^2 / 2m = 2V_0$ ,

temos  $k_2 = \sqrt{2mV_0}/\hbar = k_1 / \sqrt{2}$ .

(b) Pela Equação (9.9) da Aula 9, temos:

$$R = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{(1 - 1/\sqrt{2})^2}{(1 + 1/\sqrt{2})^2} \approx 2,9\%$$

(c) Como  $T + R = 1$ , então  $T \approx 97,1\%$ . Assim, de cada milhão de partículas que incidem sobre o degrau, 971.000 continuam a viajar no mesmo sentido, as demais são refletidas. De acordo com a mecânica clássica, todas as partículas passariam pelo degrau.

**4.2. Repita o exercício anterior, mas agora o degrau de potencial é definido por  $V = 0$  para  $x < 0$  e  $V = -V_0$  para  $x > 0$ . Como no exercício anterior, a energia total da partícula vale  $E = \hbar^2 k_1^2 / 2m = 2V_0$ . Ou seja, ao passar pelo degrau, a velocidade da partícula aumenta em vez de diminuir. Responda às questões (a), (b) e (c) do exercício anterior, discutindo os resultados obtidos.**

**RESPOSTA COMENTADA**

(a) O número de onda  $k_2$  é dado agora por  $k_2 = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar$ .

Usando  $E = \hbar^2 k_1^2 / 2m = 2V_0$ , temos  $k_2 = \sqrt{6mV_0}/\hbar = \sqrt{\frac{3}{2}}k_1$ .

(b) Da mesma forma que no exercício anterior, temos:

$$R = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{(\sqrt{2} - \sqrt{3})^2}{(\sqrt{2} + \sqrt{3})^2} \approx 1,0\%$$

(c) Novamente, como  $T + R = 1$ , então  $T \approx 99,0\%$ . Assim, de cada milhão de partículas que incidem sobre o degrau, 990.000 continuam a viajar no mesmo sentido, as demais são refletidas. Novamente, de acordo com a mecânica clássica, todas as partículas passariam pelo degrau.

4.3. Um feixe de prótons com uma energia cinética de 40 MeV incide sobre um degrau de potencial de 30 MeV.

- (a) Que fração do feixe é refletida?
- (b) Que fração do feixe é transmitida?
- (c) Como se modificam os resultados encontrados em (a) e (b), se a energia dos prótons for de 20 MeV?
- (d) Como se modificam os resultados encontrados em (a), (b), (c), se as partículas forem elétrons.

**RESPOSTA COMENTADA**

(a) Trata-se novamente do caso  $E > V_0$ , discutido na Aula 9. Pela Equação (9.9) daquela aula, temos:

$$R = \frac{\left[1 - \sqrt{1 - V_0/E}\right]^2}{\left[1 + \sqrt{1 - V_0/E}\right]^2} = \frac{\left[1 - \sqrt{1/4}\right]^2}{\left[1 + \sqrt{1/4}\right]^2} = \frac{1}{9}$$

(b)  $T = 1 - R = 8/9$ .

(c) Temos agora o caso  $E < V_0$ , tratado na Aula 8. Nesse caso, o coeficiente de reflexão é 1 e o de transmissão é 0 (veja a Equação (8.11)).

(d) Nada se modifica, pois os coeficientes de transmissão e reflexão do degrau de potencial não dependem da massa da partícula.

**RESUMO**

Exercitamos o que aprendemos nas Aulas 4 a 9 do Módulo 2 desta disciplina.

**INFORMAÇÕES SOBRE A PRÓXIMA AULA**

Na próxima aula, iniciaremos nosso estudo sobre a barreira de potencial e conheceremos um dos efeitos mais interessantes da Física: o efeito túnel.



## Introdução à Mecânica Quântica

---

Referências

## Aula 2

---

FEYNMAN, Richard P.; LEIGHTON, Robert B.; SANDS, Matthew. *Lectures on Physics*. Massachusetts: Addison-Wesley, 1965. v. 2, Cap.1.

RODGERS, Peter. *The double-slit experiment*. Physics World, p. 15, set. 2002.

## Aula 3

---

FEYNMAN, Richard P.; LEIGHTON, Robert B.; SANDS, Matthew; *Lectures on Physics*. Massachusetts: Addison-Wesley, 1965. Volume III, Capítulo 1.

## Aulas 4, 5, 6, 7, 8 e 9

---

EISBERG, Robert; RESNICK, Robert; *Física Quântica – Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas*. 4ª Edição. Editora Campus Ltda., Rio de Janeiro, 1986.





