

# 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 postulada. Não é possível chegar à Física Quântica a partir da Física Clássica apenas por uma argumentação lógica!

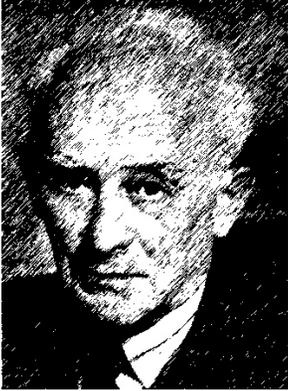


**Figura 4.1:** O físico austríaco Erwin Schrödinger (1887-1961), que, por seu trabalho de 1926, no qual propôs a equação que ganhou seu nome para a descrição da dinâmica das partículas quânticas, foi agraciado, juntamente com o físico inglês Paul Dirac, com o Prêmio Nobel de Física de 1933.

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:

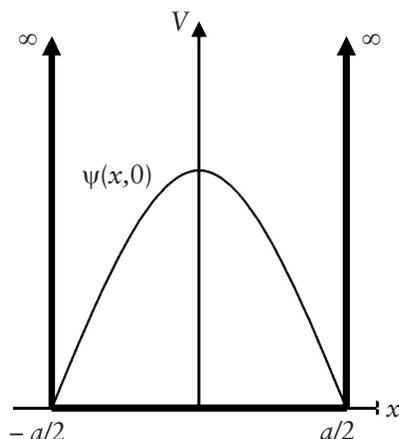
$$P[a,b] = \int_a^b |\Psi(x,t)|^2 dx. \quad (4.4)$$

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.