AULA 7

A partícula livre

Meta da aula

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

objetivos

- 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:

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

que pode ser reescrita como:

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

em que o valor de k é dado por:

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

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: sen(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:

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

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, todos 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 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:

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

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

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 $x \to +\infty$ ou $x \to -\infty$, 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,

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

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

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

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

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

em que $v = \dfrac{E}{\hbar k}$ 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 superposicão 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:

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

Desta forma, fica claro que k é o vetor de onda, e ω é a frequência angular da onda. Lembramos, dos nossos estudos de Física 2B, que o vetor de onda se relaciona ao comprimento de onda λ 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, $E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$*, na expressão para a velocidade de fase,* $v = \dfrac{E}{\hbar k}$ *, 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* $\omega = \dfrac{\hbar k^2}{2m}$ *. 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:

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

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:

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

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, $Be^{-ik(x+vt)}$. Nesse caso, $p = |B|^2$, e $j = -v_g p$. Assim, podemos considerar que a função de onda $Be^{-ik(x+vt)}$ 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:

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

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:*

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

$$= \frac{i\hbar}{2m}\left[-2Ak\cos kx\ \mathrm{sen}kx + 2Ak\cos kx\ \mathrm{sen}kx\right] = 0.$$

Esse resultado pode ser entendido facilmente. A corrente de probabilidade associada à onda plana $Ae^{ik(x-vt)}$ se propagando para a direita, $v_g|A|^2$, é cancelada por aquela associada à onda $Ae^{-ik(x+vt)}$ 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

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

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 conseqüência 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:

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

$$= \frac{i\hbar}{2m}\left\{\left[Ae^{i(kx-\omega t)} + Be^{-i(kx+\omega t)}\right]\frac{\partial}{\partial x}\left[A^*e^{-i(kx-\omega t)} + B^*e^{i(kx+\omega t)}\right] - \left[A^*e^{-i(kx-\omega t)} + B^*e^{i(kx+\omega t)}\right]\frac{\partial}{\partial x}\left[Ae^{i(kx-\omega t)} + Be^{-i(kx+\omega t)}\right]\right\}$$

$$= \frac{\hbar k}{2m}\left\{\left[Ae^{i(kx-\omega t)} + Be^{-i(kx+\omega t)}\right]\left[A^*e^{-i(kx-\omega t)} - B^*e^{i(kx+\omega t)}\right] - \left[A^*e^{-i(kx-\omega t)} + B^*e^{i(kx+\omega t)}\right]\left[-Ae^{i(kx-\omega t)} + Be^{-i(kx+\omega t)}\right]\right\}$$

$$= \frac{\hbar k}{2m}\left\{|A|^2 - |B|^2 - AB^*e^{ikx} + BA^*e^{-ikx} + |A|^2 - |B|^2 - A^*Be^{-ikx} + B^*Ae^{ikx}\right\} = \frac{\hbar k}{m}\left[|A|^2 - |B|^2\right]$$

$$= v_g\left[|A|^2 - |B|^2\right].$$

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:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]X(x)Y(y)Z(z)=EX(x)Y(y)Z(z)\Rightarrow$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[YZ\frac{d^2X}{dx^2}+XZ\frac{d^2Y}{dy^2}+XY\frac{d^2Z}{dz^2}\right]=E\,XYZ.$$

Dividindo ambos os lados por XYZ, obtemos :

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

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:

$$\begin{cases}\dfrac{1}{X}\dfrac{\mathrm{d}^2X}{\mathrm{d}x^2}=-k_x^2\\[2ex]\dfrac{1}{Y}\dfrac{d^2Y}{dy^2}=-k_y^2\\[2ex]\dfrac{1}{Z}\dfrac{d^2Z}{dz^2}=-k_z^2\end{cases}\Rightarrow\begin{cases}\dfrac{d^2X}{dx^2}+k_x^2X=0\\[2ex]\dfrac{d^2Y}{dy^2}+k_y^2Y=0\\[2ex]\dfrac{d^2Z}{dz^2}+k_z^2Z=0\end{cases}$$

em que $E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2\right)$*. 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!