

Elementos de mecânica quântica da partícula na interpretação da onda piloto

(*Elements of single-particle quantum mechanics in the pilot-wave interpretation*)

Michel E.M. Betz¹

Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil
Recebido em 2/6/14; Aceito em 12/7/14; Publicado em 23/10/2014

Apresenta-se uma introdução elementar à interpretação da mecânica quântica conhecida como “interpretação da onda piloto”, inicialmente proposta por Louis de Broglie e posteriormente elaborada por David Bohm. Com o objetivo de adequar o nível do tratamento a um primeiro curso de mecânica quântica, considera-se apenas o caso de uma única partícula, ignorando aspectos associados ao spin. Os assuntos tradicionalmente abordados em tal curso, quais sejam, a partícula livre, a partícula ligada, a reflexão e a transmissão por uma barreira de potencial, o átomo de hidrogênio e o experimento de duas fendas, são discutidos do ponto de vista dessa interpretação, focando em especial a visualização das trajetórias da partícula.

Palavras-chave: interpretação da mecânica quântica, onda piloto, partícula única.

An elementary introduction to the interpretation of quantum mechanics known as “pilot-wave interpretation”, initially proposed by Louis de Broglie and further elaborated by David Bohm, is presented. With the aim of adapting the treatment level to a first quantum-mechanics course, only the case of a single particle is considered, disregarding aspects associated with spin. The topics usually covered in such a course, namely the free particle, the bound particle, reflection by and transmission through a potential barrier, the hydrogen atom, and the double-slit experiment, are discussed from the viewpoint of the interpretation in question, focusing in particular on the graphic visualization of particle trajectories.

Keywords: interpretation of quantum mechanics, pilot wave, single particle.

1. Introdução

No ensino-aprendizagem da mecânica quântica, não basta analisar os fatos empíricos e desenvolver o formalismo matemático. Ainda é preciso deter-se à questão da interpretação: o que as grandezas presentes nas equações representam? Como elas se relacionam com os dados que podem ser extraídos dos experimentos? Que visão do mundo físico pode-se construir a partir daí? Estas questões têm sido debatidas entre físicos e filósofos desde o surgimento da teoria e vêm suscitando um interesse crescente ultimamente, tanto no meio acadêmico dos especialistas como até no público leigo.

A abordagem tradicionalmente adotada nas disciplinas de graduação [1, 2] começa com a discussão, a nível essencialmente qualitativo, de alguns grandes avanços ocorridos nas duas primeiras décadas do século XX, que formaram o alicerce para o desenvolvimento da teoria quântica na terceira década desse século. É então introduzida a equação de Schrödinger, apresentada como a

equação fundamental da teoria (numa abordagem não-relativística). A conexão entre uma solução da equação – uma onda complexa – e o mundo do laboratório é estabelecida pela conhecida *regra de Born*: o módulo quadrado da função de onda fornece a probabilidade de observar a partícula numa dada região. Um professor preocupado com a clareza conceitual normalmente enfatizará que a posição se torna bem definida apenas ao ser medida, e que não se deve imaginar uma partícula possuindo uma posição bem definida, embora desconhecida, a cada instante. Este quadro conceitual de difícil compreensão intuitiva constituir-se-á na *dualidade onda-partícula* [3] segundo a qual um elétron, por exemplo, será descrito ora como uma onda, ora como uma partícula. “O elétron se propaga como uma onda mas é detectado como uma partícula” é uma afirmação encontrada em textos didáticos [4].

A linearidade da equação de propagação da onda levará naturalmente a enfatizar a importância do princípio de superposição e a analisar os fenômenos de interferência decorrentes. O experimento da fenda du-

¹E-mail: betz@if.ufrgs.br.

pla será frequentemente utilizado como ilustração [5], ressaltando-se que a interferência entre as ondas difratadas pelas duas fendas resulta em franjas na distribuição estatística de impactos da partícula sobre a tela de observação.

A transição, no que diz respeito ao formalismo matemático [6], do ponto de vista ondulatório para o aspecto corpuscular no ato de observação ou medida, possivelmente será caracterizada como “colapso do pacote de ondas”, usualmente com pouca elaboração das dificuldades conceituais associadas.

No intuito de evitar confundir desnecessariamente o aprendiz iniciante ou, em certos casos talvez, por falta de conhecimento das alternativas, o professor provavelmente apresentará o conjunto de noções acima resumidas como *a* interpretação da mecânica quântica, invocando os nomes de Niels Bohr, Max Born, Wolfgang Pauli, Werner Heisenberg, entre outros, talvez até usando a expressão *Interpretação de Copenhague* [7], mas sem elaborar sobre a possibilidade de existirem outras interpretações. É plausível que, para a maioria dos físicos que lidam com mecânica quântica, tanto na pesquisa como no ensino, baste aceitar a interpretação ortodoxa e seguir em frente. Porém, em certas áreas de grande interesse atualmente, tais como a cosmologia [8], a quantização da gravitação [9] e a computação quântica [10], as questões de interpretação revelam-se incontornáveis. É de se esperar que novos desenvolvimentos na interpretação da teoria fundamental do mundo físico, induzidos por pesquisa nestas áreas, tenham impacto na filosofia da ciência e na epistemologia [11].

Há na literatura inúmeras propostas de interpretação da mecânica quântica. Deixando de lado aquelas cuja inconsistência conceitual ou incompatibilidade com os fatos já foram demonstradas, e sem procurar distinguir entre aquelas que diferem apenas nos detalhes, pode-se listar como segue as principais alternativas [12] à interpretação de Copenhague:

- A *Interpretação dos Universos Múltiplos* foi inicialmente proposta por Everett [13] e é frequentemente utilizada em trabalhos de cosmologia teórica. Nela, todos os possíveis resultados de uma medida estão realizados, mas em universos paralelos, entre os quais não há comunicação. Veja [14] para uma discussão acessível de um exemplo, e referências [15, 16] para mais informação.
- A *Interpretação das Histórias Consistentes* [17, 18], também chamadas *Histórias Descoerentes*, baseia-se em critérios que permitem analisar as probabilidades de sequências de eventos, evitando referência ao processo de medida. É também útil em cosmologia e oferece uma perspectiva interessante sobre o limite clássico [19].

- A *Interpretação Modal*² [20], bastante discutida entre filósofos da física, enfatiza a distinção entre *estado dinâmico* e *estado de propriedade* na descrição de um sistema quântico. O estado dinâmico fornece informação, de cunho probabilístico, sobre possíveis resultados de medidas, ao passo que um estado de propriedade atribui um valor definido a uma certa propriedade física.
- A *Interpretação da Onda Piloto*, proposta por de Broglie [21] no princípio da mecânica quântica e retomada por Bohm [22] um quarto de século mais tarde, sob a perspectiva de *Teoria do Potencial Quântico*, afirma que a função de onda de Schrödinger atua como um guia que conduz a partícula cuja posição, mesmo que seja inobservável, está bem definida a cada instante.

Evidentemente, não seria possível entrar aqui em mais detalhes a respeito de cada uma destas interpretações, ainda mais considerando que algumas delas exigem, no seu desenvolvimento, o uso, em nível avançado, do formalismo abstrato da mecânica quântica. O presente trabalho pretende focar apenas a última das interpretações listadas acima e, ademais, limitar-se à consideração dos sistemas físicos os mais simples, que consistem numa única partícula sem spin. Como fatores motivadores deste empreendimento, pode-se destacar os seguintes:

- Apesar de ser objeto de estudo atual por parte de um conjunto significativo de pesquisadores, a interpretação da onda piloto parece ser desconhecida por boa parcela da comunidade dos físicos.
- A interpretação pode ser introduzida de maneira bastante natural no contexto da mecânica ondulatória elementar.
- Em especial na perspectiva da teoria do potencial quântico, a interpretação faculta uma comparação valiosa com a mecânica newtoniana.
- Por explicar a natureza probabilística da física quântica através de considerações semelhantes com aquelas usualmente apresentadas no desenvolvimento da mecânica estatística clássica, mas bastante diversas daquelas encontradas em textos baseados na interpretação ortodoxa da mecânica quântica, a interpretação da onda piloto propicia uma discussão contrastada das noções de probabilidade epistêmica e não-epistêmica.
- Por autorizar a conceituação da existência simultânea da onda e da partícula, a interpretação da onda piloto permite uma visualização gráfica mais rica e concreta dos processos quânticos, um

²O adjetivo *modal* refere-se a “modalidades lógicas”, tais como possibilidade e necessidade.

aspecto que poderia se revelar bastante proveitoso no desenvolvimento de animações de cunho didático.

O enfoque pretendido aqui é pedagógico, mais que investigativo, embora resultados de cálculos destinados à compreensão e à visualização das possíveis trajetórias da partícula nos sistemas considerados serão apresentados em diversos gráficos. Para discussões mais abrangentes e completas da interpretação da onda piloto, recomenda-se consultar os livros de Holland [23] e de Dürr e Teufel [24].

A seção 2 do presente artigo consiste numa breve revisão da apresentação usual da mecânica quântica da partícula sem spin, focando em especial a interpretação de Born da função de onda e a equação de conservação local da probabilidade. A seção 3 introduz a interpretação da função de onda como onda piloto que determina o campo de velocidade da partícula. Na seção 4, discute-se a perspectiva adotada por Bohm, na qual a função de onda determina um potencial quântico que, somado ao potencial clássico, permite formular a mecânica quântica no molde da mecânica newtoniana. Nas seções 5-8, sistemas tradicionalmente discutidos num curso introdutório são analisados do ponto de vista da interpretação de Bohm e de Broglie: estados ligados, em especial a partícula numa caixa e o átomo de hidrogênio na seção 5, a partícula livre na seção 6, os fenômenos de reflexão e transmissão por uma barreira de potencial na seção 7, e o experimento da fenda dupla na seção 8. A seção 9 apresenta as conclusões do estudo e alguns comentários finais.

2. Equação de Schrödinger

No desenvolvimento de um curso de introdução à mecânica quântica, argumentos diversos podem ser utilizados para motivar a equação fundamental da teoria, para um sistema constituído de uma partícula de massa m em movimento não-relativístico num potencial $V(\mathbf{r})$, que será suposto aqui independente do tempo. Esta equação, a equação de Schrödinger [2], é uma equação a derivadas parciais que descreve a propagação de uma função de onda complexa $\Psi(\mathbf{r}, t)$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}, t), \quad (1)$$

onde $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ é o operador Laplaciano e $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, sendo h a constante de Planck. Na forma acima, a equação descreve uma partícula sem spin, mas pode também ser utilizada no caso de uma partícula com spin, um elétron por exemplo, desde que a interação especificada pelo potencial $V(\mathbf{r})$ seja independente do spin.

A evolução da função de onda estipulada pela Eq. (1) é determinista, ou seja, a função de onda num instante t qualquer pode ser calculada sabendo-se a função de onda $\Psi(\mathbf{r}, t_0)$ num instante inicial t_0 , já que trata-se de uma equação diferencial de primeira ordem no tempo. Porém, o significado físico da função de onda é de natureza estatística. Na interpretação usual da mecânica quântica, inicialmente proposta por Max Born [25], a norma quadrada da função de onda fornece a densidade de probabilidade de encontrar a partícula numa certa região, numa medida de posição. Ou seja, a probabilidade de observar a partícula num pequeno volume d^3r localizado na posição \mathbf{r} é dada por $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r$. Já que a partícula necessariamente se encontra em algum lugar, esta interpretação requer que a função de onda satisfaça a condição de normalização

$$\int |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r = 1. \quad (2)$$

Como a equação de Schrödinger é linear, é sempre possível normalizar a função de onda.

Conforme demonstrado nos livros textos [2], desde que o potencial seja uma função real, a equação de Schrödinger implica na *equação de continuidade*

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (3)$$

onde

$$\rho(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (4)$$

e³

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{m} \Im[\Psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi(\mathbf{r}, t)]. \quad (5)$$

Já que a regra de Born atribui à função $\rho(\mathbf{r}, t)$ o significado de densidade de probabilidade, a Eq. (3) pode ser interpretada como a expressão da conservação local da probabilidade e a quantidade $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ identificada como a densidade de corrente de probabilidade.

Deve-se enfatizar que, na interpretação padrão, probabilidades referem-se a resultados de medidas de posição; não faz sentido falar da evolução (determinista ou não) da posição da partícula entre observações.

3. Interpretação da onda piloto

Se a equação de continuidade (3) fosse associada à convecção de um fluido, existiria, entre a densidade de corrente \mathbf{j} e a densidade⁴ ρ , a relação

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r}, t), \quad (6)$$

sendo $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ o campo de velocidade do fluido. A mecânica bohmiana consiste em adotar a relação (6),

³A notação \Im é usada aqui para indicar a parte imaginária de um número complexo.

⁴Naturalmente, neste caso, não se trataria de densidades de probabilidade mas, por exemplo, de massa.

junto com as expressões (4) e (5), levando então a calcular o campo de velocidade a partir da função de onda, pela equação

$$\begin{aligned} \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) &= \frac{\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)}{\rho(\mathbf{r}, t)} = \frac{\hbar}{m} \frac{\Im[\Psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi(\mathbf{r}, t)]}{|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2} \\ &= \frac{\hbar}{m} \Im \frac{\nabla \Psi(\mathbf{r}, t)}{\Psi(\mathbf{r}, t)}. \end{aligned} \quad (7)$$

É importante salientar que, apesar da analogia formal, o sistema quântico não está sendo conceituado como um fluido, e sim como uma única partícula. A expressão acima estipula simplesmente qual será a velocidade da partícula, caso esta se encontrar no ponto \mathbf{r} no instante t . Se denotarmos por $\mathbf{R}(t)$ a posição da partícula, esta posição evoluirá de acordo com a equação

$$\frac{d}{dt} \mathbf{R}(t) = \mathbf{v}(\mathbf{R}, t). \quad (8)$$

Dada a posição da partícula no instante inicial t_0 , esta equação permite calcular a posição num tempo t qualquer desde, é claro, que a equação de Schrödinger já tenha sido resolvida para obter a função de onda e, a partir desta, calcular o campo de velocidade.

Claramente, para que esta teoria seja equivalente à mecânica quântica usual, é necessário supor que a posição inicial não é conhecida com precisão, mas que a probabilidade de a partícula estar num volume infinitesimal d^3R localizado em \mathbf{R} é dada por $|\Psi(\mathbf{R}, t_0)|^2 d^3R$. Segue então que a probabilidade de a partícula estar, num instante t qualquer, dentro de um volume infinitesimal d^3R localizado em \mathbf{R} é dada por $|\Psi(\mathbf{R}, t)|^2 d^3R$. A suposição de que a distribuição probabilística de posição inicial da partícula está relacionada com a função de onda pela regra de Born é conhecida como hipótese de *tipicidade*. Apenas se ela estiver satisfeita, haverá equivalência fenomenológica entre a *mecânica bohmiana* assim formulada e a mecânica quântica usual. Bohm argumentou que, mesmo se a tipicidade for inicialmente violada num dado sistema quântico, ocorrerá uma rápida evolução para um estado de *equilíbrio quântico* no qual ela será satisfeita. Trabalhos que procuram identificar situações nas quais tal equilíbrio não seria alcançado – e portanto a mecânica quântica não seria válida na sua forma usual – podem ser encontrados na literatura [26].

Vale a pena deter-se um pouco mais na análise do aspecto probabilístico da física quântica, contrastando a conceituação oferecida pela mecânica bohmiana com aquela adotada na interpretação ortodoxa. Na mecânica bohmiana, a partícula possui uma posição e uma velocidade bem definidas, embora não conhecidas com precisão. A situação é semelhante àquela pertinente à mecânica estatística clássica. As probabilidades estão associadas à falta de conhecimento de valores que estão de fato bem definidos “no mundo lá

fora”. Usa-se a palavra “epistêmicas” para caracterizar probabilidades desta natureza. Já na interpretação ortodoxa, a posição ou a velocidade (ou qualquer outra grandeza física) está definida apenas no ato da medida, ou observação. Salvo nesta circunstância, o valor de uma quantidade física está indefinido, e não apenas desconhecido; as probabilidades são de natureza “não-epistêmica”.

4. Potencial quântico

Numa tentativa de aproximar o formalismo da mecânica quântica da descrição clássica (newtoniana) dos movimentos, David Bohm introduziu o *potencial quântico* que, quando somado ao potencial clássico, permite interpretar o movimento da partícula como devido à ação de uma força derivada do potencial total. Para extrair da equação de Schrödinger a expressão do potencial quântico, é conveniente escrever a função de onda em termos de duas funções reais \mathcal{R} e \mathcal{S} , na forma

$$\Psi = \mathcal{R} e^{i\mathcal{S}}. \quad (9)$$

Pode-se então re-escrever a Eq. (7) na forma

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{m} \nabla \mathcal{S}(\mathbf{r}, t). \quad (10)$$

Substituindo, na equação de Schrödinger (1), a expressão (9) para a função de onda e separando as partes real e imaginária da equação resultante, obtém-se duas equações acopladas para as funções \mathcal{R} e \mathcal{S} ⁵

$$\frac{\partial \mathcal{R}}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m} (2\nabla \mathcal{R} \cdot \nabla \mathcal{S} + \mathcal{R} \nabla^2 \mathcal{S}); \quad (11)$$

$$\hbar \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\nabla^2 \mathcal{R}}{\mathcal{R}} - |\nabla \mathcal{S}|^2 \right) - V. \quad (12)$$

Definindo o *potencial quântico*

$$U = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 \mathcal{R}}{\mathcal{R}}, \quad (13)$$

pode-se re-escrever a Eq. (12) na forma

$$\hbar \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \mathcal{S}|^2 = -(V + U). \quad (14)$$

Para justificar a interpretação da função U como potencial quântico, basta notar que, se a integração da segunda lei de Newton deve resultar na velocidade ((Eq. 10)), a força atuando sobre a partícula precisa ser

$$\mathbf{f} = \frac{d}{dt} m \mathbf{v} = \hbar \frac{d}{dt} \nabla \mathcal{S}(\mathbf{R}, t), \quad (15)$$

onde a derivada temporal deve ser entendida com *derivada convectiva*, de maneira que

$$\mathbf{f} = \hbar \left[\frac{\partial}{\partial t} \nabla \mathcal{S}(\mathbf{R}, t) + \frac{d\mathbf{R}}{dt} \cdot \nabla \nabla \mathcal{S}(\mathbf{R}, t) \right]. \quad (16)$$

⁵Nestas e outras equações subsequentes, usa-se a notação $\nabla^2 \equiv \nabla \cdot \nabla \equiv \Delta$.

Usando as Eqs. (8) e (10), e ainda realizando algumas manipulações simples do operador gradiente, não é difícil re-escrever a Eq. (16) na forma

$$\mathbf{f} = \nabla \left[\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{S}(\mathbf{R}, t) + \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \mathcal{S}(\mathbf{R}, t)|^2 \right]. \quad (17)$$

Comparando esta expressão com a Eq. (14), verifica-se imediatamente que a força atuando sobre a partícula quântica pode ser derivada de um potencial que é a soma do potencial clássico V e do potencial quântico U definido pela Eq. (13)

$$\mathbf{f} = -\nabla_R [V(\mathbf{R}, t) + U(\mathbf{R}, t)]. \quad (18)$$

Pode-se, portanto, considerar que a função de onda gera um potencial quântico ao qual corresponde uma *força quântica* que deve ser somada à força clássica para que o movimento da partícula quântica seja regido pela segunda lei de Newton.

Deve-se enfatizar que, para que esta teoria seja experimentalmente equivalente à mecânica quântica usual, é necessário que a distribuição probabilística de posição inicial da partícula esteja relacionada com a função de onda inicial pela Eq. (4) e ainda que, a cada possível posição inicial, esteja associada uma velocidade inicial dada pela condição de pilotagem (Eq. (10)). Uma teoria na qual estes vínculos entre as condições iniciais relativas à partícula e aquelas relativas à onda estivessem parcial ou totalmente relaxadas constituiria uma generalização da mecânica quântica.

Em muitas aplicações, em vez de extrair a função \mathcal{R} da função de onda e calcular o potencial quântico usando a Eq. (13), é mais conveniente calcular o potencial quântico diretamente a partir da densidade de probabilidade. Basta utilizar a relação $\rho = \mathcal{R}^2$ para deduzir da Eq. (13) a expressão equivalente

$$U = -\frac{\hbar^2}{4m\rho} (\Delta\rho - \frac{1}{2\rho} |\nabla\rho|^2). \quad (19)$$

5. Estados ligados

Na análise dos estados ligados de uma partícula quântica num potencial (clássico) independente do tempo, começa-se usualmente por considerar os estados estacionários, descritos por soluções da equação de Schrödinger nas quais a dependência temporal é fatorada. Tais soluções possuem a forma

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar}, \quad (20)$$

onde E é a energia total e $\psi(\mathbf{r})$ satisfaz a equação de Schrödinger independente do tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (21)$$

⁶Aqui, m_e denota a massa do elétron.

Inserindo a Eq. (20) na Eq. (7), obtém-se o campo de velocidade

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{m} \Im \frac{\nabla\psi(\mathbf{r})}{\psi(\mathbf{r})} = \frac{\hbar}{m} \nabla \mathcal{S}_\psi(\mathbf{r}), \quad (22)$$

sendo $\mathcal{S}_\psi(\mathbf{r})$ a fase da parte espacial da função de onda.

Num estado estacionário, a densidade de probabilidade é independente do tempo e, como mostram as expressões (19) e (22), o mesmo é verdade do potencial quântico e do campo de velocidade. Naturalmente, estados mais gerais, nos quais estas grandezas dependem do tempo, podem ser construídos por superposição linear de estados estacionários.

5.1. Átomo de hidrogênio

A elucidação da estrutura do átomo foi de grande importância no desenvolvimento da física quântica. Num curso introdutório, a discussão costuma focar essencialmente o mais simples dos átomos, qual seja, o átomo de hidrogênio. O potencial clássico responsável pelo movimento do elétron corresponde simplesmente à atração coulombiana devida ao núcleo,

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r} \equiv -\frac{e^2}{r}, \quad (23)$$

sendo q o valor absoluto da carga do elétron e ϵ_0 a permissividade do vácuo. Como este potencial possui simetria esférica, usando-se coordenadas esféricas, é possível separar as coordenadas angulares da coordenada radial e escrever as soluções da Eq. (21) na forma

$$\psi_{nlm_l}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r) Y_l^{m_l}(\theta, \phi), \quad (24)$$

sendo $Y_l^{m_l}$ um harmônico esférico. As funções de onda radiais R_{nl} são reais e bem conhecidas [2].

O estado fundamental do átomo corresponde a $n = 1$ e $l = m_l = 0$. Como $Y_0^0(\theta, \phi) = 1/\sqrt{4\pi}$, a função de onda ψ é real e segue então da Eq. (22) que, *no estado fundamental do átomo, a velocidade do elétron é nula*. Em cada átomo no estado fundamental, o elétron está em repouso numa posição a priori desconhecida mas cuja distribuição de probabilidade, se for assumida a tipicidade, é isotrópica em relação ao núcleo e possui densidade radial

$$R_{10}(r)^2 = \frac{4}{a_0^3} e^{-2r/a_0}, \quad (25)$$

sendo $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$ o raio de Bohr.⁶ Vê-se que a interpretação de de Broglie-Bohm oferece uma visão do estado fundamental do átomo de hidrogênio bastante diferente daquelas usualmente apresentadas. No modelo de Bohr, muitas vezes utilizado para encaminhar a discussão do átomo quântico [1], o elétron percorre uma trajetória circular de raio a_0 com velocidade $c\alpha$, sendo c a velocidade da luz e $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137}$ a conhecida *constante de estrutura fina*. Já na interpretação

padrão da teoria quântica, embora esteja proibido atribuir ao elétron uma posição e um momentum bem definidos, argumentos baseados no princípio da incerteza sugerem uma dispersão de velocidade da ordem de $\Delta v = \frac{\Delta p}{m_e} \sim \frac{\hbar}{a_0 m_e} = c\alpha$, para uma dispersão de posição da ordem do tamanho a_0 do átomo.

O primeiro nível excitado do átomo corresponde a $n = 2$ e é degenerado, sendo composto de um singlete com $l = m_l = 0$ e um tripleto com $l = 1, m_l = 0, \pm 1$. Para o singlete e o membro do tripleto com $m_l = 0$, a função de onda, de novo, é real e a velocidade do elétron é nula. Já nos membros do tripleto com $m_l = \pm 1$, a função de onda é dada por

$$\psi_{21\pm 1}(r, \theta, \phi) = \mp f(r, \theta) e^{\pm i\phi}, \quad (26)$$

com

$$f(r, \theta) = \frac{1}{8\sqrt{a_0^3}} r e^{-r/2a_0} \sin \theta. \quad (27)$$

Vê-se que, para estas funções de onda, a função \mathcal{S}_ψ que aparece na expressão (22) do campo de velocidade é simplesmente $\pm \phi$ e, usando a familiar expressão do operador gradiente em coordenadas esféricas, obtém-se

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}) = \pm \frac{\hbar}{mr \sin \theta} \mathbf{e}_\phi. \quad (28)$$

Se a partícula estiver inicialmente localizada no ponto de coordenadas (r_0, θ_0, ϕ_0) , ela efetuará um movimento circular tal que $(r = r_0, \theta = \theta_0, \phi = \phi_0 \pm \frac{\hbar}{mr_0^2 \sin^2 \theta_0} t)$. A distribuição de probabilidade das posições iniciais é dada pela norma quadrada da função (27). Tipicamente, r_0 será da mesma ordem de grandeza que o raio de Bohr a_0 e $\sin \theta_0$ será um número de ordem 1, de maneira que a ordem de grandeza da velocidade será $\sim \hbar/(ma_0) = \alpha c$. Vale notar que, nesta interpretação, o tratamento não-relativístico é justificado, no sentido de ser improvável uma condição inicial para a qual ele não seria válido em boa aproximação.

Os demais estados do átomo podem ser analisados de maneira semelhante. Deve-se lembrar que combinações lineares de soluções estacionárias também correspondem a estados físicos. Em tais estados, o campo de velocidade depende do tempo e o movimento do elétron pode ser bastante complexo.

5.2. Caixa unidimensional

A partícula numa caixa unidimensional de comprimento L , com paredes infinitamente rígidas, é comumente discutida como primeiro exemplo de resolução da equação de Schrödinger. No interior da caixa, o potencial clássico $V(x)$ é nulo; já fora da caixa, imagina-se que ele assume valores arbitrariamente grandes, impedindo a penetração da partícula nestas regiões. Por continuidade, a função de onda deve se anular nas extremidades da caixa. Impondo estas condições de contorno sobre

⁷Pode-se supor $\delta \geq 0$ e $0 \leq \varphi < 2\pi$

as soluções da Eq. (21), obtém-se, para os estados estacionários, as funções de onda normalizadas

$$\Psi_n(x, t) = \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}, \quad (29)$$

com

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \quad (30)$$

no intervalo $[0, L]$ e $\psi_n(x) = 0$ fora deste intervalo, sendo n um número inteiro positivo. A energia correspondente é

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}. \quad (31)$$

Vale notar que não há degenerescência dos níveis de energia no caso unidimensional.

Como as funções de onda espaciais são reais, segue imediatamente da Eq. (22) que a velocidade da partícula é nula em qualquer estado estacionário. Usando a Eq. (13), é fácil calcular o potencial quântico associado ao estado (29-30):

$$U_n(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\frac{d^2 \sin \frac{n\pi x}{L}}{dx^2}}{\sin \frac{n\pi x}{L}} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n^2 \pi^2}{L^2} = E_n. \quad (32)$$

Vê-se que, no interior da caixa, o potencial clássico é nulo mas o potencial quântico é igual à energia total, de maneira que a energia cinética da partícula é nula, como tem que ser para consistência com a conclusão já alcançada a respeito da velocidade.

Para que a partícula se mova, a função de onda deve corresponder, não a um estado estacionário, mas a uma sobreposição de tais estados. Como ilustração, consideramos uma combinação linear do estado fundamental e do primeiro estado excitado, da forma

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{1 + \delta^2}} [\Psi_1(x, t) + \delta e^{i\varphi} \Psi_2(x, t)], \quad (33)$$

onde δ e φ são parâmetros reais constantes.⁷ Definindo, para não sobrecarregar a notação, as quantidades $\omega = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$ e $k = \frac{\pi}{L}$, pode-se re-escrever a Eq. (29), com as Eqs. (30) e (31), na notação simplificada

$$\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(nkx) e^{-in^2 \omega t}. \quad (34)$$

Inserindo então a função de onda definida pela expressão (33) na fórmula geral (4), obtém-se a expressão da densidade de probabilidade

$$\rho(x, t) = \frac{2}{L} \sin^2(kx) \sigma(x, t), \quad (35)$$

onde

$$\sigma(x, t) = \frac{1}{1 + \delta^2} [1 + 4\delta^2 \cos^2(kx) + 4\delta \cos(kx) \cos(3\omega t - \varphi)]. \quad (36)$$

Semelhantermente, usando a função de onda (33) na fórmula (7), chega-se ao campo de velocidade correspondente

$$v(x,t) = \frac{\hbar}{m} \Im \left[\frac{1}{\Psi(x,t)} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x,t) \right] = \frac{\hbar k}{m} \frac{2\delta \operatorname{sen}(kx) \operatorname{sen}(3\omega t - \varphi)}{1 + \delta^2 \sigma(x,t)}. \quad (37)$$

O potencial quântico poderia também ser deduzido sem dificuldade das Eqs. (19) e (35). Porém, sendo uma função do tempo (além de depender dos parâmetros δ e φ), ele seria de pouca utilidade na análise qualitativa do movimento.

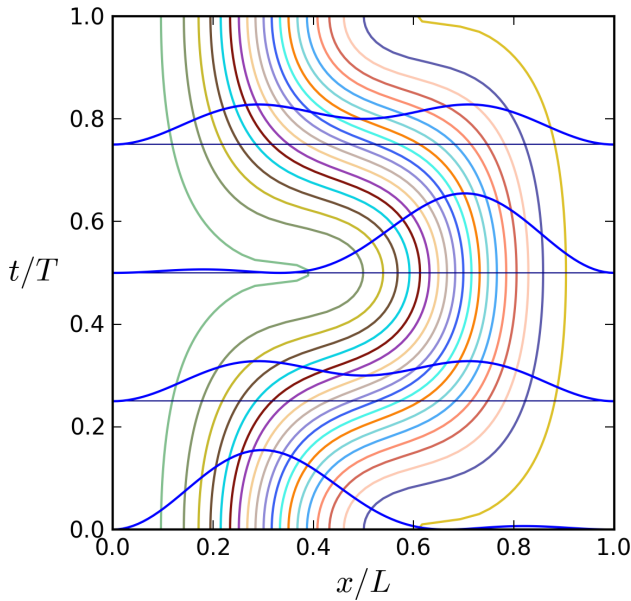


Figura 1 - Trajetórias espaço-temporais de um elétron numa caixa unidimensional de comprimento $L = 1$ nm, com posição em abscissa e tempo em ordenada, em escala t/T , com T o período de movimento. O estado quântico é dado pela expressão (33) com $\delta = 1$ e $\varphi = 0$. As curvas azuis representam a densidade de probabilidade, em unidades arbitrárias, para 4 instantes.

Para visualizar as trajetórias da partícula, basta integrar numericamente a Eq. (8), com o campo de velocidade dado pela Eq. (37) e a distribuição inicial de posição dada pela Eq. (35), com $t = 0$. A Fig. 1 mostra resultados para $mc^2 = 511$ keV (massa do elétron), $L = 1$ nm, $\delta = 1$ e $\varphi = 0$. O tempo está mostrado em ordenada numa escala t/T , sendo $T = 2\pi/(3\omega) = 4mL^2/(3\pi\hbar)$ o período de uma oscilação. São mostradas as trajetórias da partícula para um conjunto de valores da posição inicial, distribuídos em conformidade com a densidade de probabilidade (35). Esta densidade está também mostrada, para quatro instantes igualmente espaçados num período. Deve-se enfatizar que há apenas uma partícula na caixa, que percorrerá uma das trajetórias mostradas, conforme o valor da sua posição inicial.

Por inspeção das expressões (36-37) acima, é fácil ver que a ordem de grandeza da velocidade da partícula depende do valor do parâmetro δ : se $\delta \sim 1$ (como no exemplo da Fig. 1), a velocidade alcança valores $\sim \hbar k/m$ para a maioria das condições iniciais.⁸ Se $\delta \ll 1$ ou $\delta \gg 1$, a velocidade é tipicamente pequena ($\ll \hbar k/m$) e, já que o período não depende de δ , a partícula realiza um movimento oscilatório de pequena amplitude. Para $\delta \rightarrow 0$ ou $\delta \rightarrow \infty$, a amplitude desta oscilação tende a zero, como esperado já que uma componente do estado (33) fica desprezível e recai-se no caso de um estado estacionário.

6. Partícula livre

Se o potencial clássico for nulo, a equação de Schrödinger (1) admitirá soluções do tipo onda plana⁹

$$\Psi_k(x,t) = e^{i(kx - \omega_k t)} \quad (38)$$

com $\omega_k = E_k/\hbar = \hbar k^2/(2m)$. Evidentemente, usando este função de onda, deduz-se da expressão geral (7) o campo de velocidade constante ingenuamente esperado,

$$v = \frac{\hbar k}{m}. \quad (39)$$

Porém, não sendo normalizável, a função (38) não está adequada à descrição do estado de uma única partícula, e o estudo correto do movimento da partícula livre na interpretação da onda piloto requer a consideração de um pacote de ondas.

6.1. Pacote gaussiano simples

Será considerado primeiramente um pacote de ondas gaussiano, da forma

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{i(kx - \omega_k t)} dk, \quad (40)$$

com

$$g(k) = \sqrt{\frac{a}{\sqrt{2\pi}}} \exp\left[-\frac{a^2(k - k_0)^2}{4}\right], \quad (41)$$

sendo a e k_0 constantes. O fator multiplicativo na expressão (41) garante a normalização correta, como pode ser facilmente verificado. Com a forma (41), a integral presente na expressão (40) pode ser realizada [2], com o resultado

$$\Psi(x,t) = \left(\frac{2}{\pi a^2 |z|^2}\right)^{1/4} e^{i(k_0 x + \varphi)} \times \exp\left[-\frac{(x - v_0 t)^2}{a^2 z}\right], \quad (42)$$

onde $v_0 = \hbar k_0/m$ e

$$z = 1 + i \frac{t}{\tau} \quad \text{com} \quad \tau = \frac{ma^2}{2\hbar}; \quad (43)$$

⁸Para valores muito improváveis da posição inicial, a velocidade pode alcançar valores muito grandes, como pode ser visto na Fig. 1.

⁹Será considerado aqui o movimento da partícula num espaço de uma dimensão apenas.

$$\varphi = -\theta - \frac{\hbar k_0^2}{2m} t \quad \text{com} \quad \tan 2\theta = \frac{t}{\tau}. \quad (44)$$

A densidade de probabilidade correspondente é

$$\rho(x, t) = \sqrt{\frac{2}{\pi a\zeta(t)}} \exp\left\{-2\left[\frac{x - v_0 t}{a\zeta(t)}\right]^2\right\}, \quad (45)$$

onde

$$\zeta(t) = |z(t)| = \sqrt{1 + \frac{t^2}{\tau^2}}. \quad (46)$$

Vê-se que a distribuição de posição mantém a forma gaussiana, com um máximo que se desloca com velocidade v_0 e uma largura, dada por $\Delta x = a\zeta(t)/2$, que alcança o seu mínimo $a/2$ em $t = 0$.

À função de onda (42) corresponde, por aplicação da fórmula (7), o campo de velocidade

$$v(x, t) = v_0 + \frac{(x - v_0 t)t}{\tau^2 + t^2}. \quad (47)$$

Embora não seja necessário para o estudo do movimento da partícula, pode-se julgar interessante dispor também da expressão do potencial quântico. Realizando alguns cálculos a partir das Eqs. (19) e (45), obtém-se

$$U(x, t) = \frac{\hbar^2}{m[a\zeta(t)]^2} \left\{1 - 2\left[\frac{x - v_0 t}{a\zeta(t)}\right]^2\right\}. \quad (48)$$

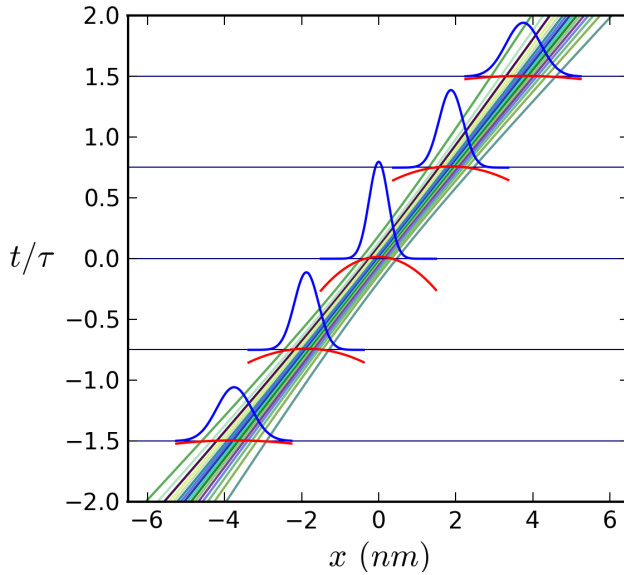


Figura 2 - Trajetórias espaço-temporais de um elétron livre com pacote de ondas da forma (41) com $a = 0,5 \text{ nm}$ e $k_0 = 20 \text{ nm}^{-1}$. A posição está em abscissa e o tempo em ordenada, em unidades t/τ , com τ definido pela Eq. (43). A densidade de probabilidade de posição (curvas azuis) e o potencial quântico (curvas vermelhas) são mostrados para alguns valores do tempo (em unidades arbitrárias).

A Fig. 2 apresenta trajetórias espaço-temporais calculadas por integração numérica da Eq. (8), com o campo de velocidade dado pela Eq. (47). Os valores dos parâmetros utilizados são $m = 511 \text{ keV}/c^2$ (massa do elétron), $a = 0,5 \text{ nm}$ e $k_0 = 20 \text{ nm}^{-1}$. Utilizando

fórmulas lembradas no apêndice A, pode-se verificar que estes valores correspondem a uma energia média $\langle E \rangle = 15,4 \text{ eV}$, com dispersão $\Delta E = 3,05 \text{ eV}$. Vê-se que, como era esperado já que o pacote de ondas foi construído de maneira a alcançar a sua largura mínima em $t = 0$, as trajetórias se aproximam com o passar do tempo para $t < 0$, passando a se afastar quando $t > 0$. A figura também mostra, para alguns valores do tempo, a distribuição de posição e o potencial quântico (na região na qual há probabilidade significativa de a partícula se encontrar). A curva de potencial quântico é uma parábola com concavidade para baixo e máximo no centro do pacote de ondas, indicando uma força quântica repulsiva em relação a este centro. A magnitude desta força é significativa apenas quando o tamanho do pacote não difere muito do seu valor mínimo.

6.2. Pacote gaussiano duplo

Constatou-se acima que, mesmo numa situação que possui um correspondente clássico natural, o movimento da partícula quântica livre, apesar de relativamente simples, não é uniforme. A linearidade da equação de Schrödinger possibilita a construção de estados quânticos mais exóticos, para os quais pode-se esperar movimentos bem mais complicados. Como exemplo, será considerado aqui um estado superposição linear de dois pacotes gaussianos, inicialmente localizados em regiões separadas do espaço e rumando um em direção ao outro

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_+(x, t) + \Psi_-(x, t)], \quad (49)$$

onde $\Psi_+(x, t)$ é obtida da Eq. (42) pela translação $x \rightarrow x + L$ e $\Psi_-(x, t)$ é obtida da Eq. (42) pela translação $x \rightarrow x - L$ e a troca do sinal da velocidade, $v_0 \rightarrow -v_0$. Para que a função de onda (49) esteja corretamente normalizada, é necessário que não haja sobreposição significativa das duas componentes no instante inicial, o que será o caso se L for escolhido suficientemente grande em comparação com a .

É uma tarefa elementar deduzir da função de onda estipulada acima o campo de velocidade, a densidade de probabilidade e, se houver interesse, o potencial quântico [usando as fórmulas gerais (7), (4) e (19), respectivamente]. As expressões resultantes são um tanto complicadas e não serão exibidas aqui. Resultados de cálculos numéricos para $a = 0,5 \text{ nm}$, $k_0 = 20 \text{ nm}^{-1}$ e $L = 1,5 \text{ nm}$ podem ser vistos na Fig. 3. Inicialmente, a partícula está localizada numa das duas componentes do pacote e, quando ocorre sobreposição das duas componentes, a interferência provoca variações rápidas no campo de velocidade, resultando num movimento complexo da partícula, visível em maior escala na Fig. 4.

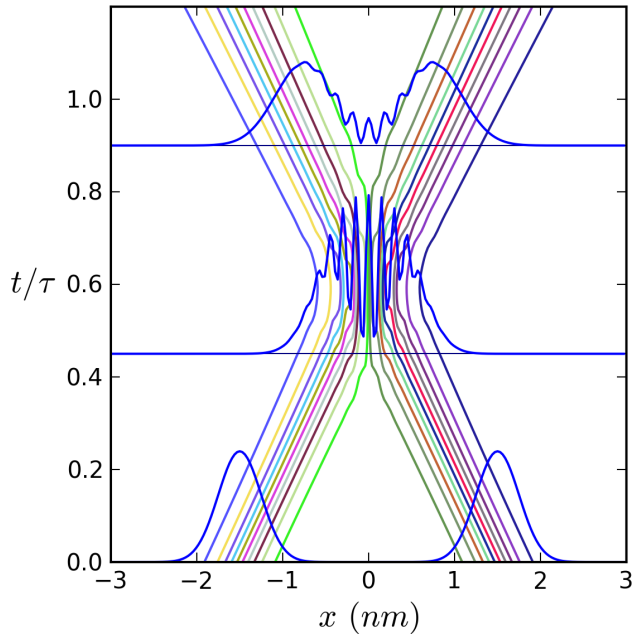


Figura 3 - Trajetórias espaço-temporais de um elétron livre com pacote de ondas da forma (49), com parâmetros $a = 0,5 \text{ nm}$, $k_0 = 20 \text{ nm}^{-1}$ e $L = 1,5 \text{ nm}$. A posição está em abscissa e o tempo em ordenada, em unidades t/τ , com τ definido pela Eq. (43). As curvas azuis mostram a densidade de probabilidade de posição para alguns valores do tempo, em unidades arbitrárias.

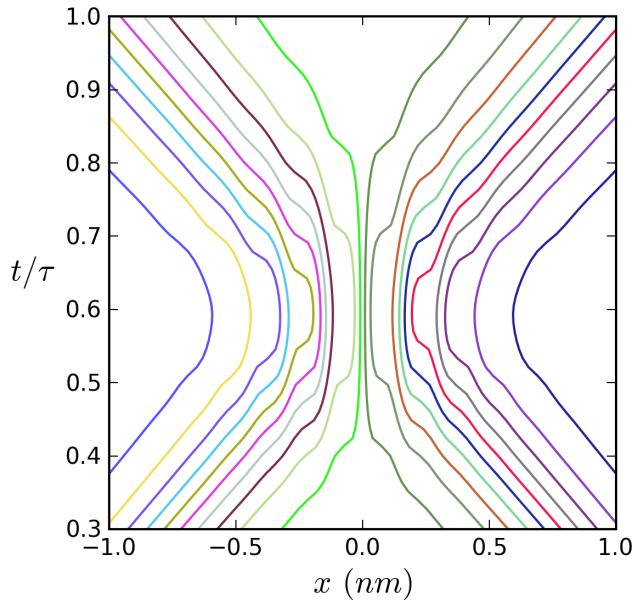


Figura 4 - Trajetórias espaço-temporais de um elétron livre com pacote de ondas da forma (49), quando ocorre sobreposição significativa das duas componentes. Os valores dos parâmetros são $a = 0,5 \text{ nm}$, $k_0 = 20 \text{ nm}^{-1}$ e $L = 1,5 \text{ nm}$. A posição está em abscissa e o tempo em ordenada, em unidades t/τ , com τ definido pela Eq. (43).

Numa interpretação meramente ondulatória, seria natural considerar que as duas componentes do pacote se aproximam, interferem ao se cruzar e, continuando a se deslocar, cada uma no seu respectivo sentido de movimento, passam a afastar-se. A interpretação da onda piloto traz uma imagem diferente, porque nela não

pode ocorrer cruzamento das trajetórias, já que a velocidade é uma função unívoca da posição da partícula e do tempo. Assim, numa situação simétrica como aquela considerada acima, com duas componentes do pacote de pesos iguais, a partícula acaba necessariamente voltando para o lado de onde ela veio.

7. Barreira de potencial

O primeiro contato do aluno com a teoria quântica do espalhamento ocorre usualmente quando discutem-se os fenômenos de reflexão e transmissão de uma partícula por uma barreira de potencial. A “barreira quadrada” de altura V_0 e largura d , tal que

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & 0 \leq x \leq d \\ 0 & d < x \end{cases} \quad (50)$$

é particularmente conveniente, pois as soluções estacionárias da equação de Schrödinger podem ser construídas por procedimentos elementares [27]. Supondo que a partícula incide sobre a barreira vindo da região $x < 0$, a função de onda espacial de energia E toma a forma

$$\psi_k(x) = \begin{cases} e^{ikx} + \frac{i(q^2 - k^2) \text{sen}(qd)}{D(k)} e^{-ikx} & x < 0 \\ \frac{1}{D(k)} [(q+k)k e^{iq(x-d)} + (q-k)k e^{-iq(x-d)}] & 0 \leq x \leq d \\ \frac{2qk}{D(k)} e^{ik(x-d)} & d < x \end{cases} \quad (51)$$

onde

$$D(k) = 2qk \cos(qd) - i(q^2 + k^2) \text{sen}(qd); \quad (52)$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}; \quad (53)$$

$$q = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}. \quad (54)$$

A discussão usual consiste em extrair dos resultados acima as expressões das correntes incidente, refletida e transmitida e, delas, os coeficientes de reflexão e transmissão. Pouco rigoroso na interpretação usual, tal procedimento se torna inviável na interpretação da onda piloto, na qual deseja-se analisar a trajetória da partícula. Para tanto, como no caso da partícula livre, é necessário construir um pacote de ondas. Supondo que, antes de se aproximar da barreira, o pacote possui a forma gaussiana, a função de onda é dada por

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k) \psi_k(x) e^{-i \frac{\hbar k^2}{2m} t} dk, \quad (55)$$

onde $g(k)$ é dada pela Eq. (41). O cálculo do campo de velocidade (7) e do potencial quântico (19) requer, além

da função de onda, as suas derivadas espaciais (primeira e segunda), que podem ser calculadas, por integração semelhante à Eq. (55), a partir das derivadas correspondentes, facilmente deduzidas, da função (51). Estas integrações precisam ser realizadas numericamente.

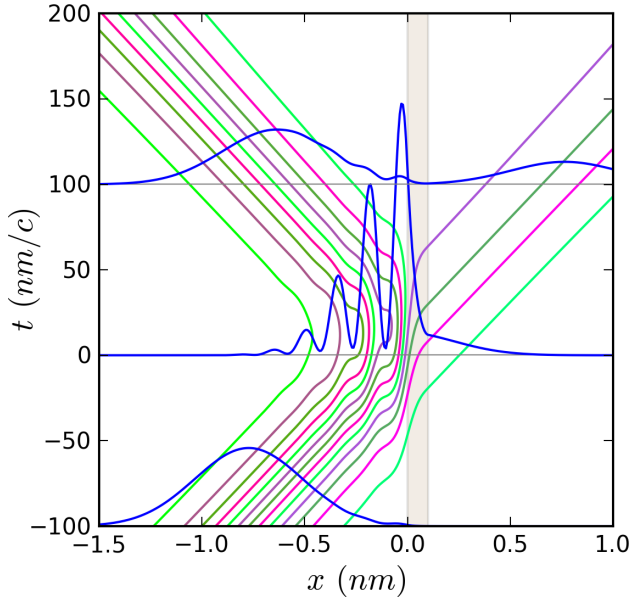


Figura 5 - Trajetórias espaço-temporais de um elétron com pacote de ondas inicial da forma gaussiana (41) que incide sobre uma barreira de altura 20 eV e espessura 0,1 nm. Os valores dos parâmetros são $a = 0,5$ nm e $k_0 = 20$ nm⁻¹, o que corresponde a uma energia média de 15,4 eV, com dispersão de 3,05 eV. A posição está em abscissa e o tempo em ordenada. A faixa bege indica a posição da barreira. As curvas azuis mostram a densidade de probabilidade, em unidades arbitrárias, para 3 valores do tempo.

Resultados obtidos para o caso de um pacote de ondas com $k_0 = 20$ nm⁻¹ e $a = 0,5$ nm, associado a um elétron que incide sobre uma barreira de altura 20 eV e espessura 0,1 nm, podem ser vistos na Fig. 5. Já que, para tal pacote, $\langle E \rangle = 15,4$ eV com $\Delta E = 3,05$ eV, trata-se de uma barreira alta (intransponível na mecânica clássica), mas de pouca espessura e portanto, na mecânica quântica, a probabilidade de tunelamento é significativa. Vê-se que, para 4 das 13 trajetórias (inicialmente distribuídas de acordo com a densidade de probabilidade visível na figura), ocorre o tunelamento. Vale notar que, como não pode haver cruzamento de trajetórias, a partícula atravessará a barreira se estiver inicialmente na parte dianteira do pacote, ao passo que, se estiver inicialmente na parte traseira, será refletida.

Como enfatizado por alguns autores [7], a interpretação da onda piloto abre um caminho para abordar uma pergunta frequentemente feita, mas dificilmente respondida na interpretação usual [28]: quanto tempo a partícula passa dentro da barreira, na região classicamente proibida? Para as trajetórias mostradas, este tempo pode ser lido diretamente da Fig. 5. Num estudo mais completo desta questão – que não será realizado aqui – far-se-ia uma média sobre as possíveis trajetórias

para calcular um tempo de tunelamento médio [29].

No âmbito da mecânica clássica, seria comum utilizar um gráfico de energia para discutir a reflexão e/ou a transmissão de uma partícula por uma barreira. O conceito de potencial quântico pode ser aproveitado para abordar a questão por este ângulo também na mecânica quântica, analisando o movimento da partícula no potencial total, soma dos potenciais clássico e quântico. Naturalmente, será importante não perder de vista os aspectos que tornam a situação quântica significativamente mais complexa que a homóloga clássica, em especial:

- o potencial quântico depende do tempo e, portanto, o potencial experienciado pela partícula numa dada posição depende da trajetória seguida;
- a energia total pode variar ao longo da trajetória da partícula, apenas a média da energia total sobre todas as trajetórias possíveis é conservada exatamente.

A Fig. 6 apresenta diagramas de energia para 3 trajetórias de um elétron que incide sobre uma barreira de altura 18 eV e espessura 0,4 nm. Como antes, os parâmetros característicos do pacote de ondas são $a = 0,5$ nm e $k_0 = 20$ nm⁻¹. Na Fig. 6(a), vê-se a distribuição inicial de probabilidade e as trajetórias espaço-temporais para 3 posições iniciais escolhidas de maneira a ilustrar casos qualitativamente distintos. A Fig. 6(b) mostra o diagrama de energia associado ao caso de uma trajetória para a qual ocorre o tunelamento. A contribuição do potencial quântico abaixa o potencial total o suficiente para permitir a penetração da partícula na barreira. À medida que a partícula avança na barreira, o potencial total aumenta, mas a energia total também, de maneira que o tunelamento pode ocorrer. O diagrama de energia da Fig. 6(c) corresponde ao caso de uma trajetória para a qual a partícula penetra na barreira mas, no interior desta, as curvas de energia potencial e total vão se aproximando até tocar-se, e a partícula então dá meia-volta. Por fim, o diagrama de energia da Fig. 6(d) corresponde ao caso de uma trajetória tal que a partícula nem alcança a barreira, sendo repelida antes pelo potencial quântico. Nos dois últimos casos, nos quais a partícula dá meia-volta, nota-se que as curvas traçadas pelo potencial e pela energia totais no caminho de volta não coincidem com aquelas traçadas na ida em direção à barreira. Isto não é de se estranhar, já que essas quantidades são determinadas pela função de onda, cuja modificação na reflexão é complexa. Pode-se reparar, ainda, que o movimento quântico da partícula, embora bem mais complicado que o movimento clássico correspondente, é mais suave pois, no caso quântico, o potencial total é contínuo: as descontinuidades do potencial clássico são compensadas por descontinuidades do potencial quântico oriundas das descontinuidades da derivada segunda da função de onda nas extremidades da barreira.

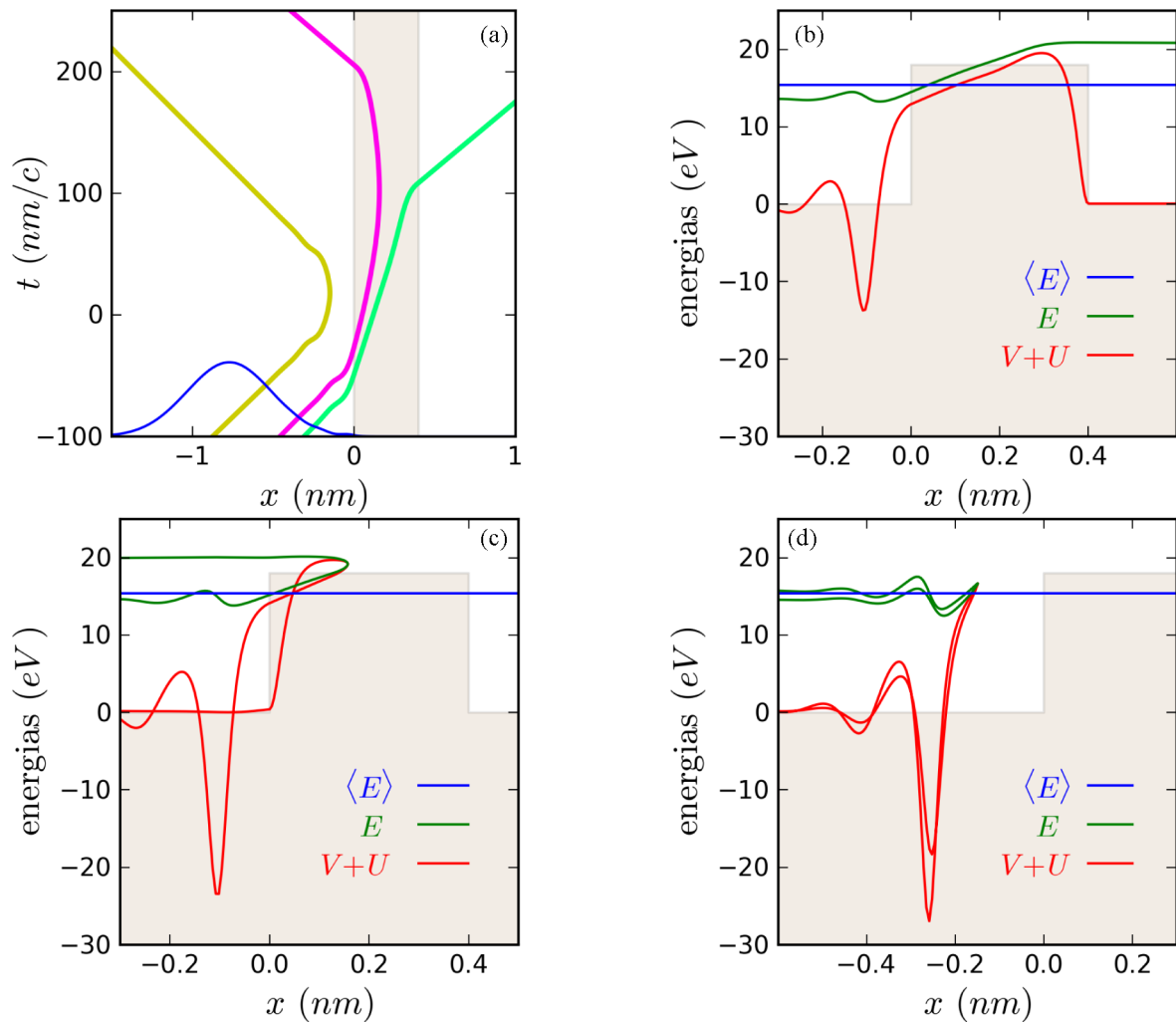


Figura 6 - Análise do movimento quântico de um elétron, com pacote de ondas inicial da forma gaussiana (41), que incide sobre uma barreira de altura 18 eV e espessura 0,4 nm. Os valores dos parâmetros são $a = 0,5$ nm e $k_0 = 20$ nm⁻¹, o que corresponde a uma energia média de 15,4 eV, com dispersão de 3,05 eV. (a) Três trajetórias espaço-temporais; a posição está em abscissa e o tempo em ordenada; a faixa bege indica a posição da barreira; a curva azul mostra a densidade de probabilidade inicial, em unidades arbitrárias. (b-d) Diagramas de energia mostrando a energia potencial total (curva vermelha), a energia total (curva verde) e a energia total média (linha azul). A área bege indica o potencial clássico. Os casos (b), (c) e (d) correspondem, respectivamente, às trajetórias verde, roxa e amarela da figura (a).

8. Difração por uma fenda dupla

O experimento da fenda dupla, no qual um feixe de partículas atravessa duas fendas abertas num anteparo, antes de incidir sobre uma tela de observação, é tema incontornável no ensino da mecânica quântica, podendo até servir de ponto de partida no desenvolvimento dos conceitos essenciais desta teoria [5]. É sabido que, na ausência de um dispositivo que permita determinar qual a fenda atravessada pela partícula, observa-se um padrão de interferência na distribuição estatística dos impactos sobre a tela. Nesta situação, costuma-se afirmar – na base da interpretação usual – que não faz sentido perguntar por qual fenda a partícula passou. Evidentemente, a interpretação da onda piloto, na qual a partícula segue uma trajetória bem definida, deve oferecer uma visão conceitualmente bem diferente.

Foi enfatizado aqui que, no estudo rigoroso do movimento da partícula na interpretação da onda piloto, obtém-se o campo de velocidade a partir de uma solução normalizada da equação de Schrödinger. No caso de um problema de espalhamento, isto requer a construção de soluções estacionárias satisfazendo as condições de contorno adequadas e a combinação de tais soluções para formar um pacote de ondas. Para sistemas unidimensionais, recursos computacionais atuais permitem cumprir esta tarefa com relativa facilidade, como visto na seção 7. Mas no experimento de duas fendas, a equação de Schrödinger independente do tempo passa a ser uma equação a derivadas parciais e a tarefa de construir soluções satisfazendo condições de contorno, a priori não-triviais, no anteparo, jaz além do escopo do presente trabalho. Mesmo assim, procurar-se-á uma visualização semi-quantitativa das trajetórias da partícula

através de um tratamento simplificado, baseado no uso de uma função de onda estacionária para a descrição do movimento da partícula na região além do anteparo. Pode-se considerar tal descrição como uma idealização aproximativa do caso de um pacote de ondas de pouca dispersão em comprimento de onda e grande extensão longitudinal.

Por simplicidade, considera-se aqui um sistema bidimensional apenas, definido no plano (x, y) . Supõe-se que o feixe incidente é paralelo ao eixo x e o anteparo coincide com o eixo y . As “fendas” são pequenos furos localizados em $y = \pm a/2$. Já que não há interação na região considerada, a Eq. (21) satisfeita pela função de onda de energia E reduz-se a

$$\Delta\psi(x, y) = -k^2\psi(x, y), \quad (56)$$

onde $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ e o Laplaciano é dado, em coordenadas polares, por

$$\Delta\psi = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2}. \quad (57)$$

Começando com uma única fenda muito estreita localizada na origem, é natural postular uma onda difratada radialmente, portanto independente do ângulo θ , de maneira que, com a Eq. (57), a Eq. (56) se reduz a

$$u^2 \frac{d^2 \psi}{du^2} + u \frac{d\psi}{du} + u^2 \psi = 0, \quad (58)$$

onde foi introduzida a variável adimensional $u = kr$. As soluções desta equação são conhecidas [30]; para garantir que a onda afaste-se da fenda com o passar do tempo, deve-se escolher a função de Hankel $H_0^{(1)}(u)$, cujo comportamento assintótico a grande distância é

$$H_0^{(1)}(u)_{u \rightarrow \infty} \sim \sqrt{\frac{2}{\pi u}} \exp[i(u - \frac{\pi}{4})]. \quad (59)$$

Voltando ao caso de duas fendas, postula-se então para a função de onda total uma superposição linear, com pesos iguais, de duas funções de Hankel $H_0^{(1)}$ transladadas de maneira a originar-se da fenda superior e da fenda inferior, respectivamente

$$\psi(x, y) \propto H_0^{(1)}(kr_+) + H_0^{(1)}(kr_-), \quad (60)$$

onde

$$r_{\pm} = |\mathbf{r} \mp \frac{a}{2} \mathbf{e}_y| = \sqrt{x^2 + y^2 + \frac{a^2}{4} \mp ay}. \quad (61)$$

A obtenção do campo de velocidade pela Eq. (7) requer o cálculo do gradiente da função de onda. Usando as expressões (61) e a relação

$$\frac{d}{du} H_0^{(1)}(u) = -H_1^{(1)}(u) \quad (62)$$

entre funções de Hankel, obtém-se facilmente

$$\nabla\psi(x, y) = -k \left\{ \frac{1}{r_+} [x\mathbf{e}_x + (y - \frac{a}{2})\mathbf{e}_y] H_1^{(1)}(kr_+) + \frac{1}{r_-} [x\mathbf{e}_x + (y + \frac{a}{2})\mathbf{e}_y] H_1^{(1)}(kr_-) \right\}. \quad (63)$$

Usando as expressões (60) e (63), junto com a Eq. (61), é fácil calcular o campo de velocidade por aplicação da fórmula (7) e integrar numericamente a Eq. (8) para obter as trajetórias da partícula. Por inspeção destas expressões, vê-se que o padrão de interferência formado sobre a tela de observação e a forma das trajetórias entre o anteparo e a tela apenas dependem da razão a/λ entre a distância de separação das fendas e o comprimento de onda.¹⁰ A Fig. 7 apresenta resultados para $a/\lambda = 4$. Evidentemente, muito perto do anteparo, a partícula deve se encontrar próxima a uma das fendas; na integração da Eq. (8), foram consideradas posições iniciais distribuídas sobre pequenos círculos (de raio inferior à resolução da figura) centrados nas fendas. Vê-se que, após sair de uma fenda isotropicamente, certas trajetórias sofrem desvios repentinos, de maneira que, a grande distância do anteparo, as trajetórias formam grupos que correspondem aos máximos do padrão de interferência. Cabe enfatizar de novo que o tratamento aqui apresentado está embasado em simplificações drásticas e, portanto, os resultados da Fig. 7 são apenas sugestivos.

Num experimento recente [31], um procedimento conhecido como *medida fraca* foi utilizado para determinar trajetórias médias da partícula – no caso, um fóton – num interferômetro de duas fendas. Embora a análise realizada independa da interpretação, é no mínimo instigante comparar a reconstrução gráfica das trajetórias apresentada nesse trabalho com a Fig. 7.

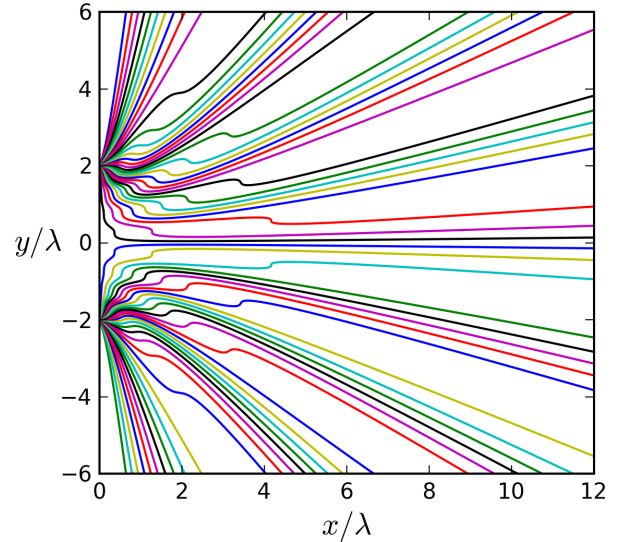


Figura 7 - Trajetórias da partícula no modelo bidimensional do experimento da fenda dupla, para o caso de uma separação entre as fendas igual a 4 comprimentos de onda.

¹⁰A constante de Planck e a massa da partícula, presentes na expressão (7), apenas influenciam a distância percorrida por unidade de tempo sobre uma trajetória.

9. Conclusões e comentários

Este artigo apresentou uma introdução à interpretação da mecânica quântica conhecida como *interpretação da onda piloto*, focando sistemas simples usualmente considerados num primeiro curso de graduação dedicado a esse ramo fundamental da física. Não é intenção do autor advogar que essa interpretação deveria embasar a apresentação da mecânica quântica a alunos de graduação, substituindo a interpretação habitual, mas apenas sugerir que o professor poderia aproveitá-la ocasionalmente para adotar um outro ponto de vista, enriquecendo as suas aulas. Como indagou John Bell [32]

Porque será que a visão da onda piloto está ignorada nos livros de mecânica quântica? Não seria o caso de ensiná-la, não como a via única, mas como um antídoto à auto-satisfação vidente?

Além da sua importância para a compreensão profunda da física, as questões levantadas pela comparação das interpretações da mecânica quântica possuem grande relevância para a epistemologia e para a filosofia da ciência. A caracterização do indeterminismo presente na teoria quântica, seja como intrínseco e não passível de explicação, como alega a interpretação usual, seja como associado a uma falta de conhecimento, como alega a interpretação da onda piloto, representa uma opção epistemológica de fundamental importância, como foi enfatizado ao longo do presente trabalho. Outra questão focada nos debates de cunho filosófico é a do *realismo* [12] da teoria e do status *ontológico* [24] dos entes que dela participam. Na interpretação usual, o sistema quântico está inteiramente especificado pela função de onda. Vale destacar que apenas no caso de uma partícula única, esta onda se propaga no espaço tridimensional usual. Para um sistema de N partículas, a função de onda (complexa) se propaga no espaço de configuração, de dimensão $3N$. É natural hesitar a atribuir o status de objeto real a tal entidade. Já na interpretação da onda piloto, há realmente N partículas, cada uma delas com a sua posição no espaço tridimensional usual bem definida – embora desconhecida – a cada instante. A função de onda orchestra os movimentos das partículas, num papel um tanto semelhante ao da lagrangiana na mecânica clássica.

Para ilustrar a interpretação da onda piloto, o presente trabalho focou apenas sistemas constituídos de uma única partícula sem spin. Dentre o rol de assuntos básicos no ensino da mecânica quântica [2], a partícula de spin 1/2 e o experimento de Stern-Gerlach, ou ainda o emaranhamento de um sistema de duas partículas, poderiam ser apresentados proveitosamente também no enfoque alternativo dessa interpretação.

Nas visualizações animadas de fenômenos quânticos na tela do computador [33, 34], observa-se usualmente

o movimento de pacotes de ondas. Na abordagem usual, a interpretação destes pacotes como representando uma distribuição de probabilidade de presença de uma partícula está apresentada forçosamente apenas num texto explicativo que acompanha a animação. A interpretação da onda piloto oferece a possibilidade de visualização simultânea dos aspectos ondulatórios e corpusculares, o que poderia ser explorado para enriquecer as animações existentes, por exemplo da reflexão e transmissão por uma barreira, sem infringir a dualidade onda-partícula.

Apêndice - Propriedades do pacote de ondas gaussiano

Usando o fator de forma gaussiano (41) e uma tabela de integrais, pode-se deduzir os valores esperados

$$\langle k^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} g(k)k^2 dk = k_0^2 + \frac{1}{a^2}; \quad (64)$$

$$\langle k^4 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} g(k)k^4 dk = k_0^4 + \frac{6k_0^2}{a^2} + \frac{3}{a^4}. \quad (65)$$

Portanto, a energia média da partícula livre com pacote de ondas gaussiano é

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \langle k^2 \rangle = E_0 \left[1 + \frac{1}{(k_0 a)^2} \right] \quad (66)$$

onde

$$E_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}. \quad (67)$$

A dispersão na energia é

$$\begin{aligned} \Delta E &= \frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{\langle k^4 \rangle - \langle k^2 \rangle^2} \\ &= E_0 \frac{2}{k_0 a} \sqrt{1 + \frac{1}{2(k_0 a)^2}}. \end{aligned} \quad (68)$$

Se desejarmos que $\langle E \rangle \simeq E_0$ e $\Delta E \ll E_0$, deveremos escolher a tal que $k_0 a \gg 1$.

Agradecimento

O autor agradece a Sandra Prado pelo estímulo na elaboração deste trabalho.

Referências

- [1] R. Eisberg e R. Resnick, *Física Quântica* (Editora Campus, Rio de Janeiro, 1994).
- [2] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu e F. Laloë, *Quantum Mechanics* (Hermann, Paris, 1977).
- [3] M. Betz, I. de Lima e G. Mussatto, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **31**, 3501 (2009).
- [4] P.G. Hewitt, *Física Conceitual* (Bookman, Porto Alegre, 2002).
- [5] R.P. Feynman, R.B. Leighton e M. Sands, *Lições de Física de Feynman, Edição Definitiva* (Bookman, Porto Alegre, 2008), v. 3.

- [6] J. von Neumann, *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics* (Princeton University Press, Princeton, 1955).
- [7] J.T. Cushing, *Quantum Mechanics: Historical Contingency and the Copenhagen Hegemony* (University of Chicago Press, Chicago, 1994).
- [8] E. Abdalla, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **27**, 147 (2005).
- [9] L. Smolin, *Three Roads to Quantum Gravity* (Basic Books, Nova Iorque, 2001).
- [10] M.A. Nielsen e I.L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).
- [11] M. Bitbol, *Physique et Philosophie de l'Esprit* (Flammarion, Paris, 2005).
- [12] O. Pessoa Jr., *Conceitos de Física Quântica* (Editora Livraria da Física, São Paulo, 2006), v. 1 e 2.
- [13] H. Everett III, *Rev. Mod. Phys.* **29**, 454 (1957).
- [14] F. Ostermann e S.D. Prado, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **27**, 193 (2005).
- [15] F. Freitas e O. Freire Jr., *Revista Brasileira de Ensino de Física* **30**, 2307 (2008).
- [16] D. Wallace, *The Emergent Multiverse: Quantum Theory according to the Everett Interpretation* (Oxford University Press, Oxford, 2012).
- [17] R.B. Griffiths, *J. Stat. Phys.* **36**, 219 (1984).
- [18] R. B. Griffiths, *Consistent Quantum Theory* (Cambridge University Press, Cambridge, 2002).
- [19] R. Omnès, *The Interpretation of Quantum Mechanics* (Princeton University Press, Princeton, 1994).
- [20] B.C. Van Fraassen, *Quantum Mechanics: an Empiricist View* (Oxford University Press, Oxford, 1991).
- [21] L. de Broglie, *Journal de Physique et le Radium* **8**, 225 (1927).
- [22] D. Bohm, *Phys. Rev.* **85**, 166 e 180 (1952).
- [23] P.R. Holland, *The Quantum Theory of Motion: An Account of the de Broglie-Bohm Causal Interpretation of Quantum Mechanics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).
- [24] D. Dürr e S. Teufel, *Bohmian Mechanics: the Physics and Mathematics of Quantum Theory* (Spinger-Verlag, Berlin, 2009).
- [25] M. Born, *The Statistical Interpretation of Quantum Mechanics*, Nobel Lecture, disponível em http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1954/born-lecture.html.
- [26] A. Valentini, *J. Phys. A: Math. Theor.* **40**, 3285 (2007).
- [27] M.A. Cândido Ribeiro, V.C. Franzoni, W.R. Passos, E.C. Silva e A.N.F. Aleixo, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **26**, 1 (2004).
- [28] R. Landauer e Th. Martin, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 217 (1994).
- [29] C.R. Leavens, *Sol. State Comm.* **76**, 253 (1990).
- [30] M. Abramowitz e I.A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (National Bureau of Standards, Washington, 1964).
- [31] S. Kocsis, B. Braverman, S. Ravets, M.J. Stevens, R.P. Mirin, L.K. Shalm e A.M. Steinberg, *Science Magazine* **332**, 1170 (2011).
- [32] J.S. Bell, *Speakable and Unsayable in Quantum Mechanics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1993).
- [33] M. Joffre, J.-L. Basdevant and J. Dalibard, *Quantum Physics Online*, disponível em <http://www.quantum-physics.polytechnique.fr>, acessado em 13/5/2014.
- [34] M. Belloni, W. Christian e A.J. Cox, *Physlet Quantum Physics: an Interactive Introduction* (Pearson Education Inc., Upper Saddle River, 2006).