29: O caso quase-clássico

Iniciamos o nosso curso com o estudo do átomo de Bohr, centrado na regra de quantização, para órbitas circulares,

$$L = n\hbar \tag{754}$$

com n inteiro, que dá, para a energia ,

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}\ , \tag{755}$$

a famosa fórmula de Bohr.

Na verdade, (756) é o caso particular, para órbitas circulares, das regras de *Bohr-Sommerfeld*, que podem ser enunciadas assim: seja um sistema periódico descrito por coordenadas generalizadas q_i, $i = 1, \ldots, n$. Então

$$\oint p_i dq_i = n_i h \tag{756}$$

onde h é a constante de Planck, e os n_i são inteiros. No caso do átomo de hidrogênio, o movimento, em órbita circular, pode ser inteiramente descrito pela coordenada angular θ, do par (r, θ) de coordenadas polares no plano da órbita. Como a lagrangeana do sistema é

$$L = m\frac{}{2(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2) - \frac{Ze^2}{r}} \tag{757}$$

temos que

$$p_\theta = \frac{\partial L}{\partial \dot\theta} = mr^2\dot\theta = L \tag{758}$$

onde L é o momento angular. Além disso, p_θ é constante, pois a variável θ não aparece na lagrangeana. Então,

$$\oint p_\theta d\theta = \int_0^{2\pi} L d\theta = 2\pi L = nh \tag{759}$$

ou seja,

$$L = n\, h_{\overline{2\pi}} \tag{760}$$

que é a regra de Bohr usual.

Estamos agora muito distantes dessa versão simples de uma mecânica quântica. Órbitas não existem, de modo que a regra de Bohr nem pode ser enunciada, com o vocabulário da mecânica quântica. No entanto,(756) permanece válida, embora obtida de maneira totalmente diferente.

Nesta seção queremos investigar se existem condições em que a regra de Bohr seja aproximadamente válida. Sistemas que satisfazem a essas condições serão chamados *quase-clássicos*[33]. No estilo que temos adotado sistematicamente, estudaremos este problema no contexto dos estados estacionários e, para simplificar, para sistemas unidimensionais.

Uma partícula de massa m possui uma energia potencial $U(x)$. A equação de Schrödinger para estados estacionários é:

$$-\hbar^2_{\overline{2m\frac{d^2\psi}{dx^2}+U(x)\psi=E\psi}} \tag{761}$$

que, naturalmente, pode ser escrita como

$$\hbar^2 \frac{}{2m\frac{d^2\psi}{dx^2}+(E-U)\psi=0} \qquad (762)$$

Procuraremos soluções escritas na forma

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}\sigma} \qquad (763)$$

onde σ é uma função complexa, e tal que

$$-\sigma| \gg \hbar \quad . \qquad (764)$$

Note-se que, sendo σ complexa, temos

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}(\sigma_r + i\sigma_i)} = e^{-\frac{1}{\hbar}\sigma_i} e^{\frac{i}{\hbar}\sigma_r} \qquad (765)$$

ou seja, (764) é uma expressão geral para a função de onda. É a condição (765) que nos dirige ao caso que nos interessa, já que é uma realização do limite formal $\hbar \longrightarrow 0$, supostamente a situação em que a mecânica quântica tende à mecânica clássica (as relações de incerteza inexistem, nesse limite).

Inserindo na eq.(763) a expressão (764), obtemos a seguinte equação para σ (completamente equivalente à equação de Schrödinger):

$$1\frac{}{2m\left(\frac{d\sigma}{dx}\right)^2 - \frac{i\hbar}{2m}\frac{d^2\sigma}{dx^2} = E-U} \qquad (766)$$

Vamos agora utilizar a condição (765). Suponhamos que exista a expansão

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{\hbar}{i}\sigma_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \sigma_2 + \ldots \qquad (767)$$

com σ_0, σ_1, σ_2 finitos (ou seja,de módulos muito maiores do que $\hbar$). Então (765) estará garantida desde que $|\sigma_0| \gg \hbar$.

Exemplo: $\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar}px}$, a função de onda de um estado estacionário de partícula livre, é tal que

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}px} = e^{\frac{i}{\hbar}\sigma} \tag{768}$$

de onde segue que

$$\sigma = px \tag{769}$$

a condição (765) é

$$\frac{px}{\hbar}=\frac{\hbar kx}{\hbar}\gg 1 \tag{770}$$

é garantida se $kx \gg 1$. Ela falha, portanto, para $k=0$.

Utilizando (768) em (767), obtemos

$$\frac{1}{2m}\left[\sigma_0'+\frac{\hbar}{i}\sigma_1'+\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\sigma_2'+\dots\right]^2-\frac{i\hbar}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\left(\sigma_0+\frac{\hbar}{i}\sigma_1+\dots\right)=E-U \tag{771}$$

onde a derivação em relação a x é denotada por um $'$. Igualando os coeficientes da potência 0 de $\hbar$, temos

$$\frac{1}{2m}\left(\sigma_0'\right)^2=E-U(x) \tag{772}$$

que dá

$$\sigma_0 = \pm \int \sqrt{2m(E-U)}dx \tag{773}$$

A relação

$$E = \frac{p^2}{2m} + U$$

permite escrever

$$p(x) = \sqrt{2m(E-U(x))}$$

de maneira que (774) pode ser escrita

$$\sigma_0 = \pm \int p(x)dx \tag{774}$$

Voltando à (772), igualemos os coeficientes da potência 1 de $\hbar$:

$$2\sigma_0'\sigma_1' + \sigma_0'' = 0 \tag{775}$$

Como, de (775),

$$\sigma_0' = p(x) \ ,$$

temos

$$\sigma_1' = -\frac{\sigma_0''}{2\sigma_0'} = -\frac{p'}{2p} \tag{776}$$

ou

$$\sigma_1 = -\frac{1}{2}\log p = \log \frac{1}{\sqrt{p}} \tag{777}$$

Temos, portanto, até esta aproximação,

$$\sigma = \int p(x)dx + \frac{\hbar}{i}\log \frac{1}{\sqrt{p}} \tag{778}$$

ou

$$\psi(x) = \frac{e^{\pm\frac{i}{\hbar}\int p dx}}{\sqrt{p}} \tag{779}$$

Mais precisamente, a solução geral é dada por uma combinação linear das soluções exibidas acima, ou seja,

$$\psi(x) = C_1 \frac{e^{\frac{i}{\hbar}\int p dx}}{\sqrt{p}} + C_2 \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}\int p dx}}{\sqrt{p}} \tag{780}$$

As condições de validade da aproximação quase-clássica são obtidas insistindo-se em que, na equação (767), o segundo termo do primeiro membro seja muito menor que o primeiro isto é:

$$\frac{\left|\frac{i\hbar}{2m}\frac{d^2\sigma}{dx^2}\right|}{\left|\frac{1}{2m}\left(\frac{d\sigma}{dx}\right)\right|^2} \ll 1 \tag{781}$$

Isto é equivalente a

$$\hbar\left|\frac{\sigma''}{\sigma'^{\,2}}\right| \ll 1 \tag{782}$$

ou ainda,

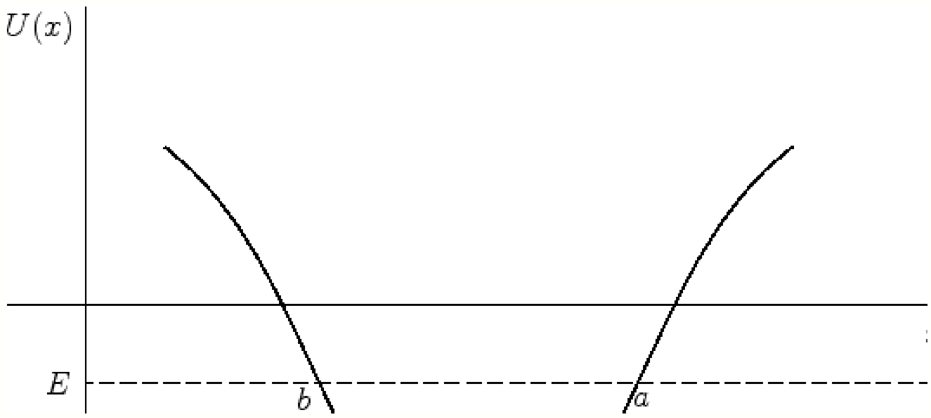
$$\left|\frac{d}{dx}\left(\frac{\hbar}{p(x)}\right)\right| \ll 1 \tag{783}$$

Aqui encontramos mais uma vez uma situação importante em que a aproximação quase-clássica não é válida: quando o momento se anula, a eq.(784) não é satisfeita.

Suponhamos que a nossa partícula possua uma energia potencial $U(x)$, e que sua energia total seja E. Como temos

$$p(x) = \sqrt{2m\left(E - U(x)\right)}$$

vemos que, nos pontos em que $E=U(x)$, $p(x)$ é igual à zero, e a aproximação quase-clássica falha.



Na figura acima vemos os pontos a e b, em que $E=U(x)$, e a aproximação quase-clássica falha. Classicamente são os pontos em que a partícula para e volta, os "pontos de retorno". Nas vizinhanças desses pontos não podemos utilizar a expressão (781). Há uma série de métodos para contornar esta dificuldade. O mais elementar é o seguinte: seja x_0 um ponto de retorno, ou seja, $E-U(x_0)=0$. A equação de Schrödinger é

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\left(U(x)-E\right)\psi(x)=0 \tag{784}$$

Expandindo a função $F(x)\equiv U(x)-E$ em torno do ponto x_0, temos

$$\mathrm{F(x)=F(x_0)}+(x-x_0)F'(x_0) \tag{785}$$

com $F(x_0)=0$. Como $F(x_0)=0$, temos

$$U(x)-E=(x-x_0)U'(x_0) \tag{786}$$

Logo, nas vizinhanças do ponto de retorno, a equação de Schrödinger é

$$-\hbar^2 \frac{}{2m\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+U'(x_0)(x-x_0)\psi(x)=0} \tag{787}$$

que é a equação de Schrödinger para uma partícula sobre a ação de uma força constante. Mas esta equação pode ser resolvida exatamente (veja Apêndice), de maneira que podemos proceder assim: a uma certa (pequena) distância do ponto de retorno, usamos a função de onda quase-clássica. Mais para perto do ponto de retorno, usamos a solução exata (788). Tudo o que precisamos fazer é achar, dentre as soluções de (788),aquela que se acopla continuamente com a solução semi-clássica.

Este método utiliza funções transcendentes (a função de Airy, por exemplo), e um pouco de análise complexa, o que está acima do nível deste curso. Assim, sendo, limitar-nos-emos a enviar o leitor ao apêndice, para os detalhes do cálculo, e a dar a regra de transição, lá obtida.

Nas regiões classicamente inacessíveis, temos $E - U(x) < 0$, logo,

$$p(x) = \sqrt{2m(E-U(x))} = i\sqrt{2m(|E-U(x)|)}\ . \tag{788}$$

Uma repetição simples dos cálculos leva a

$$\psi(x) = C_1 \frac{e^{-\frac{1}{\hbar}\int |p(x)|dx}}{\sqrt{|p|}} + C_2 \frac{e^{\frac{1}{\hbar}\int |p(x)|dx}}{\sqrt{|p|}} \tag{789}$$

Temos, portanto,

$$\psi(x) \quad = \quad C_1 \frac{e^{\frac{i}{\hbar}\int p dx}}{\sqrt{p}} + C_2 \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}\int p dx}}{\sqrt{p}} \qquad E > U(x) \tag{790}$$

$$\psi(x) \quad = \quad C_1 \frac{e^{-\frac{1}{\hbar}\int |p(x)| dx}}{\sqrt{|p|}} + C_2 \frac{e^{\frac{1}{\hbar}\int |p(x)| dx}}{\sqrt{|p|}} \qquad E < U(x) \tag{791}$$

Regra de transição

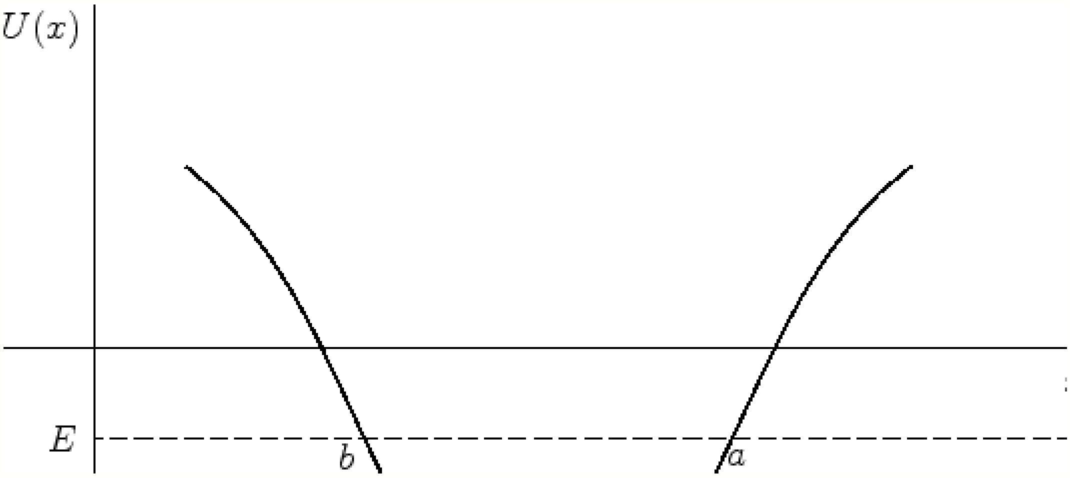
Vamos nos limitar a enunciar a regra de transição, ilustrando-a com exemplos.

Seja $x = a$ um ponto de retorno, ou seja, tal que $E = U(a)$. Então,

$$\frac{C}{2\sqrt{|p|}}e^{-\frac{1}{\hbar}\left|\int_a^x p dx\right|} \quad \rightarrow \quad \frac{C}{\sqrt{p}}\cos\left\{\frac{1}{\hbar}\left|\int_a^x p dx\right| - \frac{\pi}{4}\right\} \qquad (792)$$

$$E < U(x) \quad \rightarrow \quad E > U(x)$$

Exemplo



A figura acima mostra um poço de potencial e os pontos, b e a, de retorno de uma partícula de massa m e energia E.

Considere o ponto de retorno a. À sua direita a função de onda deve decrescer exponencialmente, já que se trata de uma região classicamente proibida, com $E < U(x)$. Dentre as soluções de (794), a que nos serve é escrita

$$\frac{C}{2\sqrt{|p|}}e^{-\frac{1}{\hbar}\int_a^x |p| dx},$$

logo, à esquerda de a, teremos

$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{p}}\cos\left\{\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\, dx - \frac{\pi}{4}\right\} \qquad (793)$$

Passemos ao ponto de retorno b. À sua esquerda temos uma região classicamente proibida. Devemos, então, ter uma função de onda que, à medida que nos aprofundamos nessa região (isto é, à medida que x se torna mais e mais negativo), decresce exponencialmente. Dentre as catalogadas em (794) a que tem essas propriedades é

$$\frac{C}{2\sqrt{|p|}}e^{-\frac{1}{\hbar}\left|\int_b^x p\,dx\right|}=\frac{C}{2\sqrt{|p|}}e^{\frac{1}{\hbar}\int_b^x |p|\,dx} \tag{794}$$

logo, a função de onda à direita de b será

$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{p}}\cos\left\{\frac{1}{\hbar}\int_b^x p\,dx - \frac{\pi}{4}\right\} \tag{795}$$

Consequentemente temos, na região $b \leq x \leq a$, as expressões (794) e (796) para a função de onda. Essas duas expressões devem então coincidir:

$$\frac{C}{\sqrt{p}}\cos\left\{\frac{1}{\hbar}\int_b^x p\,dx - \frac{\pi}{4}\right\} = \frac{C'}{\sqrt{p}}\cos\left\{\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\,dx - \frac{\pi}{4}\right\} \tag{796}$$

Tomando $x = a$, obtemos

$$C\cos\left\{\frac{1}{\hbar}\int_b^a p\,dx - \frac{\pi}{4}\right\} = C'\cos\frac{\pi}{4} \tag{797}$$

que leva a

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar}\int_b^a p\,dx &= (n+1/2)\pi \\ C &= (-1)^n C' \end{aligned} \tag{798}$$

A regra de Bohr-Sommerfeld contém uma integral num circuito fechado. Neste caso, isto seria

$$\oint p\,dx = 2\int_b^a p\,dx = (n+1/2)2\pi\hbar = (n+1/2)h \tag{799}$$

Obtemos uma relação que coincide com a regra de Bohr para grandes valores de n, quando se pode desprezar o termo $1/2$.

Exemplo: oscilador harmônico

Neste caso a energia potencial é

$$U(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

e

$$\mathrm{p(x)}=\sqrt{2m\left(E-\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)} \tag{800}$$

Os pontos de retorno acontecem quando a energia coincide com a energia potencial, isto é

$$E = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

o que acontece para $x = \pm\frac{1}{\omega}\sqrt{\frac{2E}{m}}$. A integral que aparece em (799) é

$$\int p\,dx = \int_{-\frac{1}{\omega}\sqrt{\frac{2E}{m}}}^{\frac{1}{\omega}\sqrt{\frac{2E}{m}}} \sqrt{2mE - m^2\omega^2x^2}\,dx = \frac{\pi E}{\omega} \tag{801}$$

e temos, então,

$$\pi E_{\overline{\omega=(n+1/2)\pi\hbar}} \tag{802}$$

ou

$$E=(n+1/2)\hbar\omega \ , \tag{803}$$

em completa coincidência com o resultado exato!