



SEARA DA CIÊNCIA

CURIOSIDADES DA FÍSICA

José Maria Filardo Bassalo

[www.bassalo.com.br](http://www.bassalo.com.br)



## A Interpretação da Função de Onda de Schrödinger Revisitada.

Segundo vimos em verbete desta série, em três artigos publicados nos *Annales de Physique Leipzig* **79**, p. 361; 489; **80**, p. 437, todos escritos entre março e maio de 1926 e com o título principal: **Quantisierung als Eigenwertproblem** (“Quantização como um Problema de Autovalores”), o físico austríaco Erwin (Rudolf Josef Alexander) Schrödinger (1887-1961; PNF, 1933) desenvolveu a hoje conhecida **Mecânica Quântica Ondulatória** (MQO), cujo principal resultado é uma equação para as órbitas estacionárias dos elétrons do átomo de hidrogênio (H), a famosa **Equação de Schrödinger** (ES):

$$\left[(-\hbar^2/2m)\Delta + V(\vec{r}, t)\right]\psi(\vec{r}, t) = i\hbar \partial\psi(\vec{r}, t)/\partial t \Leftrightarrow \hat{H}\psi(\vec{r}, t) = i\hbar \partial\psi(\vec{r}, t)/\partial t$$

onde  $\psi(\vec{r}, t)$  é a **função de onda de Schrödinger** ou **campo escalar**,  $\Delta \equiv \nabla^2$  é o **operador laplaciano** (sendo  $\nabla$  o **operador gradiente**),  $\hbar = h/2\pi$ , e  $H$  é o **operador Hamiltoniano** definido por:

$$H(\vec{r}, t) = V(\vec{r}, t) + T = V(\vec{r}, t) + p^2/2m,$$

sendo  $V(\vec{r}, t)$  a **energia potencial**,  $T$  a **energia cinética** e  $p = -i\hbar\nabla$  ( $i = \sqrt{-1}$ ) é o **operador momento linear**. Note-se que quando  $H$  não depende do tempo, a ES toma a seguinte forma:  $H\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$ .

Depois da proposta da ES, procurou-se saber o significado de  $\psi(\vec{r}, t)$ , pois, sendo a ES uma equação de onda, surgiu a seguinte questão. Ora, toda onda tem um suporte no qual ela se propaga: a onda sonora, é o ar; a onda elástica, é o meio material; e a onda eletromagnética, é o éter cartesiano (hoje: vácuo). Por outro lado, a sua solução geral envolve uma função complexa, ou seja: [A. S. Davydov, **Quantum Mechanics** (Pergamon Press, 1965)]

$$\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}) \times \exp[-(i/\hbar)Et],$$

solução essa chamada de **estacionária**, porque a energia (E) é bem definida.

Até seu terceiro trabalho sobre a MQO (publicados nos *Annales* como vimos acima), Schrödinger tratava a  $\psi(\vec{r},t)$  com apenas um **campo escalar mecânico**, que satisfazia formalmente à ES. Porém, como no átomo de hidrogênio (H) há emissão de ondas eletromagnéticas (raios-X) quando o elétron troca de órbita, Schrödinger tentou então uma interpretação eletromagnética para a sua função de onda. Assim, no final do trabalho em que tratou da equivalência entre a MQO e a MQM, ele postulou que a densidade espacial ( $\rho$ ) da carga do elétron (e) era dada pela parte real da expressão  $\psi(\vec{r},t) \partial \psi^*(\vec{r},t) / \partial t$  (onde \* representa o complexo conjugado). No entanto, como essa expressão integrada no espaço todo era zero, ao invés de um valor finito e independente do tempo, Schrödinger, na última seção de seu trabalho publicado no *Annales de Physique Leipzig* **81**, p. 136, ainda em 1926, propôs uma nova interpretação para  $\psi(\vec{r},t)$  afirmando, desta vez, que  $\rho$  seria dada por  $\rho = e \psi \psi^*$ , e os elétrons como **pacotes de onda** deslocando-se no espaço como se fossem partículas clássicas formando uma nuvem. Essa tentativa malogrou, pois logo ficou demonstrado que o “pacote” abria no decorrer do tempo (para estudar esse “espraçamento”, ver qualquer texto sobre Mecânica Quântica, como, por exemplo, Davydov, op. cit.). Registre-se que, também em 1926 (*Naturwissenschaften* **14**, p. 644), Schrödinger sugeriu que esses **pacotes de onda** tinham realidade física.

A interpretação de Schrödinger para  $\psi(\vec{r},t)$ , associada à ES, indicava outro resultado importante. Com efeito, ele demonstrou que o “fluxo de eletricidade” (**vetor densidade de corrente**:  $\vec{S}$ ) associado ao elétron satisfazia a uma equação análoga à Equação da Continuidade da Hidrodinâmica:

$$\nabla \cdot \vec{S} + \partial \rho / \partial t = 0, \text{ onde: } \vec{S} = (ie\hbar / 2m)(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi).$$

Dessa maneira (e usando a solução de sua equação para um sistema de um elétron), Schrödinger comprovou que  $\vec{S}$  era estacionário para estados de uma só frequência ( $\nu$ ), significando isso dizer que não há emissão de radiação de um sistema em seu estado normal (estacionário).

Na *Universidade de Copenhague*, onde se situava a escola de físicos liderada pelo físico dinamarquês Niels Henrik David Bohr (1885-1962; PNF, 1922), os trabalhos de Schrödinger sobre a MQO eram aceitos e admirados, porém, sua interpretação da  $\psi(\vec{r},t)$  era rejeitada. Em virtude disso, Bohr convidou-o para discutir com seu grupo essa interpretação. As

discussões entre Bohr e Schrödinger prolongaram-se por algum tempo e nesse ínterim, Schrödinger adoeceu e recolheu-se a um quarto da casa de Bohr onde se hospedara. Bohr, por diversas vezes, ia até o quarto de Schrödinger para tentar continuar as discussões sobre a MQO e a interpretação de schrödingeriana da função de onda. Apesar de Bohr se preocupar com o bem estar de seu hóspede, contudo, não conseguia conter-se frente a tão vital problema físico, daí as sucessivas idas e vindas ao aposento em que se encontrava seu amigo.

As dificuldades surgidas com essa interpretação de Schrödinger de sua função de onda (como, por exemplo, a suspeita experimental de que os elétrons se localizavam em pequenas regiões do espaço e não se espalhavam em forma de nuvem, segundo tal interpretação) levaram alguns físicos a dar interpretações diferentes para  $\psi(\vec{r}, t)$ . Com efeito, ainda em 1926 (*Zeitschrift für Physik* **40**, p. 332), o físico alemão Erwin Madelung (1881-1972) apresentou uma **interpretação hidrodinâmica** da ES ao aplicar, na mesma, a transformação (hoje, **transformação de Madelung**) definida pela expressão:  $\psi(x, t) = \phi(x, t) \times \exp[i S(x, t)]$ , onde  $S(x, t)$  é a **ação clássica**, transformando-a nas equações básicas da Hidrodinâmica: **equação da continuidade** e **equação de Euler**. E mais ainda, Madelung observou que no caso da ES independente do tempo, a **equação tipo Euler** fornece a conservação da energia com um termo a mais, além dos tradicionais  $T$  e  $V$ . Esse termo adicional é hoje conhecido como o **potencial quântico de Bohm** (que torna a MQO causal), uma vez que, em 1952 (*Physical Review* **85**, p. 166; 180), ele foi re-obtido pelo físico norte-americano David Joseph Bohm (1917-1992). Para detalhes dessa **Mecânica Quântica Causal** (ou **Teoria das Variáveis Ocultas**), ver: Peter R. Holland, **The Quantum Theory of Motion: An Account of the de Broglie-Bohm Causal Interpretation of Quantum Mechanics** (Cambridge University Press, 1993); José Maria Filardo Bassalo, Paulo de Tarso Santos Alencar, Mauro Sérgio Dorsa Cattani e Antonio Boulhosa Nassar, **Tópicos da Mecânica Quântica de de Broglie-Bohm** (EDUFPA, 2003; [publica-sbi.if.usp.br/PDFs/pd1655/2010/pdf](http://publica-sbi.if.usp.br/PDFs/pd1655/2010/pdf)).

Note-se que a interpretação que hoje é aceita para  $\psi(\vec{r}, t)$  foi a formulada pelo físico alemão Max Born (1882-1970; PNF, 1954), também em 1926 (*Zeitschrift für Physik* **37**, p. 863; **38**, p. 803), que a considerou como uma **amplitude de probabilidade**. Vejamos como ele chegou a essa interpretação. Nessa época, Born discutiu essa ideia com um jovem físico norte-americano Julius Robert Oppenheimer (1904-1967), explicando-lhe que baseou sua hipótese nos fenômenos físicos de dispersão, pois, ao estudar a dispersão de elétrons (representado por uma onda

debroglieana) por um átomo, verificou que o número de elétrons difundidos poderia ser calculado por intermédio de certa expressão quadrática, construída a partir da amplitude da onda esférica secundária, onda essa gerada pelo átomo espalhador do feixe eletrônico incidente. Vejamos essa expressão quadrática. Anteriormente, vimos que a solução geral da ES envolve uma função complexa, ou seja:

$$\psi(\vec{r},t) = \varphi(\vec{r}) \exp [-(i/\hbar) E t],$$

solução essa chamada de **estacionária**, porque a energia (E) é bem definida. Assim, multiplicando a expressão acima por seu complexo conjugado (\*) e lembrando que  $\varphi^*(\vec{r}) = \varphi(\vec{r})$ , resulta:

$$\psi^*(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t) = \varphi^*(\vec{r}) \exp [(i/\hbar) E t] \times \varphi(\vec{r}) \exp [-(i/\hbar) E t] = |\varphi(\vec{r})|^2,$$

expressão quadrática essa que se denominada de **probabilidade** de encontrar o elétron em uma posição ( $\vec{r}$ ) estacionária.

Ora, como  $\psi(\vec{r},t)$  representa a **amplitude de probabilidade**, segundo afirmamos acima, isso significa dizer que qualquer grandeza observável [posição ( $\vec{r}$ ), energia (E), momento linear ( $\vec{p}$ ), momento angular ( $\vec{L}$ ) etc.] não tem significado físico, pois, como vimos acima, ela é representada por uma função complexa. Portanto, para obter o valor médio  $\langle \rangle$  do observável de um dado sistema físico, é necessário multiplicar o seu operador corresponde por  $\psi^*\psi$  e integrá-lo em todo espaço. Por exemplo, para o caso do momento linear ( $\vec{p} = i\hbar\nabla$ ), temos (Davydov, op. cit.):

$$\langle \vec{p} \rangle = \int \psi^*(\vec{r})(i\hbar\nabla)\psi(\vec{r})d^3\vec{r},$$

sendo  $\psi(\vec{r})$  a solução da ES do sistema físico considerado.

Este verbete não pode ser concluído sem uma breve referência a nova interpretação da **função de onda schrödingeriana** [ $\psi(\vec{r},t)$ ] proposta em artigo escrito em 2002 (*Physical Review A* **65**, p. 022305), pelos físicos norte-americanos Carlton Morris Caves e Christopher Alan Fuchs (n.1964), e pelo matemático alemão Rüdiger Schack (n.1960). Nesse artigo, intitulado **Quantum Probabilities as Bayesian Probabilities** (“Probabilidades Quânticas como Probabilidades Bayesianas”), conhecido como **Quantum Bayesianism** (QBism), eles procuram entender a Mecânica Quântica a partir de informações e consideram que a  $\psi(\vec{r},t)$  não

tem realidade objetiva e, desse modo, descrevem essa função como uma mera ferramenta matemática e que varia para cada observador. Este, dependendo das informações que possui de um dado estado físico observado, utiliza essa função para determinar sua crença pessoal sobre a propriedade física (posição, velocidade, energia etc.) desse estado. Diferentemente da IC, que usa a **probabilidade frequentista** [apresentada pelo matemático e engenheiro mecânico austríaco Richard Edler von Mises (1883-1953), em 1936, no livro intitulado **Probability, Statistics, and Truth** (“Probabilidade, Estatística, e Verdade”)], cuja probabilidade de um evento depende da frequência relativa depois de realizada uma série de tentativas, o QBism usa a **probabilidade bayesiana** [formulada pelo matemático inglês, o Presbiteriano Thomas Bayes (1701-1761), e lida na *Royal Society of London*, em 1763, depois de sua morte], que é subjetiva, pois depende do grau de crença que um dado evento ocorrerá. [Hans Christian von Baeyer, **O Paradoxo Quântico Que Confunde a Sua Mente** (*Scientific American Brasil* **134**, p. 38, julho de 2013); [wikipedia/Quantum\\_Bayesianism](https://pt.wikipedia.org/wiki/Quantum_Bayesianism).]

---



**ANTERIOR**

**SEGUINTE**