

Capítulo 14

Limite clássico

Considere, para início de discussão, a energia cinética relativística (oriunda da relatividade restrita):

$$K = Mc^2 \left[\frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} - 1 \right], \quad (14.1)$$

no limite em que $v/c \rightarrow 0$ temos que vale a aproximação binomial:

$$\frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \approx 1 + \frac{v^2}{2c^2}, \quad (14.2)$$

tal que, nesse limite, a energia cinética relativística reproduz a energia cinética clássica, $K = \frac{Mv^2}{2}$. Essa é uma forma de testar a teoria relativística: tomando o limite para a física clássica e comparando os resultados.

Em mecânica quântica, poderíamos pensar que o limite clássico da teoria seja $\hbar \rightarrow 0$, porém, isso não é verdade. Enquanto a mecânica relativística é, de fato, uma extensão da teoria newtoniana, tendendo a ela em um limite, a mecânica quântica não é uma extensão da mecânica clássica mas, sim, uma teoria que se baseia em pressupostos diferentes (o mais forte deles, o caráter probabilístico). Por conta dessas nuances e, também, pela dificuldade matemática de se definir o limite $\hbar \rightarrow 0$, não é óbvio estabelecer um limite a partir do qual a mecânica quântica reproduz os mesmos resultados da mecânica clássica.

Nesse capítulo analisaremos alguns casos em que é possível realizar esse limite clássico e a forma de fazê-lo.

14.1 Teorema de Ehrenfest

Antes de tudo é importante estabelecer que o termo *limite clássico da mecânica quântica* será usado para descrever as predições de um sistema quântico cujas magnitudes dinâmicas são muito maiores se comparadas a \hbar . Comumente serão sistemas macroscópicos cuja massa é da ordem de gramas e sua dimensão é da ordem de centímetros.

Já comentamos antes do caráter probabilístico da mecânica quântica, desabonando a possibilidade dessa teoria descrever uma única partícula, representando, sim, resultados em um ensemble de partículas. Aqui acontece o mesmo: o limite clássico de um estado quântico é um ensemble de trajetórias clássicas, e não uma única trajetória.

A primeira forma de se relacionar mecânica quântica com mecânica clássica é através do chamado *teorema de Ehrenfest*.

Teorema 13 (Teorema de Ehrenfest) *Se a largura da distribuição de probabilidades em posição for pequena comparada às escalas de distâncias sub as quais a força varia, então o centroide da distribuição probabilística segue a trajetória clássica.*

Consideremos o caso mais simples de uma partícula em uma dimensão cujo hamiltoniano é: $H = P^2/2M + W(Q)$. Usando o cenário de Heisenberg, as equações de movimento para os operadores de posição e momento serão:

$$\frac{dQ}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, Q] = \frac{P}{M}, \quad \frac{dP}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, P] = -\frac{\partial W}{\partial Q} = F(Q), \quad (14.3)$$

com $F(Q)$ o operador força. Tomando valores esperados e como essa operação é linear temos que:

$$\frac{d\langle Q \rangle}{dt} = \frac{\langle P \rangle}{M}, \quad \frac{d\langle P \rangle}{dt} = \langle F(Q) \rangle, \quad (14.4)$$

se a seguinte aproximação vale:

$$\langle F(Q) \rangle = F(\langle Q \rangle), \quad (14.5)$$

então vale que:

$$\frac{d\langle P \rangle}{dt} = F(\langle Q \rangle). \quad (14.6)$$

Note que as equações (14.6) e $\frac{d\langle Q \rangle}{dt} = \frac{\langle P \rangle}{M}$ coincidem com as equações clássicas. Outra forma de ver isso é que o centroide da distribuição de probabilidade quântica segue uma trajetória clássica.

Para este tratamento, exigimos uma condição forte para que essa analogia seja válida, que consiste na aproximação da equação (14.5) a qual só é válida de forma exata se a força for linear em Q . E, além dessa condição restritiva, a analogia com a mecânica clássica não é imediata: somente o centroide da distribuição de probabilidade é que seguirá uma trajetória clássica. Esse primeiro exemplo demonstra a delicadeza que é se estabelecer um limite clássico para a mecânica quântica.

Exemplo 25 (Partícula entre paredes refletoras) *Considere o caso de uma partícula confinada em paredes rígidas de largura L . A solução da equação de Schrödinger dependente do tempo para esse problema é:*

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin(k_n x) \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right), \quad (14.7)$$

em que, conforme sabemos:

$$k_x = \frac{n\pi}{L}, \quad E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}. \quad (14.8)$$

Como todas as frequências são múltiplos inteiros da frequência mais baixa, segue que $\psi(x, t)$ é periódica com período:

$$T_{qm} = \frac{4mL^2}{\pi\hbar}, \quad (14.9)$$

que não possui qualquer relação com o período de uma partícula clássica na mesma situação:

$$T_{cl} = \frac{2L}{v}. \quad (14.10)$$

Além disso, T_{qm} diverge pra infinito no limite $\hbar \rightarrow 0$.

Considere uma função de onda inicial da forma:

$$\psi(x, 0) = A(x)e^{ikx}, \quad (14.11)$$

em que $A(x)$ é uma amplitude real e a velocidade média desse estado é $v = \hbar k/m$. Compararemos o movimento desse estado quântico com um ensemble clássico cujas distribuições de momento e posição iniciais coincidem com a equação (14.11). Escolhemos a amplitude na forma gaussiana:

$$A(x) = C \exp\left[-\left(\frac{x - x_0}{2a}\right)^2\right]. \quad (14.12)$$

O valor esperado da posição $\langle x \rangle = \langle \psi(x, t) | x | \psi(x, t) \rangle$ exibe um padrão complicado com periodicidade T_{qm} . A posição média do ensemble clássico

segue as primeiras oscilações quânticas, mas decai para um valor constante $\langle x \rangle = L/2$.

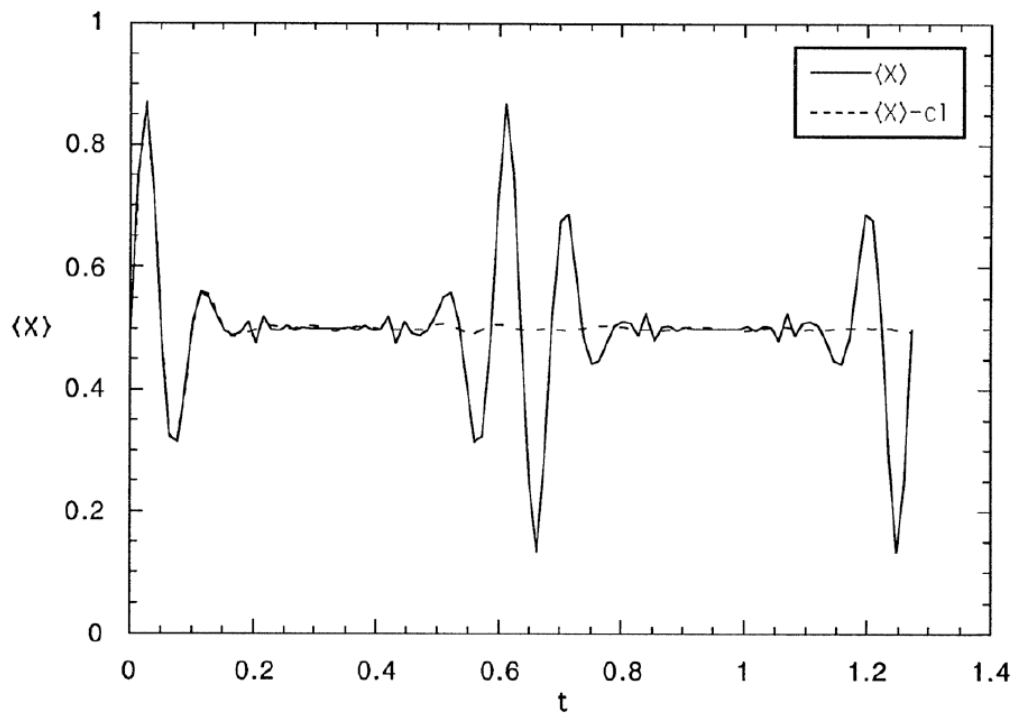


Figura 14.1: Gráfico da posição média usando o estado quântico e usando o ensemble clássico. Veja a concordância de ambos apenas nas primeiras oscilações. Extraído de [2].

Ao mesmo tempo a concordância entre o valor médio da posição usando o estado quântico com o teorema de Ehrenfest é ruim, inclusive nas primeiras oscilações, como pode ser visto na figura 14.2.

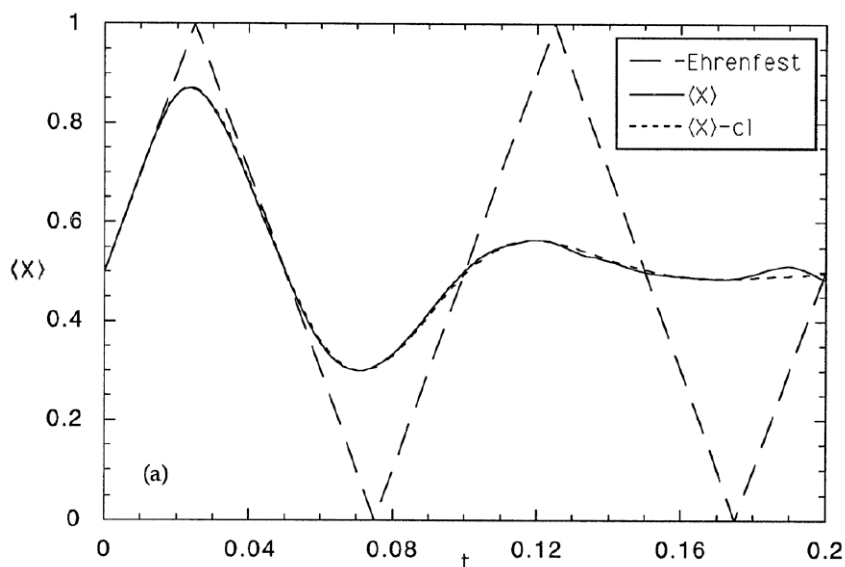


Figura 14.2: Gráfico que aproxima a região onde o ensemble clássico e o valor esperado quântico coincidem. Note a grande discordância obtida pelo teorema de Ehrenfest. Extraído de [2].

Isso é suficiente pra mostrar que o teorema de Ehrenfest não é condição suficiente (e nem necessária) para que se tenha um limite clássico: o ensemble de trajetórias clássicas reproduz bem o comportamento quântico nas primeiras oscilações. E, finalmente, a falha do teorema de Ehrenfest também não impede que seja possível estabelecer um limite clássico, como é o caso que fizemos aqui.

14.2 Equação de Hamilton-Jacobi e o potencial quântico

Seja a seguinte função de onda, descrita em termos de fase e amplitude:

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = A(\mathbf{x}, t)e^{iS(\mathbf{x}, t)/\hbar}, \quad (14.13)$$

substituindo na equação de Schrödinger e separando as parte real e imaginária, encontramos:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 A + \frac{1}{2M}A(\nabla S)^2 + WA = -A\frac{\partial S}{\partial t}, \quad (14.14)$$

$$-\frac{1}{2M}\{A\nabla^2 S + 2(\nabla A) \cdot (\nabla S)\} = \frac{\partial A}{\partial t}. \quad (14.15)$$

O segundo termo pode ser reescrito usando a densidade de probabilidade $P = |\Psi|^2 = A^2$, pois vale a equação de continuidade:

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\nabla \cdot (P \nabla S)}{M} = 0, \quad (14.16)$$

e com isso podemos escrever a primeira das equações na seguinte forma:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2M} + W + W_Q = 0, \quad (14.17)$$

em que:

$$W_Q = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\nabla^2 A}{A}, \quad (14.18)$$

que é chamado de **potencial quântico**, porque ele aparece na equação da mesma forma que o potencial ordinário W . A equação (14.17) tem uma forma parecida com a equação de Hamilton-Jacobi da mecânica clássica. Introduzindo o campo de velocidade:

$$\mathbf{x}(\mathbf{x}, t) = \frac{\mathbf{J}}{P} = \frac{\nabla S}{M}, \quad (14.19)$$

e tomando o gradiente da equação (14.17), teremos:

$$M \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + M(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} + \nabla(W + W_Q) = 0. \quad (14.20)$$

A partícula que segue o campo de velocidade da equação (14.19) seguirá a equação de movimento:

$$M \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla(W + W_Q). \quad (14.21)$$

Portanto, se $W_Q \rightarrow 0$ no limite $\hbar \rightarrow 0$, então a trajetória da partícula irá obedecer à segunda lei de Newton. Note, também, que a versão clássica da equação (14.17), a chamada equação de Hamilton-Jacobi, é dada por:

$$\frac{(\nabla S)^2}{2M} + W = -\frac{\partial S}{\partial t}, \quad (14.22)$$

em que S denota a função principal de Hamilton. A equação (14.17) só irá reproduzir a equação de Hamilton-Jacobi no limite em que W_Q se anula quando $\hbar \rightarrow 0$. O problema principal aqui é que este limite nem sempre vale ou, pior ainda, as vezes nem existe.

14.3 Trajetórias quânticas

Conforme vimos na seção anterior, as equações de Hamilton-Jacobi são formalmente capazes de gerar trajetórias a partir do potencial total $W + W_Q$, em que não há qualquer razão aparente para os casos em que W_Q se anula. Isso sugere que a M.Q. pode ser estendida para além do seu caráter puramente estatístico para descrever trajetórias microscópicas de partículas individuais.

A equação de continuidade garante que a densidade de probabilidade é assumida no ensemble de trajetórias quânticas tais que para algum tempo inicial t_0 ela coincide com o postulado $P = |\Psi|^2$, então esse movimento ao longo das trajetórias preserva esse argumento para todo o tempo $t > t_0$. Esse modelo de trajetórias determinísticas de partículas individuais é consistente com a previsão estatística e só coincide com o caso clássico se o potencial quântico se anular. Essa “versão” da teoria quântica foi introduzida por David Bohm, e para maiores detalhes sobre e sugerimos [41].

Outro fator não intuitivo do potencial quântico é que para alguns sistemas ele é diferente de zero mesmo para distâncias infinitamente grandes. Para o átomo de hidrogênio, cujo estado fundamental é $\psi(\mathbf{r}) = e^{-\alpha r}$, o potencial quântico será $W_Q(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2M} \left[\frac{2}{\alpha r} - 1 \right]$, o qual não vai a zero quando $r \rightarrow \infty$. Inicialmente este efeito foi visto como um erro fatal da teoria de Bohm. Entretanto, hoje sabe-se, através dos estudos de Bell, que veremos mais a frente, que estes efeitos não locais são inerentes à mecânica quântica.

A consequência mais importante da teoria de Bohm é a demonstração de que é logicamente possível vislumbrar condições microscópicas que levam ao resultado puramente probabilístico da mecânica quântica. Entretanto, o significado e relevância destas trajetórias, desses modelos microscópicos continua controverso.

14.4 O limite para grandes números quânticos

As discussões anteriores foram suficientes para provar que a busca por um limite clássico da mecânica quântica quando $\hbar \rightarrow 0$ obteve um sucesso parcial. Nessa seção analisaremos situações onde esperamos que a mecânica clássica seja válida, isto é, situações onde as variáveis dinâmicas, como momento, energia, são muito grandes se comparadas às unidades quânticas correspondentes.

Como primeiro exemplo, considere uma partícula em uma caixa unidimensional de paredes refletoras em $x = 0$ e $x = L$. Nesse caso o método da seção 14.2 falha miseravelmente. Resolvendo a equação de Schrödinger

para esse caso, encontramos os estados estacionários normalizados dados por $\psi(x) = (2/L)^{1/2} \sin(k_n x)$, com $k_x = n\pi/L$. Nesse estado quântico, a energia é $E = \hbar^2 k_n^2 / 2M$, e os dois valores de momento $p = \pm \hbar k_n$ são igualmente prováveis. Esses valores são os mesmos que no ensemble estatístico clássico.

Mas, por outro lado, a probabilidade clássica é uniforme no intervalo $0 < x < L$, e a densidade de probabilidade do estado quântico é $|\psi(x)|^2 = 2[\sin(k_n x)]^2 / L$. As oscilações muito rápidas dessa função são uma manifestação da interferência puramente quântica. Obviamente a densidade de probabilidade quântica não converge pontualmente para o valor clássico em nenhum limite. Mas, se calcular a probabilidade da partícula ser encontrada em algum intervalo pequeno:

$$Prob(a < x < a + \Delta x | \psi) = \int_a^{a+\Delta x} |\psi(x)|^2 dx, \quad (14.23)$$

essa sim irá convergir para o valor clássico, $\Delta x/L$, no limite em que $n \rightarrow \infty$, ou seja no limite de grandes números quânticos.

Esse exemplo nos permite concluir que a mecânica quântica não é uma extensão da mecânica clássica mas, sim, apenas repete os resultados clássicos quando as flutuações ocorrem depressa o bastante para serem anuladas. É por isso que se afirma que o mundo¹ fenomenológico **não é clássico** e sim, quântico. Ele apenas aparenta ser clássico em alguns dos seus fenômenos.

14.5 Aproximação de Wentzel, Kramers e Brillouin (WKB)

A equação de Schrödinger para estados estacionários em uma dimensão tem a forma:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2(x)\psi(x) = 0, \quad (14.24)$$

com:

$$k^2(x) = \frac{[E - W(x)]2M}{\hbar^2}. \quad (14.25)$$

É mais conveniente expressar a resposta em termos de duas soluções complexas linearmente independentes sem uso de condições de contorno. Para isso, usemos $\psi(x) = e^{i\phi(x)}$, tal que:

$$-\left(\frac{d\phi}{dx}\right)^2 + i\left(\frac{d^2\phi}{dx^2}\right) + k^2(x) = 0, \quad (14.26)$$

¹Entendemos, aqui, a palavra “mundo” como sendo o conjunto de sistemas que são passíveis de serem estudados pela física.

se o potencial W for constante, a solução será $\phi(x) = \pm kx$ com $k = \text{constante}$. Se $W(x)$ não for constante mas, por outro lado, variar lentamente na distância do comprimento de onda $\lambda = 2\pi/k(x)$, podemos esperar que $d^2\phi/dx^2$ seja pequeno comparado com os outros termos da equação (14.26). Como λ diminui quando E cresce, essa aproximação é válida no limite de grandes números quânticos. Para essa aproximação damos o nome de **método WKB** (ou, ainda, aproximação de Wentzel, Kramers e Brillouin).

Como uma primeira aproximação podemos desprezar o termo $d^2\phi/dx^2$ para obter:

$$\frac{d\phi}{dx} \approx \pm k(x). \quad (14.27)$$

Para obter a segunda aproximação, derivamos a equação anterior para obter $d^2\phi/dx^2 = dk(x)/dx$, tal que:

$$\frac{d\phi}{dx} = \pm k(x) + i \frac{dk/dx}{2k(x)}, \quad (14.28)$$

integrando de ambos os lados:

$$\phi(x) = \pm \int k(x)dx + \frac{i}{2} \ln[k(x)], \quad (14.29)$$

então a solução complexa aproximada, $\psi(x) = e^{i\phi(x)}$ será dada por:

$$\psi(x) = [k(x)]^{-1/2} \exp\left\{\pm \int k(x)dx\right\}, \quad (14.30)$$

e as soluções reais da função de onda serão da forma:

$$\Psi(x) = \frac{c}{[k(x)]^{1/2}} \cos\left\{\int k(x)dx + \varphi\right\}. \quad (14.31)$$

A constante φ será determinada pelas condições de contorno e c é uma constante de normalização.

14.6 Exercícios

Exercício 14.1 Resolva os exercícios do livro do Ballentine, [2].

