

## A Equação de Schrödinger

R. Galvão

Segundo a hipótese de Louis de Broglie, a dualidade onda-partícula se aplica tanto às ondas eletromagnéticas como à matéria. Uma partícula em movimento com momento  $p$  tem associada uma onda cujas frequência  $\nu$  e comprimento de onda  $\lambda$  são dadas em termos da energia total  $E$  da partícula e seu momento através das relações

$$E = h\nu ; \quad p = \frac{h}{\lambda}$$

No caso de fótons, como eles não têm massa, a relação clássica para ondas eletromagnéticas  $\nu = c/\lambda$  é coerente com a relação relativística  $E = pc$  (para partículas com massa de repouso  $m_0 = 0$ ). Se poderíamos então pensar que as 'ondas de matéria' de de Broglie são ondas do tipo ondas eletromagnéticas, em que a relação entre a frequência e o comprimento de onda seja simplesmente  $\nu = v/\lambda$ , onde  $v$  é a velocidade da partícula. É fácil de verificar que, mesmo para partículas não relativísticas, esta suposição está errada.

Consideremos, por exemplo uma partícula livre, ou seja, sem estar sujeita a um campo de forças, se deslocando com velocidade  $v$ . A energia da partícula é (para  $v \ll c$ )

$$E = \frac{1}{2} mv^2 = \frac{1}{2} v \cdot p \quad (p = mv)$$

Usando as relações de de Broglie, temos

$$Kv = \frac{1}{2} v \frac{h}{\lambda} \quad \therefore \quad v = \frac{1}{2} \frac{v}{\lambda}$$

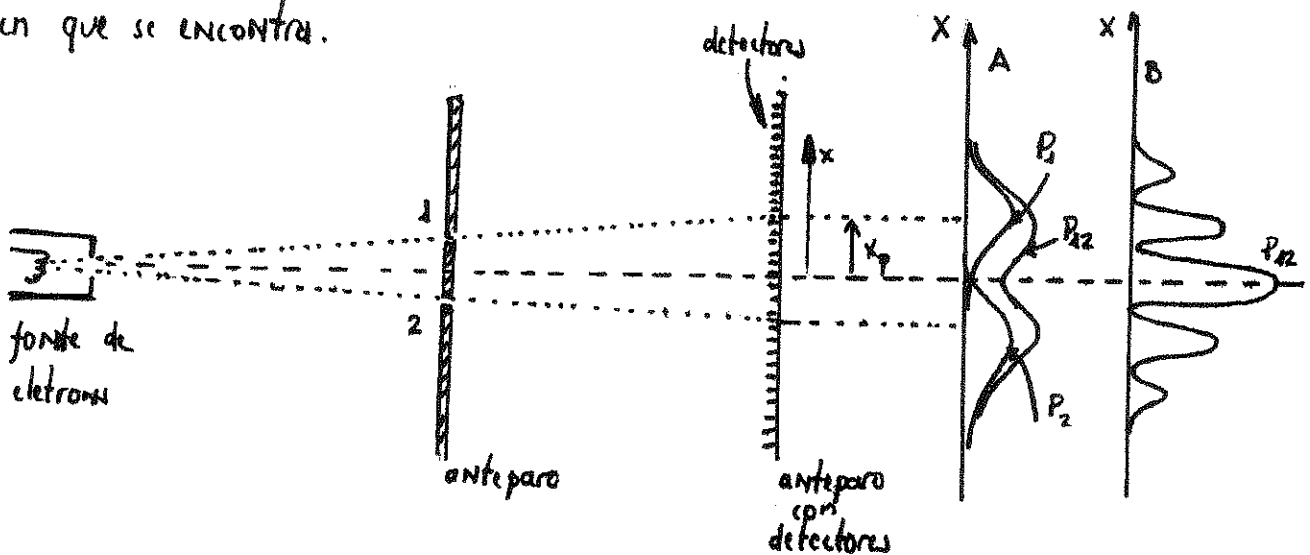
Portanto, a relação simples entre  $v$  e  $\lambda$  (chamada relação de dispersão) observada para os fótons não se aplica NEM MESMO às partículas livres. Além disso, quando uma partícula material está num campo de forças, sua energia inclui também a energia potencial e a relação entre  $v$  e  $\lambda$  é ainda bem mais complicada. Por outro lado, este exemplo simples para a partícula livre mostra que as 'ondas de matéria' de de Broglie NÃO são ondas eletromagnéticas ou ondas mecânicas excitadas num meio pela passagem da partícula. Naturalmente, a pergunta que nos vem à mente é o que são estas ondas de matéria e que equação elas devem satisfazer. São estes dois pontos que vamos discutir de forma breve.

### Caráter Probabilístico de uma Medida

Na interpretação moderna da Mecânica Quântica, o resultado de um experimento só pode ser quantificado em termos probabilísticos. Por exemplo se prepararmos um grande número de átomos de hidrogênio no estado excitado  $n=2$  e realizarmos um experimento para determinar o raio da órbita eletrônica

em cada átomo, não vamos encontrar apenas o valor  $r=4r_B$ , previsto pelo modelo de Bohr, mas sim uma distribuição de valores no entorno deste valor médio. Embora a noção de resultados probabilísticos de experimentos também ocorra em Mecânica Clássica, a maneira pela qual a probabilidade se manifesta em sistemas quânticos é bastante distinta e permite uma interpretação do que sejam as 'ondas de matéria'.

Um experimento que demonstra de forma bastante clara a dualidade partícula-onda é o experimento de interferência de duas fendas por um feixe de elétrons (os alunos interessados poderão encontrar uma descrição detalhada desta experiência na referência: P.G. Merli, G.F. Missiroli e G. Pozzi; American Journal of Physics, 44, p.306 (1976)). Conforme esquematizado na figura, um feixe de elétrons de baixa energia é dirigido a um anteparo com duas fendas. Atrás deste anteparo é colocado um segundo, no qual é instalado um conjunto de detectores. Cada detector registra os elétrons que chegam a posição  $x$  em que se encontra.



Como os detectores são detectores de partículas, cada vez que um elétron é detectado ele está manifestando seu caráter de partícula, ou de um 'quantum' de energia.

As curvas  $P_1$  e  $P_2$  no gráfico A mostram as <sup>distribuições de probabilidade</sup> das posições dos elétrons detectados no anteparo quando a fenda 1 está aberta e a 2 fechada (curva  $P_1$ ) e quando a fenda 1 está fechada e a 2 aberta (curva  $P_2$ ). Estas duas curvas mostram uma distribuição de valores de  $x$  com um máximo no valor mais provável,  $x_p$ , que é o valor de visada direta da fonte, através das fendas, até o segundo anteparo. Este resultado é esperado classicamente porque, naturalmente os elétrons não se deslocam em linha reta da fonte até o segundo anteparo, segundo a linha de visada direta. Alguns, por exemplo, podem colidir com as bordas das fendas, se desviando da trajetória original.

Quando as duas fendas 1 e 2 estão simultaneamente abertas, ou o elétron passa por uma ou por outra fenda. Portanto, os dois eventos, de passar por uma ou outra fenda, são mutuamente exclusivos. Neste caso, a regra <sup>clássica</sup> para calcular a probabilidade dos elétrons passarem por uma ou outra fenda é simplesmente  $P_{12} = P_1 + P_2$ , conforme a curva  $P_{12}$  mostrada no gráfico A. O resultado experimental, no entanto, é bastante distinto. A curva  $P_{12}$  apresenta claramente um padrão de franjas de interferência, conforme mostrado no gráfico B.

Neste ponto é interessante recordar brevemente a interferência de ondas eletromagnéticas, que estudamos neste curso. Para que ocorra a

interferência entre duas ondas eletromagnéticas, é necessário que haja uma defasagem entre as amplitudes dos campos  $E_1$  e  $E_2$ , das duas ondas, no ponto onde elas são detectadas. A energia transportada por cada onda (por unidade de área e de tempo) é dada pela sua intensidade  $I \sim E^2$ . Para calcular a intensidade resultante no anteparo, não somamos a intensidade de cada onda,  $I_1 \sim E_1^2$  e  $I_2 \sim E_2^2$ , ou seja,  $I_R \neq I_1 + I_2$ . Ao invés, calculamos a amplitude do campo resultante  $E_R = E_1 + E_2 \cos \delta$ , onde  $\delta$  é a defasagem entre os dois campos, e calculamos a intensidade resultante  $I_R \sim |E_R|^2$ . O termo cruzado entre  $E_1$  e  $E_2$ , que é proporcional a  $\cos \delta$ , é que vai dar origem à figura de interferência.

Como a distribuição de partículas no anteparo apresenta uma figura de interferência, somos levados a supor que a probabilidade de um elétron passar por uma determinada fenda é proporcional ao quadrado de uma amplitude de onda, que passaremos a denominar função de onda  $\Psi$ . Para calcular a probabilidade do elétron passar por uma ou por outra fenda, calculamos a função de onda  $\Psi_{12} = \Psi_1 + \Psi_2$ , onde  $\Psi_1$  é a função de onda correspondente ao elétron passar pela fenda 1 e  $\Psi_2$  é a função de onda correspondente ao elétron passar pela fenda 2. A probabilidade  $P_{12}$  é então proporcional a  $|\Psi_{12}|^2$ . A 'onda de matéria' de de Broglie é portanto interpretada, na Mecânica Quântica moderna, como uma onda de amplitude de probabilidade. Isto nos leva à seguinte definição

## Função de Onda

Em Mecânica Quântica associamos a uma partícula (ou, de uma forma mais geral, a um sistema quântico) uma função de onda

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(x, y, z; t)$$

tal que a probabilidade de se observar a partícula dentro de um volume elementar  $dV = dx dy dz$ , no entorno do ponto  $(x, y, z)$ , no instante  $t$ , é dada por

$$P(\vec{r}, t) = \int |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dx dy dz$$

(Tomamos  $P$  proporcional ao quadrado do valor absoluto de  $\Psi$  porque, no caso geral,  $\Psi$  pode ser uma função complexa e a probabilidade tem que ser uma grandeza real).

Esta definição da função de onda nos indica que ela tem que ser uma função 'quadrático-integrável'. Por exemplo, se soubermos que uma partícula está aprisionada numa caixa côrda, de lado  $a$ , com paredes impenetráveis, a probabilidade de encontrar a partícula em um ponto qualquer dentro da caixa tem que ser 1. Neste caso teríamos que impor a seguinte condição sobre  $\Psi(\vec{r}, t)$ :

$$\int_{-a/2}^{a/2} dz \int_{-a/2}^{a/2} dy \int_{-a/2}^{a/2} dx |\Psi(x, y, z; t)|^2 = 1.$$

## Equação de Schrödinger

Como a probabilidade de se encontrar uma partícula num certo instante  $t$  numa certa posição  $(x, y, z)$  é proporcional ao quadrado da função de onda  $\Psi(x, y, z; t)$ , esta função transporta informação. Por outro lado, como duas funções de onda correspondentes a situações físicas distintas (electron passar por uma ou por outra fenda) produzem efeitos de interferência característicos de ondas (electromagnéticas, mecânicas, acústicas, etc.) é plausível supor que  $\Psi(x, y, z; t)$  deva satisfazer uma equação de onda (ondas transportam informação e apresentam interferência). Baseado em argumentos simples deste tipo e <sup>em</sup> um grande grau de intuição física, o físico austríaco Erwin Schrödinger propôs em 1926 uma equação para a função de onda que se tornou a base fundamental de todos os cálculos em Mecânica Quântica. Esta equação, denominada Equação de Schrödinger, não pode ser derivada rigorosamente a partir de princípios mais fundamentais. Mesmo assim, vamos apresentar uma 'mostração' da equação de Schrödinger que permite visualizar os princípios físicos nela envolvidos. Para facilitar, vamos inicialmente considerar apenas o caso unidimensional, ou seja, vamos supor que a partícula se desloca apenas ao longo do eixo  $x$ , de forma que  $\Psi$  dependa somente das variáveis  $x$  e  $t$ . Depois generalizaremos para o caso tri-dimensional.

Se  $\Psi(x, t)$  se comporta como uma onda, ela deve satisfazer

a equação de onda em uma dimensão

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{1}{v_f^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = 0$$

onde  $v_f = \lambda \nu$  é a 'velocidade de fase' da onda  $\Psi(x,t)$ . Nós ainda não conhecemos  $v_f$ , mas sabemos que  $\nu$  e  $\lambda$  têm que satisfazer os postulados de de Broglie:

$$E = h\nu$$

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

Por outro lado, considerando apenas partículas não-relativísticas e supondo que, no caso mais geral, elas podem estar sujeitas a um campo de forças caracterizado pelo potencial  $V(x)$ , temos que a energia total  $E$  da partícula é dada por

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

A relação entre energia e frequência pode ser incorporada de uma forma bastante natural na equação de onda para  $\Psi(x,t)$ . Como uma onda representa uma função que oscila sinusoidalmente num determinado ponto, fazemos a hipótese de que  $\Psi(x,t)$  possa ser escrito como

---

$$\Psi(x,t) = \psi(x) e^{-i\omega t}$$



onde  $\omega = 2\pi\nu = 2\pi \frac{E}{h} = \frac{E}{\hbar}$  e a função  $\psi(x)$  não depende do tempo.

Substituindo na equação de ondas, obtemos

$$e^{-i\omega t} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{\omega^2}{v_f^2} \psi e^{-i\omega t} = 0 \quad \therefore \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{\omega^2}{v_f^2} \psi = 0$$

Mas

$$\frac{\omega^2}{v_f^2} = \frac{(2\pi)^2}{\lambda^2} = \frac{p^2}{\hbar^2},$$

pela segunda relação de de Broglie. Finalmente, usando a relação entre  $p$  e  $E$  dada pela conservação de energia,  $p^2 = 2m[E - V(x)]$ , obtemos a Equação de Schrödinger

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi}$$

### Notas importantes

i) A solução da equação acima (formalmente denominada Equação de Schrödinger Independente do Tempo) só fornece a dependência espacial da função de onda,  $\psi(x)$ . Para obter a função de onda completa temos que multiplicá-la por  $e^{-i\omega t}$ :

$$\Psi(x,t) = \psi(x) e^{-i\omega t}$$

ii) Como a equação de Schrödinger é uma equação diferencial de 2ª ordem sua solução geral terá sempre duas constantes arbitrárias. Estas constantes são determinadas por condições de contorno:

1. Se uma região for inacessível para uma partícula ( $V \rightarrow \infty$ ),  $\psi(x) = 0$  nesta região.
2. Para potenciais finitos, mesmo descontínuas em alguns pontos  $\psi(x)$  e  $d\psi/dx$  têm que ser contínuas.

iii) Se o problema for tri-dimensional, ou seja, o potencial varia com as três coordenadas, a equação de Schrödinger para  $\psi(x, y, z)$  fica

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z) \psi = E \psi$$

iv) Em problemas que representam partículas armadilhadas, ou seja,  $E < V$ , as condições de contorno só serão todas satisfeitas para valores discretos de  $E$ , representando a quantização da energia.

v) A amplitude da função de onda é determinada pela condição

$$\int |\psi(x, y, z)|^2 dV = 1$$

em todo o espaço acessível ao sistema quântico.