**UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL**
**Instituto de Física**
**Departamento de Física**
**Disciplina: Física do Século XX A**
**Prof. César Augusto Zen Vasconcellos**

**LISTA TEMÁTICA E DE PROBLEMAS No. 11 – Equação de SCHRÖDINGER (ERWIN SCHRÖDINGER()1887-1961).** Ondas harmônicas progressivas; a necessidade de uma equação de onda; propriedades da equação de SCHRÖDINGER; equação de SCHRÖDINGER de partícula livre em uma dimensão; operadores. Equação de SCHRÖDINGER de partícula livre em três dimensões; inclusão de forças externas na equação de SCHRÖDINGER; plausibilidade da teoria de SCHRÖDINGER; interpretação estatística/probabilística da função de onda $\psi$; normalização da função de onda $\psi$.

---

**Ondas Harmônicas Progressivas:** De acordo com a hipótese de De Broglie, uma partícula tem natureza dual do tipo onda-partícula. Consideremos uma onda harmônica progressiva contínua associada à propagação de uma partícula; seu momentum p e seu comprimento de onda $\lambda$ estão então relacionados na forma: $\lambda=h/p$. Similarmente, sua energia, E, e sua freqüência da onda progressiva, f, estão relacionadas na forma E=hf. Escrevemos ambas as equações em termos da constante universal $\hbar$, obtendo $p=\hbar k$ e $E=\hbar w$, com $k=2\pi/\lambda$ e $w=2\pi f$. Uma **função de onda $\psi$(x,t)** que represente uma partícula se propagando com energia e momentum bem definidos (e portanto, pelo princípio da incerteza, com sua posição no espaço-tempo completamente indefinida), poderia ser representada por uma das seguintes formas funcionais: $e^{i(kx-wt)}$; $e^{-i(kx-wt)}$ ou através de combinações lineares destas expressões. **A Necessidade de uma Equação de Onda:** A necessidade de uma equação de onda se impõe com base no seguinte: desejamos descrever não somente os casos mais simples de propagação de partículas elementares como, por exemplo, aqueles envolvendo soluções harmônicas. Necessitamos uma teoria mais completa que contemple não somente a simples propagação de partículas elementares livres como também as suas interações (dinâmica) com outras partículas ou sistemas físicos. **Propriedades da Equação de Schrödinger:** Consideremos inicialmente apenas a propagação de uma partícula não-relativística livre. A equação que descreve a propagação da partícula deve ser linear e seus coeficientes devem envolver somente constantes como, por exemplo, $\hbar$, m (massa da partícula) e q (carga elétrica da partícula). Isto porque: em sendo linear, a equação possibilita a utilização do **princípio da superposição** e com isto a construção de pacotes de ondas; ao conter como coeficientes apenas constantes, a equação não dependerá, em forma paramétrica, de grandezas que caracterizam um particular movimento de uma partícula como, por exemplo, uma dependência destes coeficientes em valores específicos de momentum, energia, número de propagação (número de onda) e freqüência angular. Isto possibilita que soluções que caracterizem diferentes valores destas grandezas possam ser consideradas; em suma, guiados pela necessidade de generalização, desejamos eliminar dos coeficientes da equação qualquer dependência paramétrica em energia, momentum linear, número de onda e freqüência angular, pois uma solução geral não pode ser função de parâmetros cinemáticos específicos particulares. Uma função de onda familiar é a equação que descreve por exemplo o movimento de ondas transversais em uma corda ou ondas do som em um gás: $\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}=\gamma\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$ onde o coeficiente $\gamma$ representa a velocidade de propagação da onda ao quadrado. Combinando-se qualquer uma das expressões $e^{i(kx-wt)}$ ou $e^{-i(kx-wt)}$ com esta equação de onda resulta $v^2=\frac{w^2}{k^2}=\frac{E^2}{p^2}=\frac{p^2}{4m^2}$ onde m é a massa da partícula. Uma vez que esta equação não obedece a segunda restrição imposta à equação de onda, pois o coeficiente da equação depende de parâmetros do movimento (E ou p), descartamos esta equação como candidata a descrever a propagação de partículas massivas.

**Equação de Schrödinger de Partícula Livre em uma Dimensão:** A equação de Schrödinger descreve então o movimento e a dinâmica de partículas massivas. Proposta em 1925 por Erwin Schrödinger, esta equação, que é análoga à equação de onda clássica vista anteriormente, relaciona as derivadas da **função de onda** em relação ao tempo e ao espaço. Para compreende-la, façamos o seguinte. Consideremos uma solução harmônica do tipo $\psi(x,t) = e^{i(kx-wt)}$. Diferenciando esta expressão em relação ao tempo, obtemos $\frac{\partial e^{i(kx-wt)}}{\partial t} = -iwe^{i(kx-wt)}$. Diferenciando duas vezes a mesma expressão com respeito a x, se obtém: $\frac{\partial^2 e^{i(kx-wt)}}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} ike^{i(kx-wt)} = -k^2 e^{i(kx-wt)}$.Multiplicando a primeira destas expressões por $i\hbar$, resulta $i\hbar\frac{\partial e^{i(kx-wt)}}{\partial t} = \hbar we^{i(kx-wt)}$.Multiplicando por $-\hbar^2/2m$ a segunda expressao, obtemos: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 e^{i(kx-wt)}}{\partial x^2} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x} ike^{i(kx-wt)} = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 e^{i(kx-wt)}$. Uma vez que a relação entre a energia cinética e o momentum linear de uma partícula não-relativística livre é dada por: $E=p^2/2m$, usando as relações de De Broglie, obtemos $E=\hbar w=\hbar^2k^2/2m$ e portanto das expressões acima resulta $\hbar we^{i(kx-wt)} = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 e^{i(kx-wt)}$, ou em forma compacta, $\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} = i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}$. Esta é a equação de Schrödinger. Como vemos, a equação de Schrödinger é uma equação ondulatória do tipo $\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \gamma\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$ onde o coeficiente $\gamma$ depende somente das constantes $\hbar$ e m. Escolhemos de fato a função complexa $e^{i(kx-wt)}$ para exemplificar uma solução da equação de Schrödinger porque a derivada primeira no tempo desta expressão resulta na freqüência w multiplicada pela própria função, diferentemente do que ocorre com funções puramente do tipo seno ou coseno, tornando assim mais transparente a "derivação" da equação de Schrödinger. E o fato desta função ser complexa deve-se ao fato de que os **observáveis**, que são grandezas reais, são representados, na teoria de Schrödinger, de forma consistente com a observação experimental. **Operadores:** A comparação da equação de Schrödinger $\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} = i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}$ com a relação $E=p^2/2m$ sugere as seguintes relações entre a energia, E, e o momentum linear, p, com operadores diferenciais: $E\Rightarrow i\hbar\partial/\partial t$ e $p\Rightarrow -i\hbar\partial/\partial x$, pois, usando estas representações resulta: $E\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial\Psi}$ e $\frac{p^2}{2m}\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}$, ou seja, resulta a equação de Schrödinger. Estes operadores diferenciais (e outros similares a estes) ocupam papel relevante na mecânica quântica. É importante ressaltar que estes operadores, que desempenham papel de representação da energia e do momentum na teoria quântica, são representações também válidas quando a partícula considerada não é livre. E é pela a ação destes operadores sobre a função de onda que resultam os correspondentes observáveis, E e p.

**Equação de Schrödinger de Partícula Livre em Três Dimensões:** A extensão deste formalismo para três dimensões se torna muito simples, desde que utilizemos as seguintes representações operatoriais: $E \Leftrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ e $\vec{p} \Leftrightarrow -i\vec{\nabla}$. Neste caso, a onda harmônica equivalente à expressão apresentada na parte inicial do texto toma a forma: $e^{i(\vec{k}.\vec{r}-wt)}$ e a

equação de Schrödinger deve ser escrita como $i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\Psi(\vec{r},t)$. **Inclusão de Forças Externas na E quação de Schrödinger:** O passo seguinte neste desenvolvimento formal é o de incluir na equação de Schrödinger a presença de forças externas. Consideramos por simplicidade apenas uma força externa (que pode ser a resultante de um conjunto de forças externas de natureza elétrica, ou nuclear ou eletromagnética, por exemplo), derivada de uma energia potencial, representada por uma grandeza real, V(**r**,t), tal que : $\vec{F}(\vec{r},t)=-\vec{\nabla}V(\vec{r},t)$. A relação clássica envolvendo a energia da partícula se torna agora $E=\frac{\vec{p}}{2m}+V(\vec{r},t)$ e a equação de Schrödinger correspondente pode ser expressa, ao concebermos a possibilidade de haver uma forma operatorial para a energia potencial V, na forma:
$\frac{-\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\psi(\vec{r},t)+V(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)=i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t}$. **Plausibilidade da Teoria de Schrödinger:** É evidente que os argumentos apresentados não são suficientes para dar à teoria de Schrödinger um alto grau de plausibilidade pois estas argumentações, utilizadas para uma espécie simplificada de *derivação* da equação, não têm uma base formal consistente. Ocorre que a equação de Schrödinger não pode ser derivada com base em argumentos fundamentais baseados, por exemplo, em **simetrias físicas** ou em **leis de conservação**, ou ainda em ***primeiros princípios***, pois a equação tem uma base muito mais fenomenológica do que formal. Em particular, a equação de Schrödinger não representa uma forma **invariante de Lorentz**, não sendo portanto válida no contexto da relatividade especial. Entretanto, é a concordância de suas predições com a experimentação que demonstra a sua validade e a sua utilidade na mecânica quântica. Como vimos anteriormente, Einstein introduziu uma nova interpretação para a teoria dos quanta de Planck como revelando a existência dos fótons, partículas que compõem a radiação eletromagnética e propôs que a energia de um fóton seria proporcional à sua freqüência, introduzindo assim o aspecto da dualidade onda-partícula. E uma vez que a energia e o momentum linear de um fóton estão associados à sua freqüência e ao seu número de onda, De Broglie apresentou a hipótese de que partículas massivas obedecem relações idênticos às do fóton. Supondo que as ondas associadas às partículas massivas viajam ao longo de trajetórias clássicas, ele demonstrou que elas podem compor ondas estacionárias que correspondem a freqüências discretas e a níveis discretos de energia. Seguidor destas idéias, Schrödnger decidiu contruir uma equação de onda para o elétron, guiando-se por uma analogia ao Princípio de Hamilton da mecânica clássica aplicado à Ótica. Na física, o Princípio da Mínima Ação, Princípio do Menor Esforço, ou ainda Princípio de Hamilton, representa um pressuposto básico da mecânica clássica ao descrever a evolução, ao longo do tempo, do estado de uma partícula ou de um sistema. O Princípio estabelece que a ação (uma função escalar cuja unidade de medida é definida na forma 'energia vezes tempo') correspondente possui um valor estacionário (máximo ou mínimo) (a natureza é econômica em todas as suas ações).

**Interpretação Estatística/Probabilística da Função de Onda $\psi$ - I :** Admite-se que função de onda **$\psi$(r,t)**, solução da equação de Schrödinger, representa uma descrição quantum-mecânica completa do comportamento de uma partícula de massa m sob a ação de um potencial ***V(r,t)***. Supomos que uma interpretação estatística possa ser associada a

---

$\psi$**(r,t)**, ou seja que $\psi$**(r,t)** tenha valores apreciáveis na região onde a partícula tenha maior probabilidade de ser encontrada e valores nulos ou próximos a zero nas demais regiões. Esta interpretação probabilística exige entretanto uma base formal que dê suporte à concepção probabilística. E esta base formal pode ser desenvolvida da seguinte forma. Uma vez que, como resultado do Princípio da Incerteza, a determinação da posição da partícula é incerta por um valor da ordem das dimensões da função de onda, é natural supor que a própria $\psi$**(r,t)** representa a probabilidade de encontrarmos a partícula em uma posição particular do espaço-tempo. Entretanto, probabilidades são grandezas reais e não-negativas enquanto que a função de onda $\psi$**(r,t)** pode ser uma grandeza complexa. Definimos então uma grandeza denominada de conjugado complexo de $\psi$**(r,t)**, grandeza esta representada por $\psi$***(r,t)**, de forma que o produto $\psi^*(r,t)\psi(r,t)$ seja uma quantidade positiva definida, isto é $\psi^*(r,t)\,\psi(r,t) = |\psi(r,t)|^2$. (Por exemplo: $\psi(r,t) \sim ae^{ikr}$ e $\psi^*(r,t) \sim ae^{-ikr}$ sendo a uma constante; daí resulta que $|\psi(r,t)|^2 = a^2$.) Na mecânica quântica, ***P(r,t)*= |*ψ(r,t)*|²** *representa a* ***densidade de probabilidade*** *de encontrar uma partícula em um elemento de volume dxdydz em torno de um ponto* ***r*** *no tempo t, quando um número grande de medições sobre a posição de partículas independentes é realizado, cada uma destas partículas sendo descrita por uma* ***função de onda de partícula única*** *$\psi(r,t)$*. **Normalização da Função de Onda $\psi$:** A probabilidade de se encontrar a partícula em algum lugar da região física considerada deve ser igual a 100%. Portanto, $\int_V |\Psi(\vec{r},t)|^2\, d^3r = 1$, sendo que a integral se estende por toda a região física em questão; $d^3r$ representa por sua vez o elemento infinitesimal tri-dimensional de volume dxdydz. Consideramos ademais o volume V como arbitrariamente grande podendo ser até mesmo infinito. É preciso ressaltar que o conceito de normalização pressupõe que a integral acima converge e que portanto a condição de normalização pode ser obtida através de ajuste apropriado dos coeficientes da função de onda. Há funções entretanto que não convergem quando tomamos integrais das mesmas considerando volumes de extensão infinita. Este é o caso por exemplo da função $e^{i(\vec{k}.\vec{r}-wt)}$. Funções como esta exigem considerações especiais de normalização como veremos no futuro. **Interpretação Estatística/Probabilística da Função de Onda $\psi$ - II:** O(s) coeficiente(s) de $\psi$**(r,t)** que normalizam a função de onda devem ser independentes do tempo pois a função de onda deve satisfazer a equação de Schrödinger. Assim, se a condição de normalização é satisfeita em um dado instante de tempo, essa condição deve ser satisfeita para qualquer outro instante de tempo. Isto significa que a integral de normalização deve ser invariante no tempo: $\frac{\partial}{\partial t}\int_V |\Psi(\vec{r},t)|^2\, d^3r = \frac{\partial}{\partial t}1 = 0.$ Definindo a **densidade de corrente vetorial de probabilidade** $\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\vec{\nabla}\psi^*(\vec{r},t))\psi(\vec{r},t) - \psi(\vec{r},t)^*(\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t))\right)$, destas equações resulta a equação de continuidade (de probabilidade): $\frac{\partial P(r,t)}{\partial t} + \vec{\nabla}.\vec{J} = 0$. Esta equação, ao ser obtida diretamente da equação de Schrödinger, representa um argumento importante de consistência formal da interpretação probabilística da função de onda; isto porque esta condição representa uma equação de conservação de probabilidade, isto é, a variação no tempo da densidade de probabilidade é igual, com sinal contrário, à variação espacial da densidade de corrente de probabilidade (na realidade ao divergente do vetor densidade de corrente de probabilidade). (Note-se que a expressão formal da equação da continuidade é similar à expressão correspondente à lei de conservação de fluxo na dinâmica de fluidos, sem fontes nem sumidouros, em que P representa a densidade do fluido e **J** a densidade de corrente.) Esta interpretação torna mais plausível a identificação de $-\mathbf{i}\hbar\vec{\nabla}$ com o operador de momentum linear, uma vez que o segundo termo da equação da continuidade está associado, na dinâmica de fluidos com a velocidade do fluxo de um fluido.

**Problemas**

1. Deduza a **equação de Schrödinger** usando como solução a expressão $\Psi(\vec{r},t) = \sum_j A_j e^{i(\vec{k}_j\cdot\vec{r}-w_j t)}$.
2. Deduza a **equação de continuidade de probabilidade** a partir da equação de Schrödinger no caso de uma partícula livre e no caso da presença de uma energia potencial. Qual a suposição que deve ser feita a respeito da energia potencial para que a equação de continuidade seja válida na forma apresentada no texto? Explique a equação de continuidade em termos de concepção probabilística.
3. Como a equação de onda clássica, a equação de Schrödinger é também linear. Por que isto é importante? Existe alguma relação entre a **hipótese de De Broglie** e a **equação de Schrödinger**? Explique. Explique o significado de **normalização da função de onda.**
4. Mostre que, para uma partícula livre de massa m que se propaga em uma dimensão, a função $\psi(x,t)$=Asenkx+Bcoskx, é **solução da equação de Schrödinger** para qualquer valor das constantes A e B. Considere A=B e proceda à normalização da função de onda. Os dados apresentados no problema são suficientes para proceder à **normalização** da função de onda. Construa a correspondente **equação de continuidade de probabilidade**.
5. **Separação das funções de tempo e espaço em $\psi$(r,t)**. Nos problemas em que a energia potencial não varia com o tempo, é possível expressar a função de onda em uma forma separável em função do tempo e do espaço. Isto é, podemos expressar $\psi(r,t)$ na forma de um produto $\psi(r,t)=\chi(r)\varphi(t)$, onde o primeiro termo depende somente da coordenada espacial e o segundo termo da coordenada temporal. Isto permite a simplificação formal da equação de Schrödinger. Considere o problema unidimensional em que uma partícula sofre a ação de um potencial V(x) e mostre que, à partir desta separação, resultam as seguintes expressões: $\varphi(t)=e^{-iEt/\hbar}$ e $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\chi(x)}{\partial x^2}+V(x)\chi(x)=E\chi(x).$ Esta última expressão define a equação de Schrödinger independente do tempo.
6. Não existe nenhum fator $\mathbf{i}=\sqrt{-1}$ na equação de Schrödinger independente do tempo obtida no problema anterior. Isto significa que **$\psi$(r,t)** <u>deve</u> ser real? **$\psi$(r,t)** <u>pode</u> ser real?