

EQUAÇÕES DE SCHRÖDINGER

Denilson Boff¹

RESUMO

Em 1926, o físico austríaco Erwin Schrödinger (1887-1961) publicou quatro trabalhos nos quais desenvolveu a sua famosa Mecânica Quântica Ondulatória, cujo resultado principal é a equação para as órbitas estacionárias dos elétrons atômicos, a igualmente famosa equação de Schrödinger. Em relação ao trabalho de Bohr, o trabalho de Schrödinger foi bem mais completo. Uma vez que previa que as autofunções são correspondentes a cada autovalor, prevê o cálculo da probabilidade de um determinado estado, prevê também o cálculo da probabilidade de transição de um estado para outro e calcula os momentos angulares.

Palavras-chave: Física quântica. Energia. Schrödinger.

ABSTRACT

In 1926, the Austrian physicist Erwin Schrödinger (1887-1961) published for work in which he developed famous mechanical quantum ondulatory, the principal result and the equation for the stationary orbits the electro Kursk, the also famous equation of Schrodinger. In relation to the work of Bohr, the work of Schrödinger was much more complete. Once that allowed the auto equation are corresponding to each eigenvalue, provides for the calculation of the likelihood of a particular state, also provides for the calculation of the probability of transition from one state to another and calculates the angular moments.

Keywords: Quantum Physics. Energy. Schrödinger.

¹ <http://lattes.cnpq.br/2812122698789201>

1 INTRODUÇÃO

A partir do século XVIII, a mecânica de Newton foi vista como o problema de uma teoria verdadeira, de uma teoria que proporcionava uma descrição genuína do mundo real. É verdade que o século XIX havia fornecido exemplos de teorias perfeitamente científicas – a teoria do calórico ou a teoria corpuscular da luz – as quais havia sido necessária finalmente renunciar, e já se podia supor que os saberes adquiridos da física não são jamais definitivos. Ao obrigar os físicos a rejeitar componentes fundamentais da teoria de Newton; como sua lei da gravitação e a relação constante entre a força e aceleração, a teoria da relatividade desfechava um golpe fatal nesse último alicerce da certeza científica.

A teoria da relatividade marcou, de fato, o início de uma revolução que abalou não somente a mecânica de Newton como também as próprias bases do ilustre edifício da física do final do século XIX. Hoje designamos os três pilares desse edifício; a mecânica, a termodinâmica e o eletromagnetismo, sob o nome de teorias da física clássica, para distingui-los das teorias da física moderna que os substituíram no século XX, ou seja, as duas teorias da relatividade e a mecânica quântica.

Einstein descobriu ainda outro resultado importante: a emissão de um quantum luminoso e o recuo correlativo do átomo que o emitiu é um processo aleatório; tal processo que tem uma probabilidade de ocorrência bem definida, mas é possível prever o instante preciso em que ele sobrevêm. O conceito de partícula de luz, ou fótons como se havia começado a chamá-las, foi finalmente aceito por um número crescente de físicos. Posteriormente Arthur Compton mostrou que, em sua interação com elétrons, um feixe luminoso se comporta como um conjunto de partículas individuais desviadas por colisões com os elétrons. Esse efeito Compton praticamente pôs fim a toda oposição ao conceito de fóton.

Nesse meio tempo, os quanta haviam feito sua aparição em outro campo da física. Rutherford já havia sugerido em 1911 que o átomo se compõe de um pequeno núcleo em torno do qual gravitam elétrons, à maneira dos planetas em torno do sol. Este modelo, porém, apresentava um inconveniente. Segundo as equações de Maxwell, uma partícula carregada em movimento circular emite ondas eletromagnéticas e perde assim sua energia. Os elétrons de todos os átomos do

universo deveriam, portanto “cair” sobre seus núcleos em um tempo extremamente breve, o que não ocorre pelo fato dos átomos serem estáveis.

Em 1913, Niels Bohr propôs um modelo atômico, mais precisamente um modelo de átomo de hidrogênio, que, se não justificava a estabilidade dos átomos, fornecia uma descrição precisa deles. O hidrogênio é o mais simples dos átomos; é constituído por um próton em seu núcleo e em torno do qual orbita um elétron. Bohr supôs que esse elétron se move unicamente em uma família discreta de órbitas, isto é, aquelas que a quantidade em que a quantidade de movimento do elétron multiplicada pela circunferência de sua órbita é um múltiplo inteiro da constante de Planck. Em cada um dessas órbitas permitidas, o elétron possui certa energia. O elétron encontra-se em geral na órbita de energia mínima, a mais próxima do núcleo. Se absorve um fóton, ele muda para outra órbita permitida, cuja energia é igual à da órbita de partida aumentada da energia do fóton absorvido. Após certo tempo, o elétron retorna a sua órbita original, emitindo um fóton de energia igual a do fóton incidente. Uma vez que, segundo a fórmula de Planck, a energia de um fóton determina a frequência da onda luminosa que lhe é associada, Bohr calculou as frequências das ondas luminosas absorvidas ou emitidas pelo átomo de hidrogênio e encontrou os valores experimentalmente conhecidos na sua época. Porém Bohr não conseguia explicar porque somente certas órbitas eram permitidas, nem como se efetuavam as transições entre órbitas. Essas pareciam corresponder a “saltos” instantâneos, que não poderiam ser justificados por nenhum movimento contínuo.

Em 1924, Louis de Broglie explicou a existência das órbitas discretas de Bohr postulando, por simetria com o comportamento corpuscular das ondas luminosas, que as partículas materiais possuem um comportamento corpuscular das ondas luminosas, que as partículas materiais possuem um comportamento ondulatório e que devemos, portanto associar uma onda ao movimento de cada partícula. Partindo de considerações inspiradas na teoria da relatividade especial, mas que desapareceu na formulação mais tardia da teoria quântica, ele estabeleceu em seguida uma fórmula que ligava a quantidade de movimento do elétron ao comprimento de onda que lhe é associado, depois supôs que o movimento do elétron no átomo é análogo a uma onda que envolve circularmente o núcleo, uma vez unida na fórmula de de Broglie, essa injunção fornece as órbitas permitidas do modelo de Bohr. Em 1925, seu postulado recebeu a confirmação experimental direta

quando Clinton Davisson demonstrou que um feixe de elétron que atravessa um cristal metálico dá origem a uma figura de difração característica de ondas que verificam a fórmula de Broglie. Isso levou, a identificar o comportamento dual da partícula.

A teoria que se tornou a pioneira nesse campo foi à mecânica das matrizes, elaborada por Werner Heisenberg, e aperfeiçoada por Wolfgang Pauli, Paul Dirac, Max Born e outros. Essa postura se baseou principalmente nas relações de energia dos sistemas de interação entre as mesmas partículas, e atribuindo às grandezas mecânicas (posição, momentum, velocidade, energia, etc.) o caráter de operadores com autovalores que indicavam exatamente as situações de estabilidade identificadas anteriormente. A teoria, embora bastante abstrata, foi muito bem aceita por que generalizava de maneira satisfatória a interpretação dos resultados experimentais acima descritos.

Quase simultaneamente apareceu uma segunda formalização desta mecânica, a qual o presente artigo pretende apresentar com mais afinidade matemática, agora com uma equação diferencial descrevendo uma propagação ondulatória, elaborada por Erwin Schrödinger. A integração dessa equação diferencial dá uma função $\psi(x, y, z, t)$ que rege toda a informação (posição, energia, velocidade, momento linear ou angular, etc.) que se pode obter a respeito do estado da partícula, sem que a mesma, a função ψ , tenha um significado físico, por ser complexa. Embora na época se visse com reservas a adoção de uma grandeza de tão incômoda interpretação, os resultados encontrados se mostraram extremamente animadores. Ainda, o resultado da operação $\int \psi \cdot \psi^* dv$, estendida a um volume V , tem interpretação física: é a probabilidade de se encontrar a partícula (cuja função descritiva é ψ de complexo conjugado ψ^*) dentro do volume V ; portanto, a integral abarcando um volume infinito (todo o universo!) deve ser igual a 1. Outra consequência: a posição média da partícula (\underline{x}) é dada por $\int \psi x \psi^* dv$.

2 EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER PARA ÁTOMOS DE UM ELÉTRON

Como a equação de onda clássica, a equação de Schrödinger é uma equação diferencial parcial no espaço e tempo, de mesmo modo como as leis do movimento de Newton, a equação de Schrödinger possui validade devido ao fato de concordar com os resultados experimentais.

Consideremos um elétron de massa reduzida μ e de carga $-e$, que se move sob a ação do potencial de Coulomb : $V(r) = \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

Onde r é a distância entre o elétron e o núcleo. A carga nuclear é $+Ze$, e $Z=1$, o qual corresponde ao átomo de hidrogênio, neutro (e aos seus isótopos) e $Z > 1$, aos íons ($Z=2$, He^+ , $Z=3$, Li^{++} , etc.).

A energia potencial elétrica corresponde a uma força central, o que significa que a energia e o momento angular ($\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$) do elétron são constantes do movimento.

A expressão clássica para a energia total é: $E = \frac{p^2}{2\mu} + V(r)$; onde $\frac{p^2}{2\mu}$

é a energia cinética do sistema, p é o momento linear do elétron e $V(r)$ a sua energia potencial. Substituindo as grandezas dinâmicas p e E , pelos operadores diferenciais associados:

$$p \leftrightarrow i\hbar\vec{\nabla} \quad , \quad p^2 \leftrightarrow -\hbar^2\nabla^2 \quad \text{e} \quad E \leftrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

Onde $\vec{\nabla}$ é o operador gradiente e ∇^2 é o operador de Laplace. Assim obtemos uma equação de operador, que aplicado à uma função de onda: $\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})e^{-iEt/\hbar}$

Aonde chega à equação de Schrödinger tridimensional dependente do tempo, na presença de um potencial:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r) \right) \psi(\vec{r}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}, t)$$

A função própria $\psi(\vec{r})$ é uma solução da equação de Schrödinger, independente do tempo:

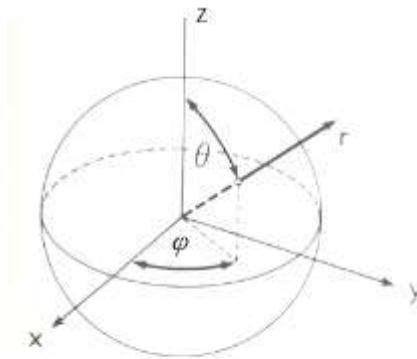
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r) \right) \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad \text{ou} \quad \hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r)$. Utilizamos o símbolo H para representar o operador energia total do sistema (ao invés de \hat{E}); este é chamado o operador Hamiltoniano (ou operador energia total) do sistema.

3 EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER EM COORDENADAS ESFÉRICAS

Para analisar o elétron no átomo é conveniente utilizar as coordenadas esféricas r, θ, φ , desta maneira podemos empregar a técnica de separação de variáveis, podendo escrever a equação em derivadas parciais num conjunto de três equações diferenciais ordinárias, para cada uma das coordenadas e posteriormente utilizar os métodos convencionais para resolver essas equações. Assim em vez de escrever a função de onda $\psi(x, y, z)$ deveremos escrever $\psi(r, \theta, \varphi)$.

Então para um ponto arbitrário x, y, z em coordenadas cartesianas podemos escrever: $x = r \sin \theta \cos \varphi$, $y = r \sin \theta \sin \varphi$, $z = r \cos \theta$



Coordenadas esféricas, r, θ, φ , e coordenadas cartesianas, x, y, z .

Primeiro devemos escrevermos a equação de Schrödinger tridimensional em termos das coordenadas retangulares:

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

Ao substituirmos as relações pertinentes e o operador Laplaciano em coordenadas esféricas na equação acima, obtemos explicitamente a equação de Schrödinger em três dimensões, para um estado estacionário descrito por $\psi(r, \theta, \varphi)$:

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) \right] + V(r) \psi = E \psi$$

(os detalhes desta transformação de coordenadas, pode ser encontrado no apêndice M do livro de Robert Eisberg e Robert Resnick, "Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles", John Wiley & Sons, 2nd Edition, 1985).

As funções de onda e as energias para uma partícula com três graus de liberdade dependem de três números quânticos, devido a simetria esférica do sistema atômico..

n	ℓ	m_ℓ	$F(\phi)$	$P(\theta)$	$R(r)$
1	0	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$
2	0	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{2\sqrt{2} a_0^{3/2}} \left[2 - \frac{r}{a_0}\right] e^{-r/2a_0}$
2	1	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{\sqrt{6}}{2} \cos \theta$	$\frac{1}{2\sqrt{6} a_0^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$
2	1	± 1	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i\phi}$	$\frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta$	$\frac{1}{2\sqrt{6} a_0^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$

4 EQUAÇÕES DO MOVIMENTO RADIAL E ORBITAL

Com a mudança de coordenadas cartesianas para coordenadas esféricas podemos obter soluções da equação de Schrödinger independentes do tempo da forma:

$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ que corresponde a um produto de funções independentes e que podem ser obtidas através de soluções de equações ordinárias. A separação de variáveis será feita em duas etapas. Na primeira delas consideramos a função:

$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi)$ onde $R(r)$ é uma função que depende somente de r e é determinada pela energia potencial $V(r)$, correspondente à força central $\vec{F} = -\hat{r} \frac{dV(r)}{dr}$

que atua sobre o elétron, e a parte angular $Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ é uma função que depende das coordenadas angulares θ e φ . As funções angulares são as mesmas para todos os problemas de forças centrais.

Substituindo as soluções anteriores na equação acima, obtemos:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial RY}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial RY}{\partial \theta} \right) \right] + V(r)RY = ERY, \quad e$$

posteriormente em:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{Y}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{R}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} + \frac{R}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) \right] + [V(r) - E]RY = 0$$

Multiplico a equação por $\frac{1}{RY} r^2$, resulta em:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{1}{Y \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{Y \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) \right] - r^2 [V(r) - E] = 0$$

,e escrevendo a equação na forma:

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + r^2 [E - V(r)] = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{Y} \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) \right],$$

onde os termos à esquerda da equação só dependem da coordenada r e os da direita, são dependentes somente das coordenadas angulares θ e φ , e por isso o valor comum à ambos os membros da equação não pode depender de nenhuma dessas variáveis, e portanto deverá ser uma constante, que por conveniência escolhe-se o valor $\frac{L^2}{2\mu}$.

Igualando cada um dos termos a essa constante obtemos duas equações: equação de movimento radial e equação de movimento orbital. Na equação de movimento radial, a derivada parcial $\frac{\partial}{\partial r}$ passa para a derivada total $\frac{d}{dr}$, uma vez que ambas são equivalentes. Assim obtemos a equação do movimento radial:

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{R(r)} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + r^2 [E - V(r)] = \frac{L^2}{2\mu}, \text{ multiplico tudo por } R(r), \text{ resulta em:}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + V(r) + \frac{L^2}{2\mu r^2} \right] R(r) = ER(r), \text{ onde desta forma a equação do}$$

movimento orbital será dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{Y(\theta, \varphi)} \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y(\theta, \varphi)}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y(\theta, \varphi)}{\partial \theta} \right) \right] = \frac{L^2}{2\mu}$$

Solução da equação radial:

Substituindo $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$ e a energia potencial $V(r) = \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$, na equação radial

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + V(r) + \frac{L^2}{2\mu r^2} \right] R(r) = ER(r) \text{ obtemos:}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) R(r) + \left[\frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] R(r) = ER(r)$$

Esta equação pode ser simplificada introduzindo uma nova função radial:

$u(r) = rR(r)$, e obtemos uma nova equação radial para $u(r)$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] u(r) = Eu(r)$$

Esta equação representa a equação de Schrödinger radial se a energia potencial central for substituída pela energia potencial efetiva:

$$V_{\text{eff}} = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}, \text{ O termo } \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \text{ que está associado ao movimento orbital}$$

do elétron corresponde a energia potencial centrífuga. Substituindo:

$$V_{\text{eff}} = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \text{ em } \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] u(r) = Eu(r) \text{ obtemos:}$$

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} + V_{\text{eff}} u(r) = Eu(r).$$

Que é uma equação de Schrödinger unidimensional de uma partícula de massa μ , movendo-se num potencial efetivo V_{eff} , que na verdade é o potencial de Coulomb, mais uma barreira de potencial centrífuga.

Desenvolvendo a equação $\frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} + V_{\text{eff}} u(r) = Eu(r)$ obtemos uma equação denominada de equação de Laguerre associada, cujas soluções são os polinômios de Laguerre.

Para um exemplo de potencial efetivo; V_{eff} , para $Z=1$ e $l=0,1,2$.

$$R_{nl}(r) = e^{-Zr/na_0} \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^l G_{nl}\left(\frac{Zr}{a_0}\right).$$

onde $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2} = 0.529 \text{ \AA}$, corresponde ao raio de Bohr, $G_{nl}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)$ são polinômios

em $\frac{Zr}{a_0}$, que tem diferentes formas para diferentes valores de n e l . Para determinar

os estados ligados consideramos o caso em que $E = -|E|$.

Através da relação de recorrência:

$$a_{k+1} = \frac{2\left(\lambda k - \frac{\mu Z e_0^2}{\hbar^2}\right)}{k(k+1) - l(l+1)} a_k; \text{ onde: } \lambda = \sqrt{\frac{2\mu|E|}{\hbar^2}} \quad \text{e} \quad e_0^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$$

Considerando $k = n$ e assumindo que $a_n \neq 0$ e $a_{n+1} = 0$.

Então, substituindo os valores temos que: $\lambda n - \frac{\mu Z e_0^2}{\hbar^2} = 0 \Rightarrow \lambda n = \frac{\mu Z e_0^2}{\hbar^2}$.

Substituindo o valor de λ e elevando ao quadrado ambos os membros da equação, obtemos:

$$\frac{2\mu|E|n^2}{\hbar^2} = \frac{\mu^2 Z e_0^4}{\hbar^4} = 0; \quad \lambda = \sqrt{\frac{2\mu|E|}{\hbar^2}} \quad \text{e} \quad e_0^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}; \text{ e obtemos a condição de}$$

quantificação dos níveis de energia do átomo de um elétron.

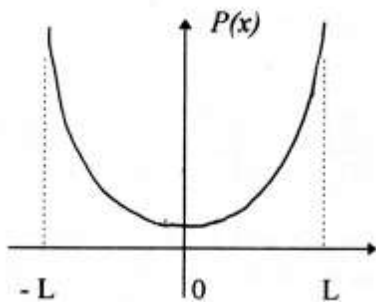
$$E_n = -\frac{\mu Z^2 e_0^4}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{Z^2 e_0^2}{2a_0 n^2} \quad \text{ou} \quad E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2}.$$

Onde $n \geq l+1$, n é o número quântico principal e E_n corresponde aos valores próprios do átomo de um elétron. n é chamado de número quântico principal porque ele especifica a energia total do átomo.

Oscilador Harmônico:

Ao se considerar, classicamente, uma partícula presa a uma mola dizemos que a força que atua sobre ela é do tipo $F = kx$ e o potencial a que está submetida é $V = \int F dx = \frac{kx^2}{2}$.

O gráfico da distribuição da probabilidade de encontrar essa partícula ao longo de seu percurso é inversamente proporcional a sua velocidade dando uma curva do tipo dada abaixo.



Probabilidade de encontrar a partícula presa em uma mola:

Ainda classicamente pode-se dizer que o espectro das energias possíveis é contínuo variando de zero a $\frac{kl^2}{2}$. Quanticamente esses dados podem ser obtidos através da equação de Schrödinger.

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

Que reescrita dá: $\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{Kx^2}{2} \right) \psi(x) = 0$.

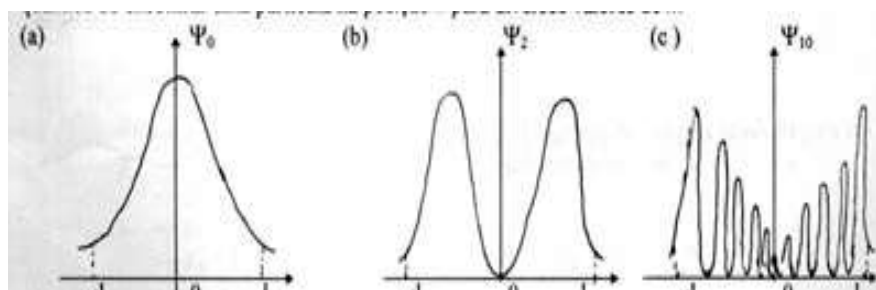
Fazendo: $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$, e $y^2 = \frac{mk}{\hbar^2} x^2$, obtemos a seguinte equação:

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + (\alpha^2 - y^2) \psi(x) = 0.$$

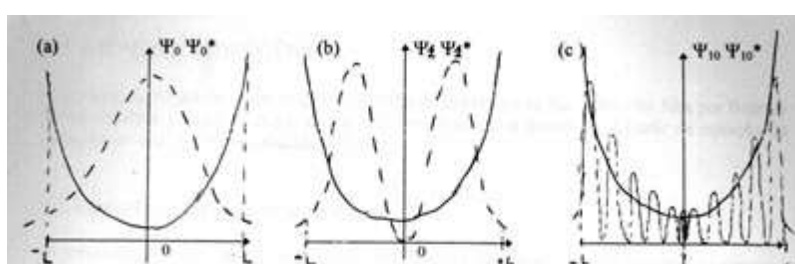
As soluções desse tipo de equação diferencial baseiam-se nos polinômios de Hermite e são soluções que podem ser encontradas tabeladas, do tipo:

$$\psi_n = \left(\frac{2m\nu}{\hbar} \right)^{1/4} (2^n n!)^{-1/2} H_n(y) e^{-y^2/2}.$$

Abaixo estão esboçadas as funções, uma comparação, de onda e a probabilidade clássica e quântica de encontrar uma partícula na posição x para diversos valores de n .



Funções de onda para $n = 0$ (a); $n = 1$ (b) e $n = 10$ (c).



Probabilidade quântica e probabilidade clássica para os estados $n = 0$ e $n = 1$ e $n = 10$ de um oscilador harmônico.

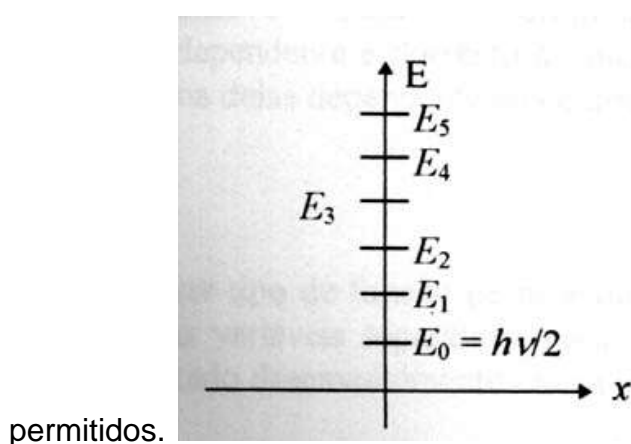
Pode-se observar que, à medida que o número quântico aumenta, a probabilidade quântica se aproxima da probabilidade clássica. Isto nos permite afirmar que para fenômenos microscópicos devem ser explicados a partir da teoria quântica, para que os dados experimentais estejam entrelaçados com as equações, evidentemente significa que para estes fenômenos a teoria Newtoniana deixa de valer, tornando eficaz somente para fenômenos macroscópicos, nesta ótica também existe a veracidade de podermos aplicar a teoria quântica para fenômenos macroscópicos e microscópicos, no entanto utilizamos somente para fenômenos microscópicos, pois para fenômenos macroscópicos a teoria Newtoniana, pode ser utilizada para descrição de fenômenos.

Prosseguindo temos que níveis de energia permitidos são dados por:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)h\nu, \text{ onde } n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

O menor valor de energia de uma partícula presa nesse tipo de poço de potencial pode ter é $E_0 = \left(\frac{h\nu}{2}\right)$, o que significa que a partícula não pode ter energia nula, contrariamente ao que tinha sido encontrado classicamente.

Outra diferença é que os valores possíveis de energia não são contínuos, mas sim discretos e equidistantes de $\left(\frac{kL^2}{2}\right)$. Lembrando que a frequência de oscilação de um sistema massa-mola depende diretamente do valor da constante da mola, k , e indiretamente da massa, m pode-se notar que os valores dos níveis de energia permitidos e o seu número depende da relação k/m , da profundidade e da largura do poço. Isto pode ser notado se for lembrado que a profundidade do poço é dada pela energia total do sistema que é sua energia potencial máxima, $\left(\frac{kL^2}{2}\right)$, que por sua vez depende do valor a largura do poço. O diagrama abaixo apresenta os níveis de energia



permitidos.

Energia do elétron:

O elétron vai ter um valor de energia diferente em cada órbita como na figura acima. Para se determinar esse valor deve-se voltar à equação de Schrödinger substituindo a função de onda solução e determinando o valor de E . A título de exemplo consideremos o elétron que tem o seguinte conjunto de números quânticos: $n = 2$; $l = 1$; $m = 1$, ou seja, cuja função de onda é:

$$\psi_{2,1,1}(r, \theta, \varphi) = R_{2,1}(r) \theta_{1,1}(\theta) \phi_1(\varphi) \quad \text{ou}$$

$$\psi_{2,1,1}(r, \theta, \varphi) = e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \sqrt{\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3} (\sin \theta) e^{i\varphi}.$$

Determinando-se todas as derivadas de ψ posteriormente fazendo as devidas substituições na equação acima chega-se a:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(2 \left(\frac{1}{r^2} - \frac{1}{ra_0} + \frac{1}{8a_0^2} \right) - \frac{2}{r^2} \right) \psi + V\psi = E\psi \text{ o que nos permite deduzir que:}$$

$$E = V + \frac{\hbar^2}{\mu a_0} \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{8a_0} \right). \text{ E lembrando-se do valor de } V \text{ da equação anterior chega-se}$$

ao valor da energia do elétron com número atômico principal $n = 2$:

$$E_2 = -\frac{\mu e^4}{8(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2}, \text{ o que nos permite fazer uma generalização para:}$$

$$En = -\frac{\mu Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 n^2}, \text{ observando esta expressão, como demonstrada anteriormente,}$$

podemos afirmar que nem todos os valores de energia são permitidos, devido a este fato a energia do elétron é quantizada. O sinal negativo da equação indica que se trata de estados ligados, fisicamente a energia do elétron depende unicamente do número principal e não dos outros números quânticos.

Estes resultados são semelhantes aos de Bohr e Sommerfeld com a vantagem que esta dedução foi feita a partir do formalismo da mecânica quântica e não de hipóteses casuais.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho, foi feita uma introdução da Mecânica Quântica não relativística. Mostramos uma idéia intuitiva da construção da equação de Schrödinger que governa a dinâmica de sistemas subatômicos, sob energia de alguns elétrons-volt. Consideramos alguns aspectos históricos da elaboração da teoria dos quanta, ao princípio de incerteza de Heisenberg, analisamos também a dualidade onda-partícula.

Foram feitas algumas aplicações conhecidas, deixando de lado algumas generalizações para outros sistemas quânticos.

Devido a isto, eis a importância da física quântica e as equações de Schrödinger que permitem descrever com elegância sistemas microscópicos, pois permite descrever soluções exatas das equações de Schrödinger para os átomos mono eletrônicos, indo além das considerações de átomos simples, servindo de base

para a formulação aproximada no tratamento de átomos mais complexos e outras aplicações práticas

REFERÊNCIAS

EISENBERG, Robert; RESNICK, R. **Física Quântica - Átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas**, São Paulo: Editora Campus, 1994.

EISENBERG, Robert. **Fundamentos de Física Moderna**. John Wiley & Sons

EISBERG, R. e RESNICK, R. **Física quântica, átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas** 6 ed. Rio de Janeiro: Editora Campus, 1988.

HALLIDAY; RESNICK; WALKER. **Fundamentos de Física**. v. 4, 1996.

LANDAU, L. D. **Molecules**, Ed. MIR, 1987.

MC. GRAW. Hill SCHAUM'S. Outline. **Differential Equation**. 3rd. Edition. 2006.

SERWAY, Raymond A. and Jr., John W. JEWETT. **Princípios de Física**. Vol. 4. São Paulo: PioneiraThomson Learning Ltda., 2004

STEWART, J. **O Cálculo** - volume I, Pioneira Thompson Learning, 2001.

TIPLER; Paul A. LLEWELLYN, Ralph A. "**Física Moderna**", Terceira Edição, Ed. LTC, 2001.

TIPLER. P. A., **Física Moderna**, Rio de Janeiro: 1981.