A Equação de Schrödinger

Um pouco de história. No final do século XIX, experimentos físicos forneceram evidências de novos fenômenos que não podiam ser explicados pelas teorias existentes. Os físicos não conseguiam explicar os seguintes dados:

- O espectro discreto de frequências de emissão do átomo de hidrogênio.
- O espectro de frequências da radiação eletromagnética emitida por um corpo negro (um sólido opaco não-refletivo idealizado).

As tentativas de explicar esses dados contribuíram para o desenvolvimento da mecânica quântica.

Em 1900, Planck derivou uma fórmula para o espectro de frequências da radiação de corpo negro que concordava com os dados experimentais. Grosso modo, ele assumiu que o corpo negro podia apenas emitir ou absorver radiação cuja energia é um múltiplo inteiro de um *quantum* de energia E cujo valor é proporcional à frequência ν da radiação:

$$\boxed{E = h\nu.}$$

A constante h é chamada **constante de Planck**.

Em 1905, Einstein propôs que radiação de frequência ν consiste de *quanta* de energia $E = h\nu$. Essa igualdade é chamada **relação de Planck-Einstein** e os *quanta* de energia são chamados **fótons**. Ele usou essa ideia em sua teoria do efeito fotoelétrico. Por outro lado, radiação é também onda no eletromagnetismo. Logo radiação possui propriedades de onda e de partícula.

Em 1913, Bohr formulou uma teoria do átomo para explicar o espectro discreto de frequências de emissão do átomo de hidrogênio. Ele modificou a teoria de Rutherford usando ideias quânticas. Bohr supôs que os elétrons se movem em torno do núcleo em órbitas circulares e que os valores de seus momentos angulares são restritos a múltiplos inteiros de $h/(2\pi)$. Dessa forma, as órbitas são quantizadas. A constante $h/(2\pi)$ é chamada **constante de Planck reduzida** e é denotada por $\hbar$. Bohr também supôs que quando um elétron passa de um estado de energia E_i para um estado de energia E_f, onde $E_i > E_f$, um fóton é emitido com energia $E_i - E_f$ e frequência

$$\nu = \frac{E_i - E_f}{h}.$$

Essa relação é chamada **condição de frequência de Bohr**.

Em 1923, Compton realizou experimentos que forneceram evidências adicionais sobre as propriedades de partícula da radiação.

Um fóton é uma partícula cuja massa de repouso é zero. De acordo com a teoria da relatividade, a energia E e o momento p de um fóton obedecem a relação $E = pc$, onde c é a velocidade da luz. Por outro lado, se a radiação tem frequência ν, então $E = h\nu$ pela relação de Planck-Einstein. Logo $p = h\nu/c$. Se radiação é uma onda de velocidade c e comprimento λ, temos $\nu/c = 1/\lambda$. Portanto, o momento e o comprimento de onda de um fóton satisfazem

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

Essa expressão é chamada **relação de de Broglie**.

Em 1924, de Broglie propôs que associado a uma partícula de massa m, momento p e energia E existe uma onda de comprimento λ e frequência ν, onde λ satisfaz a relação acima e ν satisfaz a relação de Planck-Einstein. Portanto, as relações válidas inicialmente para fótons seriam válidas também para toda matéria.

Em 1927, o experimento de Davisson–Germer forneceu novas evidências sobre a dualidade onda-partícula proposta por de Broglie.

Se matéria possui propriedades de onda, deveria existir uma equação da onda para descrever ondas de matéria. O modelo do átomo de hidrogênio composto por uma onda estacionária de um elétron em torno do núcleo se encaixaria nessa descrição.

Na mecânica quântica, a onda associada a uma partícula é representada por uma função $\psi(x)$, definida sobre o espaço de configurações, chamada **função de onda**:

$$\psi : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}.$$

Born sugeriu que a função $x \mapsto |\psi(x)|^2$ seja interpretada como a densidade de probabilidade para a posição da partícula. Portanto, requeremos a condição de normalização

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x)|^2 \, \mathrm{d}x = 1.$$

Em 1926, Schrödinger postulou uma equação que descreve a evolução temporal da função de onda, que é considerada a equação fundamental da mecânica quântica. A equação diz respeito à função de onda de uma partícula de massa m sujeita a um potencial $V(x)$. De acordo com Schrödinger, se a partícula está no estado $\psi_0(x)$ no instante t_0, o estado $\psi(x,t)$ da partícula no instante t é determinado pelo problema de valor inicial

$$\boxed{\begin{array}{l} i\hbar\dfrac{\partial\psi}{\partial t} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V(x)\psi, \\ \psi(x,t_0) = \psi_0(x). \end{array}}$$

A equação acima é chamada **Equação de Schrödinger**.

Por fim, consideremos a Equação de Schrödinger para uma partícula livre, ou seja, uma partícula sujeita ao potencial $V(x) \equiv 0$. Nesse caso, é simples verificar que a onda plana

$$\psi(x,t) = e^{2\pi i(x_1/\lambda_1 + x_2/\lambda_2 + x_3/\lambda_3 - \nu t)}$$

é uma solução da Equação de Schrödinger se

$$h\nu = \frac{1}{2m}\left[\left(\frac{h}{\lambda_1}\right)^2 + \left(\frac{h}{\lambda_2}\right)^2 + \left(\frac{h}{\lambda_3}\right)^2\right].$$

Usando a relação de Planck-Einstein ($E = h\nu$) e as relações de de Broglie ($p_j = h/\lambda_j$), podemos reescrever a onda acima na forma

$$\psi(x,t) = e^{i(p\cdot x/\hbar - Et)}$$

onde

$$E = \frac{1}{2m}p^2.$$

Essa fórmula é precisamente a relação entre a energia e o momento de uma partícula não-relativística de massa m. Portanto, no caso de partículas livres, a descrição ondulatória fornecida pela mecânica quântica concorda com a descrição corpuscular fornecida pela física clássica não-relativística.