

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MATO GROSSO DO SUL

IZALMÁRCIO ROCHA ALVES

A EQUAÇÃO DE SCHROEDINGER

DOURADOS

2008

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MATO GROSSO DO SUL

IZALMÁRCIO ROCHA ALVES

A EQUAÇÃO DE SCHROEDINGER

**Trabalho de Conclusão de Curso
apresentado como requisito parcial para a
obtenção do título de Licenciado em Física
pela Universidade Estadual de Mato Grosso
do Sul, sob a orientação da Prof.^a Msc
Karin Ferraz.**

DOURADOS

2008

IZALMÁRCIO ROCHA ALVES

A EQUAÇÃO DE SCHROEDINGER

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado como requisito parcial para a obtenção do título de Licenciado em Física pela Universidade Estadual de Mato Grosso do Sul, sob a orientação da Prof.^a Msc. Karin Ferraz com a colaboração do Prof. Dr. Yuri Alexandrovish Barbosa.

BANCA EXAMINADORA

Prof.^a Msc. Karin Ferraz

Prof. Dr. Antonio Cesar Aguiar Pinto

Prof.^a Dr.^a Márcia Moutinho

Dourados, 14 de novembro de 2008.

Aos meus pais, Sádio e Maria de Lourdes

Aos meus irmãos, Fernando e Mônica

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais e meus irmãos que sempre me apoiaram.

À minha orientadora, professora Karin Ferraz, pelo auxílio e paciência.

Ao professor Yuri Alexandrovich Barbosa, pela colaboração neste trabalho.

Aos professores do curso de Física, pelos ensinamentos que levarei por toda a vida.

Aos meus colegas de curso, pela amizade.

RESUMO

Este trabalho apresenta uma breve revisão bibliográfica sobre Schroedinger, sua equação e também sobre as descobertas que resultaram na teoria quântica, tais como, a hipótese de Planck do corpo negro, o efeito fotoelétrico, dualidade onda-partícula, princípio da incerteza, entre outros. Obtivemos a equação Schroedinger por meio de operadores diferenciais, que foi o método usado por ele. A probabilidade de encontrar uma partícula em algum lugar é dada por $|\Psi|^2$, isto é, o módulo do quadrado da função de onda Ψ . A função de onda descreve o sistema físico e é determinada através da equação de Schroedinger. Através de um programa, que utiliza a linguagem Fortran de computador ilustramos a evolução temporal de uma partícula na presença de um potencial quadrado.

Palavras-chave: Equação de Schroedinger; Função de onda; Probabilidade.

ABSTRACT

This paper provides a brief review on Schroedinger, the equation and also on the findings that led to the quantum theory, such as the hypothesis of Planck's blackbody, the photoelectric effect, wave-particle duality, the uncertainty principle, among others. Schroedinger's equation obtained by means of differential operators, which was the method used by him. The probability of finding a particle somewhere is given by $|\Psi|^2$, that is, the module of the square of the wave function Ψ . In the wave function describes the physical system and is determined by the Schroedinger equation. Through a program that uses the computer language Fortran to illustrate the temporal evolution of a particle in the presence of a potential square.

Keywords: Schroedinger's equation, wave function; probability.

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	7
2 INÍCIO DA MECÂNICA QUÂNTICA.....	8
2.1 A Radiação do Corpo Negro e a Hipótese de Planck	8
2.2 O Efeito Fotoelétrico.....	10
2.3 O Efeito Compton	13
2.4 Espectros Atômicos	14
2.5 Modelos Atômicos	15
2.5.1 O Modelo de Thomson	15
2.5.2 O Modelo de Rutherford.....	17
2.5.3 O Modelo de Bohr	18
2.5.4 O Modelo de Sommerfeld.....	19
2.6 Louis de Broglie e a Dualidade Onda-Partícula	21
2.7 O Princípio da Incerteza de Heisenberg.....	22
3 EQUAÇÃO DE SCHROEDINGER	24
3.1 Breve Biografia de Schroedinger.....	24
3.2 Equação de Schroedinger Dependente do Tempo	27
3.3 Interpretação da Função de Onda	29
3.4 Valores Esperados.....	30
3.5 Equação de Schroedinger Independente do Tempo	32
3.6 Solução da Equação de Schroedinger para um Poço de Potencial Quadrado	34
3.6.1 Poço de Potencial Quadrado Finito.....	35
3.6.2 Poço de Potencial Quadrado Infinito	38
3.7 Programa para a Função de Onda	40
CONCLUSÃO.....	41
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	42
ANEXO A.....	44
ANEXO B.....	48

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

O século XX iniciou-se com o nascimento da teoria quântica. Um dos fundadores dessa nova teoria foi o físico alemão Max Planck, que explicou a radiação do corpo negro introduzindo para isto a quantização de energia.

Outro fenômeno que intrigava os físicos da época era o efeito fotoelétrico, que veio a ser explicado por Einstein, após estender as idéias de Planck sobre a quantização da energia.

A luz ainda era considerada uma onda, mesmo depois dos trabalhos de Planck e Einstein, até que Compton comprovou experimentalmente que ela se comportava como partícula, demonstrando seu caráter dual.

Algo que exigiu muito empenho dos físicos foi o desenvolvimento de um modelo atômico que concordasse com os resultados experimentais. Depois de várias propostas, que sempre apresentavam algum problema, Bohr desenvolveu um modelo que concordava bem com resultados experimentais e que mais tarde foi aperfeiçoado por Sommerfeld.

Depois da luz, foi observado comportamento dual em partículas. De Broglie foi quem sugeriu que a matéria, até então considerada somente como partícula, poderia apresentar um caráter ondulatório.

Para aumentar a distância entre a física quântica e a física clássica, Heisenberg demonstrou que não se pode determinar simultaneamente e com precisão a posição e o momentum, e nem o tempo e a energia de uma partícula.

A chamada nova mecânica quântica, em contraposição às teorias até o trabalho de Sommerfeld, foi elaborada entre 1925 e 1927, e entre os cientistas que a desenvolveram podemos citar Schroedinger, que desenvolveu a equação da mecânica ondulatória, partindo dos postulados de de Broglie.

Os objetivos desse trabalho são a realização de uma revisão bibliográfica do desenvolvimento da equação de Schroedinger, assim como uma pequena biografia deste notável cientista, e também ilustrar, fazendo uso de um programa, a propagação de uma partícula, sujeita a um potencial determinado, usando a equação de Schroedinger.

A metodologia empregada foi uma breve revisão bibliográfica e uma visão superficial do programa Fortran 90.

CAPÍTULO 2

INÍCIO DA MECÂNICA QUÂNTICA

2.1 A Radiação do Corpo Negro e a Hipótese de Planck

Todo corpo emite radiação eletromagnética, devido a temperatura, chamada de *radiação térmica*. A distribuição do espectro de radiação, a uma dada temperatura, ocorre de forma contínua para uma larga faixa de comprimentos de onda λ ou frequências ν , atingindo um máximo de intensidade. À medida que a temperatura aumenta esse máximo desloca-se para comprimentos de onda cada vez menores, como mostrado na figura 2.1. Isto é, se a temperatura do corpo aumenta, a intensidade da radiação se eleva cada vez mais.

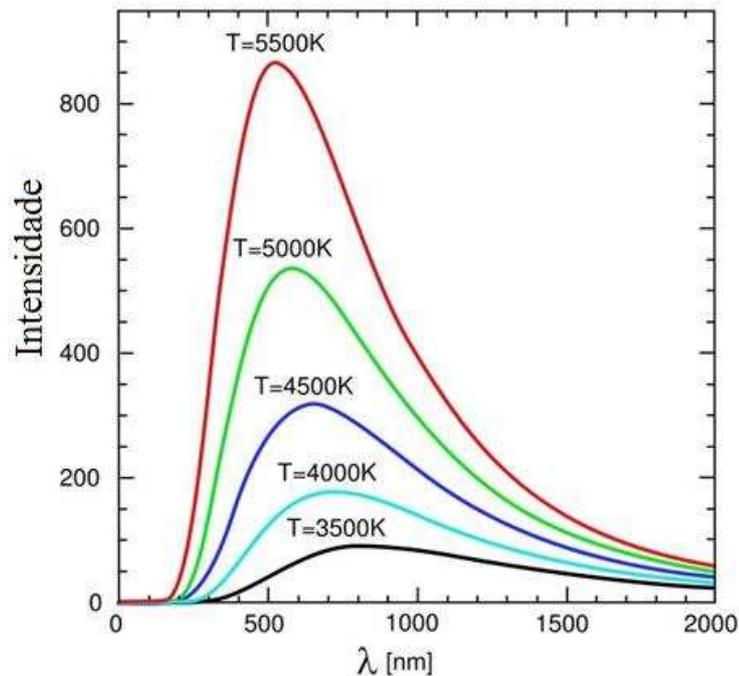


Fig. 2.1 – Intensidade da radiação do corpo negro em função do comprimento de onda λ em quatro temperaturas.

O espectro da radiação depende da forma e da composição do corpo. Contudo, existem corpos que emitem espectros térmicos de caráter universal, isto é, dependem apenas da temperatura. Esses corpos são chamados de *corpos negros* (capazes de absorver toda a radiação incidente sobre eles). A denominação é uma analogia aos corpos escuros, que

absorvem a maior parte da radiação eletromagnética da luz neles incidente. (JUNIOR e NETO, 1997).

O estudo do espectro de radiação do corpo negro foi muito popular entre os físicos do fim do século XIX. John Strutt Rayleigh (1842-1919) e Sir James Jeans (1877-1946) fizeram o cálculo da densidade de energia da radiação de cavidade (objeto que contém uma cavidade ligada ao exterior por um pequeno orifício), o resultado a que chegaram estava em desacordo com o obtido experimentalmente.

A figura 2.2 mostra a discrepância entre os resultados experimentais e a física clássica.

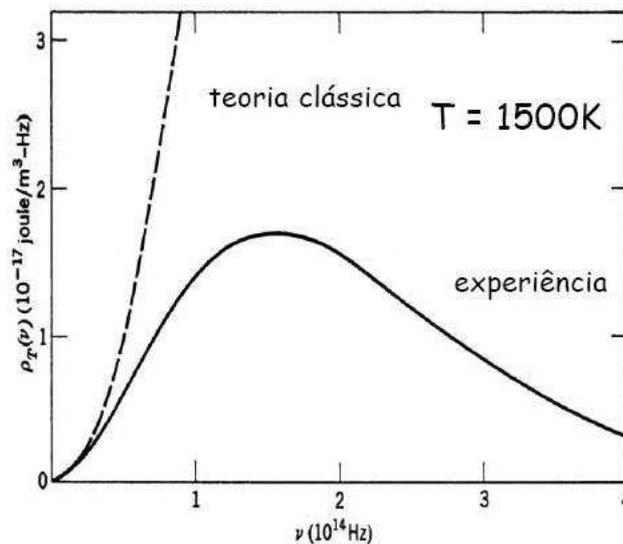


Fig. 2.2 - Comparação entre a experiência e a teoria clássica.

Podemos ver pela figura 2.2 que para frequências (ν) baixas, a física clássica concorda com a experiência, no entanto, ao aumentar a frequência, a previsão teórica (linha tracejada) desvia-se para infinito. Por outro lado, a experiência mostra que a densidade de energia (ρ_T) permanece finita e tendendo a zero para altas frequências. Esse comportamento da previsão teórica que ocorre para altas frequências é chamado de “catástrofe do ultravioleta”.

Muitos físicos dedicavam-se a solucionar esse problema, sem êxito. Até que, em 14 de dezembro de 1900, o físico Max Karl Ernest Ludwig Planck (1858-1947) apresentou à Sociedade Alemã de Física seu trabalho sobre radiação do corpo negro. Essa data é considerada como sendo a do nascimento da física quântica. Para conseguir solucionar o problema, Planck considerou a energia total como uma quantidade composta de partes iguais,

discretas e finitas e não como uma quantidade contínua como se pensava classicamente. Ele chamou essas partes iguais de “elementos de energia”, onde a energia total era um múltiplo inteiro dessas quantidades. Planck supôs que a energia E e a frequência ν fossem proporcionais:

$$E = h\nu \quad (2.1)$$

onde h é uma constante de proporcionalidade que ficou conhecida como *constante de Planck*, cujo valor foi obtido posteriormente, $h = 6,6261 \cdot 10^{-34} \text{J} \cdot \text{s}$.

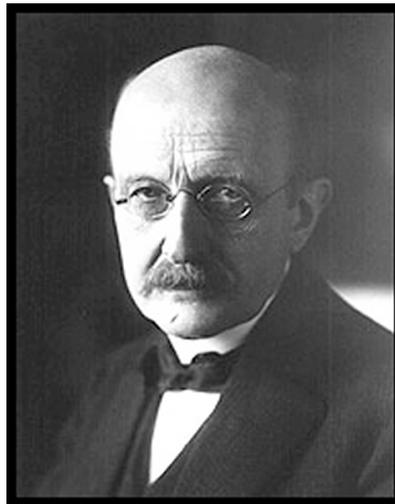


Fig. 2.3 - Max Planck

Planck declarou que a introdução da quantização de energia foi “um ato de desespero”, dizendo:

era uma hipótese puramente formal, e não lhe dei muita atenção, adotando-a porque era preciso, a qualquer preço, encontrar uma explicação teórica (NUSSENZVEIG, 1998, P. 247)

Desta forma, Planck deu início à mecânica quântica, e ganhou o Prêmio Nobel de 1918.

2.2 O Efeito Fotoelétrico

O efeito fotoelétrico consiste na emissão de elétrons de uma superfície metálica quando sobre ele incide um feixe de luz, esses elétrons liberados são chamados de fotoelétrons. A primeira observação desse fenômeno foi feita por Heinrich Rudolf Hertz (1857-1894) em 1887 enquanto realizava experiências que vieram a confirmar a existência de

ondas eletromagnéticas e a teoria de Maxwell (1831-1879) sobre propagação de luz. (EISBERG e RESNICK, 1979).

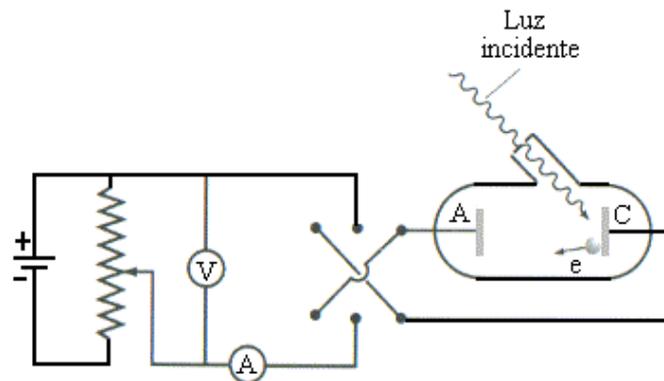


Fig. 2.4 – Representação de um aparelho usado para estudar o efeito fotoelétrico.

Posteriormente foram realizadas pesquisas sobre tal fenômeno, principalmente por P. Lenard (1899), que mostraram muitas características que a física clássica não explicava, entre elas, o fato de que quando a intensidade da luz aumentava, não ocorria o aumento da energia cinética K , mas apenas o crescimento do número de elétrons arrancados. A fig. 2.5 indica a corrente i em função da voltagem V para dois valores da intensidade da luz incidente sobre o catodo C do aparelho da figura 2.4.

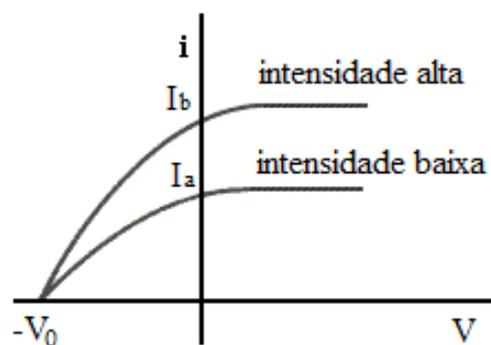


Fig. 2.5 - Gráfico da corrente i em função da voltagem V .

Analisando o gráfico da figura 2.5, vemos que, ao aumentar a intensidade da luz incidente de I_a para I_b ocorre apenas o crescimento da intensidade i , isto é, do número de fotoelétrons arrancados. Quanto ao *potencial limite* ou *de corte* V_0 , permanece o mesmo, pois é independente da intensidade da luz. Quando a corrente fotoelétrica chega a zero, significa que o *potencial limite* V_0 foi atingido. Para medir a energia cinética $K_{máx}$, basta multiplicar a diferença de potencial V_0 pela carga do elétron e , assim, temos:

$$K_{m\acute{a}x} = eV_0 \quad (2.2)$$

Foi em 1905 que Albert Einstein (1879-1955), trabalhando em um escritório de patentes em Berna na Suíça, estendeu as idéias de Planck sobre quantização. Einstein propôs que a luz é constituída por partículas, ou quanta de luz, isto é, “que a energia radiante está quantizada em pacotes concentrados, que mais tarde vieram a ser chamados de fótons” (EISBERG e RESNICK, 1979, p. 54). A expressão fóton foi proposta por Gilbert Newton Lewis em 1926, em um de seus trabalhos.



Fig. 2.6 - Albert Einstein

Para explicar o efeito fotoelétrico, Einstein retomou a expressão usada por Planck (equação 2.1) e supôs que a energia do fóton está relacionada com sua frequência ν .

Imaginou também que a energia do fóton é totalmente transferida para a um elétron. Com isso, ao ser ejetado da superfície metálica o elétron passa a ter energia cinética igual a

$$K = h\nu - w \quad (2.3)$$

em que $h\nu$ é a energia do fóton incidente e w o trabalho para remover o elétron da superfície metálica. Se não ocorrer nenhuma perda de energia, o elétron vai ejetar com energia cinética máxima. Sendo assim, temos:

$$K_{m\acute{a}x} = h\nu - w_0 \quad (2.4)$$

onde w_0 é uma característica do material utilizado chamada *função trabalho*.

Com essas idéias Einstein foi capaz de explicar as características do efeito fotoelétrico. São elas:

- 1) A energia cinética máxima depende da frequência e não da intensidade da luz incidente. O aumento da intensidade da luz apenas aumenta, na mesma proporção, o número de fótons e a corrente fotoelétrica.

- 2) Fazendo-se $K_{máx}$ igual a zero explica-se a existência do limiar de frequência ν_0 , abaixo do qual o efeito fotoelétrico não ocorre.
- 3) Nenhum atraso é detectado entre o instante de incidência da luz e o momento da ejeção do fotoelétron, porque pelo menos um fóton atinge a superfície do metal e acaba sendo absorvido instantaneamente por algum átomo.

As previsões de Einstein foram confirmadas por Robert Millikan (1868-1953) em 1915 através da realização de experimentos. Por este trabalho, Einstein recebeu o Prêmio Nobel em 1921.

2.3 O Efeito Compton

A propriedade corpuscular da luz foi confirmada em 1923 por Arthur Holly Compton (1892--1962) através de experiências. Para isso, ele observou o espalhamento de raios X de comprimento de onda λ quando os mesmos incidiam sobre um alvo de grafite. Esse mesmo alvo espalhou os raios em várias direções, então Compton mediu os comprimentos de onda espalhados observando a reflexão de Bragg¹ no cristal.



Fig. 2.7 - Arthur Compton

Os resultados dos experimentos indicaram que, embora o feixe incidente tivesse apenas um único comprimento de onda λ , o espectro de raios X espalhados tinha duas linhas, uma de mesmo comprimento de onda que a radiação incidente e a outra, λ' , de comprimento

¹ EISBERG, Robert; RESNICK, Robert. **Física Quântica: Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas.** Rio de Janeiro: Editora Campus, 1979, p. 90.

de onda maior, onde $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$ é chamado *deslocamento Compton* e varia com o ângulo de espalhamento.

A figura 2.8 representa um esquema da experiência realizada por Compton.

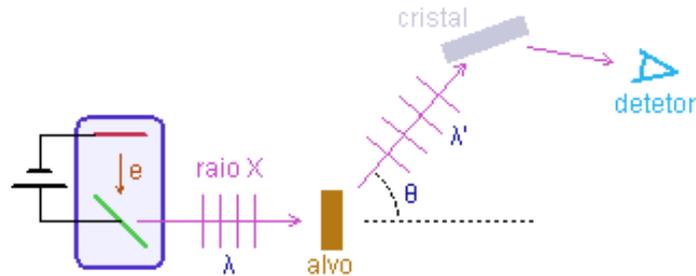


Fig. 2.8 - Esquema da experiência de Compton

Para entender a presença do comprimento de onda λ' é preciso ter uma visão corpuscular do espalhamento, já que não pode ser explicado como um fenômeno ondulatório.

Compton explicou seus resultados postulando que os raios X são formados por fótons, cada um com energia $E = h\nu$, colidindo com os elétrons livres do alvo, e também que a energia e o momentum linear são conservados na colisão. Compton considera os fótons como partículas que são espalhadas. (EISBERG e RESNICK, 1979).

Utilizando equações relativísticas, Compton descreveu a equação para o espalhamento:

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \lambda_c(1 - \cos\theta) \quad (2.5)$$

onde o comprimento de onda Compton do elétron é dado por

$$\lambda_c = \frac{h}{m_0c} \quad (2.6)$$

Observando a equação 2.5, podemos perceber que a variação do deslocamento Compton $\Delta\lambda$ depende apenas do ângulo θ .

Pela descoberta do espalhamento de raios X, Compton recebeu o Prêmio Nobel de 1927.

2.4 Espectros Atômicos

Em 1859 Gustav Kirchhoff (1824-1887) e Robert Bunsen (1811-1899) deduziram a partir de suas experiências que cada elemento emite linhas espectrais que são características exclusivas desse elemento.

O espectro mais simples é observado no hidrogênio atômico, aparecendo na região do visível e estendendo-se até o ultravioleta.

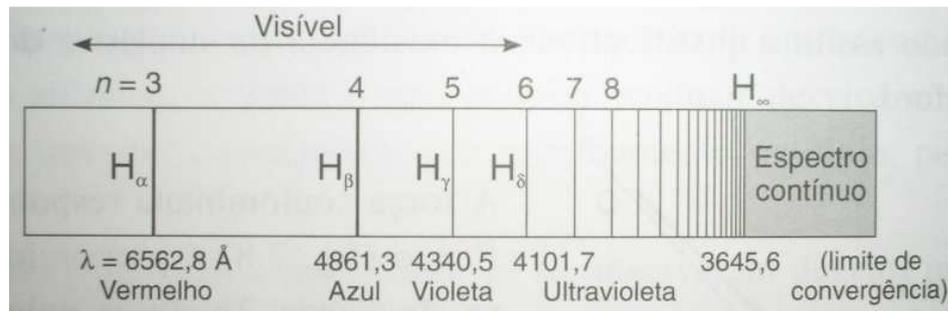


Fig. 2.9 – Espectro do hidrogênio

O primeiro a medir o comprimento de onda do espectro de hidrogênio foi Julius Plücker (1801-1868) em 1859, porém, foi Angstrom em 1860, quem conseguiu medir com exatidão as quatro raias visíveis do hidrogênio. (SCIENTIFIC AMERICAN BRASIL, 2006). Em 1885, Johann Balmer (1825-1898) formulou uma equação empírica que descreveu o comprimento de onda dessas quatro raias:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (2.7)$$

A série de linha dada por esta equação é chamada de *série de Balmer*. Onde n pode ter valores inteiros 3, 4, 5,... e R_H é denominada *constante de Rydberg* para o hidrogênio, cujo valor é $R_H = 10967757,6 \pm 1,2 \text{ m}^{-1}$. Posteriormente foram encontradas as séries de Lyman, Paschem, Bracket e Pfund.

2.5 Modelos atômicos

2.5.1 O Modelo de Thomson

J. J. Thomson (1856-1940), o descobridor do elétron, sabia que um átomo contém elétrons, é eletricamente neutro e que sua massa é muito maior que a do elétron, o que dava a entender que a maior parte da massa do átomo estava associada à carga positiva. Então, por volta de 1910, ele propôs um modelo sobre a estrutura atômica.



Fig. 2.10 - J. J. Thomson

Neste modelo, os elétrons estariam dentro de uma distribuição uniforme de carga positiva de formato esférico, ou seja, os elétrons estariam dentro de uma nuvem de carga positiva. Este modelo é conhecido também como “pudim de passas”.

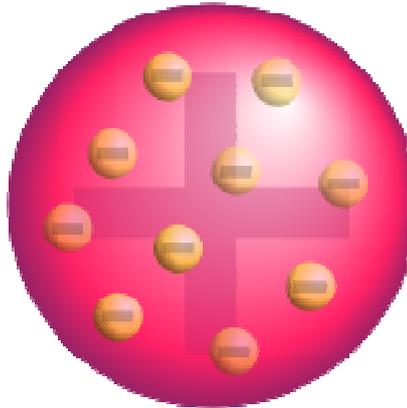


Fig. 2.11 - Representação do modelo de Thomson

O modelo de Thomson não concordava quantitativamente com os espectros observados experimentalmente. A demonstração da inadequação desse modelo foi obtida por Rutherford que realizou um experimento fazendo partículas α passarem por uma fina folha de ouro, algumas partículas desviavam e outras retornavam (retroespalhamento). Ele mostrou que uma carga positiva estava concentrada em uma região muito pequena (o núcleo) no centro do átomo. (EISBERG e RESNICK, 1979).

2.5.2 O Modelo de Rutherford

Ernest Rutherford (1871-1937) e seus assistentes realizaram experiências para estudar o efeito do espalhamento de partículas α (átomos de hélio com dois elétrons retirados) em finíssimas folhas de metal.



Fig. 2.12 – Ernest Rutherford

Em uma dessas experiências um de seus assistentes, Johannes Wilhelm Geiger (1882-1945) observou-se que algumas partículas α se espalhavam para trás, ou seja, retroespalhavam. Para explicar esse acontecimento, Rutherford considerou que toda a carga positiva e massa do átomo estariam concentradas em uma região muito pequena, ou seja, no núcleo. O modelo atômico proposto era semelhante ao sistema solar.

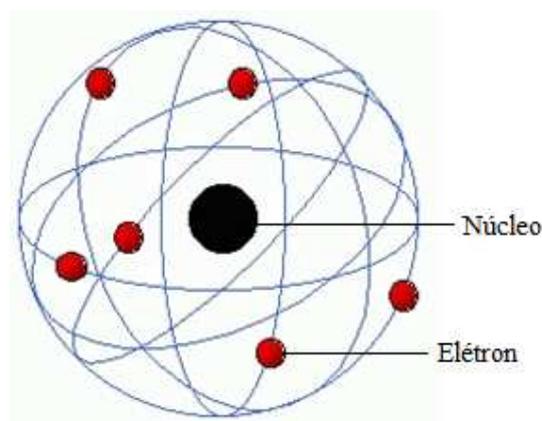


Fig. 2.13 – Modelo do átomo de Rutherford

Nesse modelo, o núcleo possui carga positiva e encontra-se no centro do átomo, enquanto os elétrons circulam ao redor desse núcleo neutralizando a carga positiva. Contudo, surgem questões a respeito da estabilidade desse átomo. De acordo com a teoria

eletromagnética clássica, os elétrons orbitando em torno do núcleo emitem radiação, e, assim, perdem energia fazendo com que o elétron mova-se progressivamente em espiral até colidir com o núcleo.

Para solucionar esse problema, Niels Bohr formulou um novo modelo atômico.

2.5.3 O Modelo de Bohr

Em 1912, Niels Henrik David Bohr (1885-1962) passa a trabalhar no laboratório de Rutherford. Diante do problema da estabilidade do átomo e com o intuito de superar as dificuldades encontradas pelo modelo de Rutherford, Bohr propõe, em 1913, um modelo simples da estrutura atômica para o átomo de hidrogênio.



Fig. 2.14 – Niels Bohr

Para isso, Bohr adotou as idéias de Planck e Einstein sobre a quantização de energia. Deste modo, postulou o seguinte:

- 1) Os elétrons só podem movimentar-se ao redor do núcleo em órbitas circulares e estacionárias (não-radiante).
- 2) Os elétrons só se movimentam em uma órbita em que seu momento angular orbital L é um múltiplo inteiro de \hbar ($h/2\pi$).
- 3) Um átomo só irradia quando passa de um estado estacionário de energia E_i , maior, para outro de energia E_f , menor.



Fig. 2.15 – Modelo do átomo de Bohr

O modelo atômico desenvolvido por Bohr teve êxito, pois concordava com vários dados obtidos para o espectro de hidrogênio e explicava a série de Balmer, além de deduzir constantes para o raio do átomo.

Bohr recebeu em 1922 o Prêmio Nobel pela investigação sobre a estrutura dos átomos e suas radiações.

Posteriormente, Sommerfeld incluiu órbitas elípticas no átomo de Bohr.

2.5.4 O Modelo de Sommerfeld

Embora concordasse com as experiências, o modelo de Bohr tinha algumas limitações. Por exemplo, não explicava os espectros dos átomos mais complexos, nem fornecia informações sobre as intensidades das linhas espectrais e a divisão de certas raias. Diante disso, Arnold Johannes Wilhelm Sommerfeld (1868-1951) na tentativa de explicar as *estruturas finas* do espectro do hidrogênio, ou seja, a separação das linhas espectrais propôs, em 1916, um modelo em que os elétrons moviam-se em órbitas elípticas, figura 2.16.

Ele também introduziu, no modelo de Bohr, a teoria da relatividade e quantizou o movimento do elétron. Inicialmente, Sommerfeld calculou os semi-eixos maior e menor das possíveis órbitas elípticas, que introduzem a noção de forma e tamanho, calculou também a energia total do elétron nessa órbita. Assim a órbita foi caracterizada pelos números inteiros n

e n_θ , onde n é chamado *número quântico principal* e n_θ é chamado *número quântico azimutal*. Os três primeiros valores para o número quântico principal estão representados na figura 2.16.

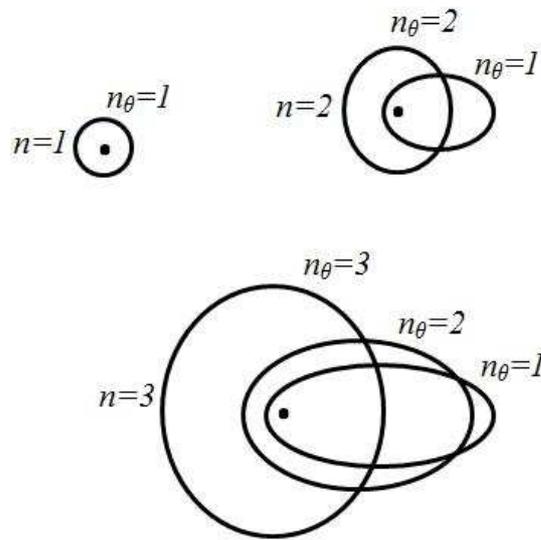


Fig. 2.16 – Órbitas elípticas de Bohr-Sommerfeld

Quando o movimento do elétron é tratado por métodos da mecânica clássica, a energia total do elétron em cada órbita depende apenas do número quântico principal n . Sommerfeld mostrou que se todas as órbitas possuem um mesmo valor de n , essas órbitas são chamadas *degeneradas*, isto é, todas têm a mesma energia total. Contudo, ao estudar o movimento do elétron considerando as correções feitas pela teoria da relatividade, Sommerfeld demonstrou que a energia passa a depender dos números quânticos n e n_θ , o que produziria a separação das linhas espectrais.



Fig. 2.17 – Arnold Sommerfeld

2.6 Louis de Broglie e a Dualidade Onda-Partícula

O próximo passo da teoria atômica foi dado em 1923 pelo físico francês Louis Victor Pierre Raymond de Broglie (1892-1987), que estava preparando sua tese de doutorado.



Fig. 2.18 – Louis de Broglie

Apoiado na teoria da relatividade, ele postulou que a matéria teria um comportamento dual, isto é, assim como as ondas eletromagnéticas, as partículas poderiam ter um comportamento ondulatório ou um comportamento de partículas, conforme a situação. A idéia de de Broglie partiu do fato que os únicos fenômenos em que se introduziam números inteiros para a determinação do movimento estacionário dos elétrons eram os de interferência e os dos modos normais de vibração. Diante disso, de Broglie sugeriu que os elétrons poderiam comportar-se também como ondas.

De maneira análoga à radiação, de Broglie relacionou os aspectos ondulatórios e corpusculares da matéria, ou seja, postulou que a energia E está relacionada à frequência ν da onda pela equação 2.1 de modo que

$$\nu = \frac{E}{h} \quad (2.8)$$

e que o momentum p se relaciona com o comprimento de onda λ pela equação

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (2.9)$$

onde $p = mv$, sendo m e v , a massa e a velocidade da partícula, respectivamente.

Observando as equações 2.8 e 2.9 fica evidente a dupla natureza da matéria, em que cada equação contém um conceito corpuscular (E e p) e um conceito ondulatório (λ e ν).

Assim, de Broglie postulou a equação chamada de *comprimento de onda de de Broglie* da partícula:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \quad (2.10)$$

A natureza ondulatória da matéria foi confirmada em 1927 por Clinton Joseph Davisson (1881-1958) e Lester Halbert Germer (1896-1971) nos Estados Unidos e George Paget Thomson (1892-1975) na Escócia. Eles demonstraram experimentalmente que os elétrons sofriam efeitos de difração quando incidiam sobre um sólido cristalino. Ao medir esses efeitos foi possível comprovar a relação de de Broglie entre comprimento de onda e velocidade de movimento dos elétrons. (EISBERG e RESNICK, 1979), (SCIENTIFIC AMERICAN BRASIL, 2006, nº 13).

Em 1929, Louis de Broglie foi contemplado com o Prêmio Nobel pela descoberta da natureza ondulatória dos elétrons.

2.7 O Princípio da Incerteza de Heisenberg

Na física clássica podemos determinar de forma praticamente exata o estado de uma partícula se soubermos sua posição e seu momentum. Ou seja, é possível medir com bastante precisão as grandezas, o que limita essa precisão é a acurácia do equipamento utilizado para as medições.

No entanto, para a física quântica não é possível medir com precisão posição e momentum. Só o fato de observar um sistema já é suficiente para causar perturbações, resultando em imprecisões ou incertezas, devidas ao fato de que interagimos com esse sistema.

Em 1927, Werner Karl Heisenberg (1901-1976) demonstrou a impossibilidade de se determinar simultaneamente e com precisão o valor de uma componente do momentum p_x e a sua coordenada associada x para uma partícula. Isto é, se uma medida for feita com uma precisão Δx e seu momentum com uma precisão Δp_x , significa que o produto das duas incertezas ($\Delta p_x \Delta x$) não poderá ser menor que $\hbar/2$. Assim, temos o chamado *princípio da incerteza* de Heisenberg:

$$\Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (2.11)$$

onde $\hbar = h/2\pi$, sendo h a constante de Planck.

Observe que se uma incerteza diminui a outra aumenta na mesma proporção. Como não é possível determinar precisamente o comportamento futuro de um sistema, podemos apenas informar a respeito da probabilidade de sua ocorrência.

O princípio da incerteza também se aplica à medida da energia E de um sistema. Nesse caso, a incerteza ΔE está relacionada com o intervalo de tempo Δt durante o qual ocorrem as mudanças no sistema. Neste caso,

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad (2.12)$$

Heisenberg recebeu o Prêmio Nobel em 1932, basicamente por seus trabalhos de 1925 a 1927.



Fig. 2.19 – Werner Heisenberg

CAPÍTULO 3

A EQUACÃO DE SCHROEDINGER

3.1 Breve Biografia de Schroedinger

Erwin Rudolf Josef Alexander Schroedinger nasceu em 12 de agosto de 1887 em Viena, Áustria. Era o único filho de Rudolf Schroedinger e Georgine Emilia Brenda. Quando criança, Erwin aprendeu a falar alemão e inglês quase ao mesmo tempo, pois sua mãe tinha pai austríaco e mãe inglesa.



Fig. 3.1 – Erwin Schroedinger

Erwin foi educado em casa por um tutor, pois sua família tinha uma vida confortável. Somente no final de 1898 passou a frequentar a escola Akademisches Gymnasium. Tinha gosto por disciplinas científicas, como matemática e física, mas também apreciava gramática e poesia.

De 1906 a 1910 estudou na Universidade de Viena, onde foi bastante influenciado pelo seu professor de física, Fritz Hasenöhrle (1874-1915). Em 1910 obtém o título de doutor com a tese *Sobre a condução de eletricidade na superfície de isolantes no ar úmido*, e também publica seu primeiro artigo científico a respeito do mesmo tema. A partir de 1911 passa a trabalhar como assistente de Franz Serafin Exner (1849-1926), em física experimental. Em 1914 é aprovado como livre docente. Durante a Primeira Guerra Mundial,

Erwin serviu como oficial de artilharia, e mesmo participando das atividades militares continuou publicando seus trabalhos.

Após o fim da guerra, o físico iniciou sua carreira acadêmica e a vida nômade. Ficou noivo de Annemarie Bertel em 1919, mas como não tinha um bom emprego não poderia sustentar um lar.

Foi oferecido a Erwin um contrato de professor associado na Universidade de Viena, mas não era o bastante para suas necessidades. Conseguiu um cargo melhor como assistente de Max Wien em Jena, e logo em seguida, em abril de 1920, casou-se com Annemarie. Em busca de melhores salários e posições, muda-se para Stuttgart, onde se tornou professor extraordinário. No ano seguinte vai para a Universidade de Breslau, na Polônia, atuar como professor titular. No final de 1921 é contratado como professor ordinário para substituir Max von Laue (1879-1960) na Universidade de Zurique, na Suíça, onde permaneceu por 6 anos.

O período em que permaneceu em Zurique foi o mais produtivo de sua carreira, pois esteve ativamente envolvido com uma variedade de temas de física teórica, e foi quando passou a se interessar pela teoria quântica. Também fez grandes amigos, entre eles estão Hermann Weyl e Peter Debye.

Foi através de um artigo publicado por Einstein em 1925, no qual ele chamava a atenção para o trabalho de Louis de Broglie, que Schroedinger tomou conhecimento das idéias de de Broglie.

Em novembro de 1925, Schroedinger escreveu algumas cartas nas quais se mostrou interessado pelas idéias do físico francês. Em umas dessas cartas, escrita para Einstein, ele diz que leu com grande interesse a engenhosa tese de Louis de Broglie. Em outra carta, comentou a Alfred Landé (1888-1976) que a tese é extraordinariamente estimulante, mas que algumas coisas são difíceis de engolir.

A pedido de Peter Debye, Schroedinger apresentou um seminário sobre as idéias de de Broglie, no qual enfatizou a análise do átomo de hidrogênio utilizando a concepção ondulatória de de Broglie.

Durante o período de dezembro de 1925 a janeiro de 1926, Erwin Schroedinger desenvolveu a mecânica ondulatória enquanto passava férias no hotel Villa Herwing em Arosa, nos Alpes suíços, em companhia de uma amante desconhecida. Schroedinger teve muitas amantes, com o consentimento de sua esposa. Ela mesma mantinha uma relação amorosa com o amigo do marido, Hermann Weyl.

No primeiro semestre de 1926, Schroedinger apresentou sua descoberta, ou seja, o desenvolvimento de uma equação de onda.

Em 1927, Schroedinger mudou-se para Berlim para substituir Mas Planck que estava se aposentando. Este foi um período de grande atividade científica na Alemanha, com muitos debates sobre a interpretação da teoria quântica.

Com a ascensão de Hitler ao poder, em 1933, Schroedinger decidiu deixar a Alemanha por não aceitar o nazismo. Em novembro do mesmo ano mudou-se para a Inglaterra, onde conseguiu uma colocação na Universidade de Oxford.

Nesse período, Erwin tinha uma amante, chamada Hilde, que era esposa de seu assistente, Arthur March. Hilde ficou grávida de Schroedinger, e em 30 de maio de 1934 nasceu sua filha, chamada Ruth Georgie Erica.

Pouco tempo depois de chegar a Oxford foi informado de que ele e Paul Dirac haviam sido contemplados com o Prêmio Nobel, pelo desenvolvimento da mecânica quântica. Em 1934 foi convidado para apresentar uma palestra na Universidade de Princeton, onde lhe ofereceram uma posição permanente, mas não aceitou. Em 1936 Schroedinger recebeu uma oferta da Universidade de Graz, na Áustria, que aceitou.

Com a ocupação da Áustria em 1938, Erwin se viu em uma situação difícil, pois havia abandonado a Alemanha em 1933. A Universidade de Graz passou a se chamar Universidade Adolf Hitler, e o novo reitor nazista aconselhou Schroedinger a declarar apoio aos nazistas. Ele concordou com a sugestão e por meio de uma carta enviada ao conselho universitário, dizia estar errado em 1933 e que estava arrependido pelo que fez.

Posteriormente ele escreveu uma carta para Einstein explicando que declarou apoio aos nazistas porque queria permanecer livre e não poderia fazer sem grande duplicidade.

Schroedinger foi considerado politicamente inseguro e acabou demitido da universidade. Foi aconselhado a procurar emprego em uma indústria e proibido de deixar o país, mas fugiu para a Itália com sua esposa Annemarie. Conseguiu uma posição como pesquisador visitante em Oxford e depois na Universidade de Gent. No segundo semestre de 1939 Schroedinger muda-se para a Irlanda, onde torna-se o primeiro diretor da Escola de Física Teórica do recém-criado Instituto de Estudos Avançados em Dublin. Permaneceu nesse cargo até sua aposentadoria em 1956, sempre publicando artigos e escrevendo livros. O livro *O que é a vida?*, escrito em 1944, foi um dos mais importantes. Nele Erwin fala sobre o conceito de código genético.

No período em que esteve em Dublin naturalizou-se irlandês e teve mais duas filhas com diferentes mulheres irlandesas.

Após sua aposentadoria, retornou para Viena, e, em 1960, escreveu seu último livro *Meu ponto de vista sobre o mundo (Meine Weltansicht)*, publicado postumamente.

Faleceu em Viena, no dia 4 de janeiro de 1961, de tuberculose. Antes de morrer pediu a sua esposa, Annemarie, que levasse seu corpo para ser enterrado em Alpbach, Tirol, na Áustria, um local onde ele gostava de passear.

3.2 Equação de Schroedinger Dependente do Tempo

As relações de de Broglie implicam que a frequência ν da onda e seu número de onda $k = 2\pi/\lambda$ estão relacionados com a energia e o momentum da partícula através de

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad (3.1)$$

e

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k \quad (3.2)$$

onde $\omega = 2\pi\nu$ é a frequência angular.

Para encontrar sua equação Schroedinger utilizou operadores diferenciais. A seguir, mostramos como podem ser obtidos esses operadores, e com isso, chegar à equação de Schroedinger.

Considere a função de onda da partícula livre

$$\Psi(x, t) = \cos(kx - \omega t) + i\sin(kx - \omega t) \quad (3.3)$$

Derivando em relação a x , temos

$$\frac{\partial\Psi(x, t)}{\partial x} = -k\sin(kx - \omega t) + ik\cos(kx - \omega t)$$

$$\frac{\partial\Psi(x, t)}{\partial x} = ik[\cos(kx - \omega t) + i\sin(kx - \omega t)]$$

Como $k = p/\hbar$, vale

$$\frac{\partial\Psi(x, t)}{\partial x} = i\frac{p}{\hbar}\Psi(x, t)$$

que pode ser escrito como

$$p\Psi(x, t) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x, t) \quad (3.4)$$

A expressão (3.4) mostra que podemos associar o momentum p com o operador diferencial

$$p = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

Derivando a função de onda da partícula livre em relação a t , encontramos uma associação entre a energia E e o operador diferencial $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$. Assim, temos

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \omega \text{sen}(kx - \omega t) - i\omega \text{cos}(kx - \omega t)$$

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -i\omega [\text{cos}(kx - \omega t) + i \text{sen}(kx - \omega t)]$$

Como $\omega = E/\hbar$, vale

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -i \frac{E}{\hbar} \Psi(x, t)$$

Escrevendo de outra forma

$$E\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) \quad (3.5)$$

Considerando a equação

$$\frac{p^2}{2m} + V(x, t) = E \quad (3.6)$$

que relaciona a energia total E com o momentum p e com a energia potencial $V(x, t)$, podemos substituir as grandezas dinâmicas p e E por seus respectivos operadores diferenciais. Desse modo obtemos

$$\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + V(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

Sendo que

$$(-i\hbar)^2 = -\hbar^2$$

e

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^2 = \left(\frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial}{\partial x} \right) = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

obtemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (3.7)$$

A equação 3.7, que é uma equação para operadores, tem significado quando aplicada a uma função de onda $\Psi(x, t)$. Aplicando $\Psi(x, t)$ nesta equação, obtemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t)\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (3.8)$$

que é a equação encontrada por Schroedinger entre 1925 e 1926, e ficou conhecida como equação de Schroedinger dependente do tempo ou, simplesmente, equação de Schroedinger.

Portanto, postular as associações

$$p \leftrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \text{ e } E \leftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (3.9)$$

é o mesmo que postular a equação de Schroedinger. Esta equação é válida quando aplicada a partículas não-relativísticas. Isto se deve ao fato desta equação ter sido formulada para ser consistente com a equação 3.6, a equação da energia clássica. Em 1928, Dirac desenvolveu uma teoria relativística para a mecânica quântica, na qual utilizou os mesmos postulados que os usados por Schroedinger ao desenvolver sua teoria. A teoria de Dirac não é o objetivo deste trabalho, portanto não será abordada aqui.

3.3 Interpretação da Função de Onda

A presença do número complexo i na equação de Schroedinger indica que as funções de onda que são soluções serão complexas. Sendo, assim, fica claro que as funções de onda não podem ser uma quantidade física mensurável

A interpretação probabilística da função de onda foi postulada em 1926 por Max Born (1882-1970), e diz o seguinte

Se, no instante t , é feita uma medida da localização da partícula associada à função de onda $\Psi(x, t)$, então a probabilidade $P(x, t)dx$ de que a partícula seja encontrada em uma coordenada entre x e $x+dx$ é igual a $\Psi^*(x, t)\Psi(x, t)dx$ (EISBERG e RESNICK, 1979, P. 183)

Em outras palavras, o postulado enuncia a probabilidade de encontrar uma partícula em algum ponto do espaço. Isso significa que o quadrado do módulo da função complexa representa a densidade de probabilidade $P(x, t)$, ou seja,

$$|\Psi(x, t)|^2 = P(x, t) = \Psi^*(x, t)\Psi(x, t) \quad (3.10)$$

onde $\Psi^*(x, t)$ é o complexo conjugado de $\Psi(x, t)$, e a densidade de probabilidade é sempre real e positiva.

A curva sólida, ilustrada na figura 3.2, representa a densidade de probabilidade $P(x)$ prevista pela mecânica quântica.

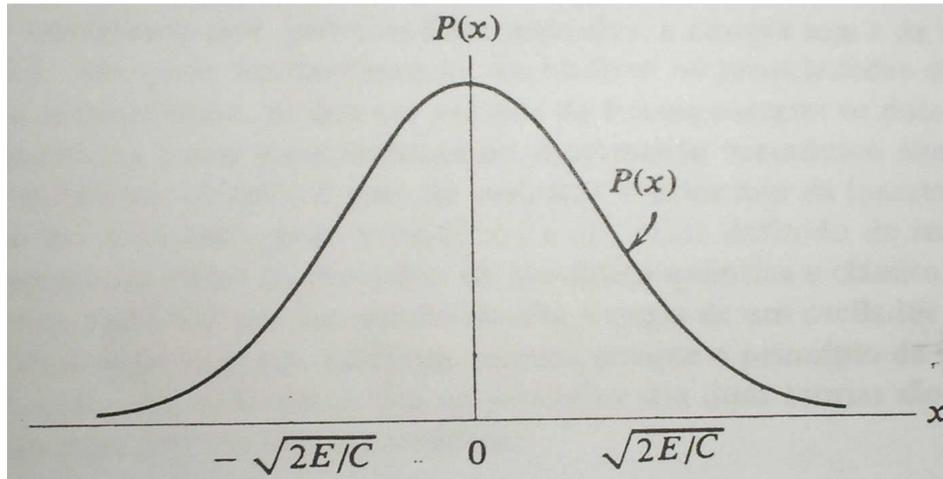


Fig. 3.2 – Densidade de probabilidade da mecânica quântica para o oscilador harmônico simples.

A probabilidade de a partícula ser localizada entre x e $x+dx$ é Pdx . A mecânica quântica prevê que a maior probabilidade de encontrar a partícula em um elemento dx está no ponto de equilíbrio, ou seja, em $x=0$, fora desse ponto as chances diminuem significativamente.

Para determinar a probabilidade total de encontrar a partícula em algum lugar do eixo x , a probabilidade deve ser igual a um, para que a partícula exista, isto é,

$$\int_{-\infty}^{\infty} P dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx = 1 \quad (3.11)$$

que é a condição de normalização da função de onda.

3.4 Valores Esperados

Nesta seção vamos mostrar como obter informações da função de onda, sobre a posição, o momentum, a energia e as outras grandezas que caracterizam o movimento da partícula.

Fazendo a medida da posição da partícula uma série de vezes para o mesmo valor de tempo, resultaria em uma variedade de valores observados. A média desses valores pode ser usada para especificar o valor esperado. Portanto, qualquer valor observado pode ser definido por meio de uma média ou valor esperado.

Para obter o valor esperado das grandezas físicas usa-se a condição de normalização, eq. (3.11). Dessa maneira, o valor esperado para x , será

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} xP(x, t)dx \quad (3.12)$$

Utilizando a equação (3.11) para obter a densidade de probabilidade, a equação (3.12) fica

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t)x\Psi(x, t)dx \quad (3.13)$$

Podemos calcular o valor esperado de qualquer função de x da mesma forma que foi feita na equação (3.13). Ou seja,

$$\overline{x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t)x^2\Psi(x, t)dx \quad (3.14)$$

e

$$\overline{f(x)} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t)f(x)\Psi(x, t)dx \quad (3.15)$$

A energia potencial $V(x, t)$ também pode ser escrita como

$$\overline{V(x, t)} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t)V(x, t)\Psi(x, t)dx \quad (3.16)$$

pois as medidas realizadas para calcular $V(x, t)$ utilizam um mesmo valor de t .

O valor esperado do momento p e de energia total E são dados por

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t)p\Psi(x, t)dx \quad (3.17)$$

e

$$\bar{E} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t)E\Psi(x, t)dx \quad (3.18)$$

No entanto, o princípio da incerteza de Heisenberg afirma que não é possível conhecer p e x simultaneamente, sendo, assim, p não pode ser escrito como função de x .

Como na teoria de Schroedinger a grandeza física p e E tem uma correspondência com os operadores diferenciais da equação 3.9, as equações (3.17) e (3.18), tornam-se

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x, t) dx \quad (3.19)$$

e

$$\bar{E} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi(x, t) dx \quad (3.20)$$

3.5 Equação de Schroedinger Independente do Tempo

A teoria quântica de Schroedinger é baseada em uma equação diferencial cuja solução determina a dependência espacial e temporal da função de onda que governa o movimento de uma partícula.

No caso em que a energia potencial V não depende do tempo, por exemplo, quando uma função de onda da partícula corresponde a uma onda estacionária, o potencial é somente função da variável x . Sendo, assim, a equação de Schroedinger pode ser escrita como

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (3.21)$$

Podemos separar a dependência em x da dependência em t , escrevendo a função de onda como produto de duas funções, cada função como função de uma das variáveis independentes, ou seja, supondo uma solução que tenha a seguinte forma:

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \varphi(t) \quad (3.22)$$

Substituindo a equação (3.22) na equação (3.21)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x) \varphi(t)}{\partial x^2} + V(x) \psi(x) \varphi(t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x) \varphi(t)}{\partial t}$$

Contudo, devemos mudar a notação

$$\frac{\partial^2 \psi(x) \varphi(t)}{\partial x^2} = \varphi(t) \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2}$$

e

$$\frac{\partial \psi(x) \varphi(t)}{\partial t} = \psi(x) \frac{d\varphi(t)}{dt}$$

Assim temos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \varphi(t) \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x)\varphi(t) = i\hbar\psi(x) \frac{d\varphi(t)}{dt}$$

Rearranjando os termos da expressão acima

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) \right] \varphi(t) = \left[i\hbar \frac{d\varphi(t)}{dt} \right] \psi(x)$$

Dividindo ambos os lados por $\psi(x)\varphi(x)$, obtemos

$$\frac{1}{\psi(x)} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) \right] = \frac{1}{\varphi(t)} \left[i\hbar \frac{d\varphi(t)}{dt} \right] \quad (3.23)$$

Note que o lado esquerdo da equação (3.23) depende apenas da variável x , enquanto que o lado direito depende apenas da variável t . Essa igualdade só é possível se ambos os lados forem iguais a uma constante de separação, que chamaremos de G . Com isso, obtemos duas equações separadas, dadas por

$$\frac{1}{\psi(x)} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) \right] = G \quad (3.24)$$

$$\frac{1}{\varphi(t)} \left[i\hbar \frac{d\varphi(t)}{dt} \right] = G \quad (3.25)$$

Fazendo transposições na equação (3.25)

$$\begin{aligned} \frac{d\varphi(t)}{dt} &= \frac{G}{i\hbar} \varphi(t) \\ \frac{d\varphi(t)}{dt} &= -\frac{iG}{\hbar} \varphi(t) \end{aligned} \quad (3.26)$$

observando a equação diferencial (3.26) vemos que a função $\varphi(t)$ tem a propriedade de sua primeira derivada ser proporcional a própria função exponencial. Desse modo, vamos supor que a solução desta equação é da forma

$$\varphi(t) = e^{\alpha t} \quad (3.27)$$

onde α é uma constante a ser determinada.

Derivando a equação (3.27) podemos verificar a solução

$$\frac{d\varphi(t)}{dt} = \alpha e^{\alpha t} = \alpha \varphi(t) \quad (3.28)$$

Substituindo na equação (3.26), obtemos

$$\alpha \varphi(t) = -\frac{iG}{\hbar} \varphi(t)$$

fazendo

$$\alpha = -\frac{iG}{\hbar}$$

e substituindo na equação (3.27), temos

$$\varphi(t) = e^{-\frac{iGt}{\hbar}} \quad (3.29)$$

que é a solução da equação (3.25).

Esta solução representa uma onda que oscila no tempo com frequência angular dada por

$$\omega = \frac{G}{\hbar} \quad (3.30)$$

Comparando a equação (3.30) com a equação (3.1)

$$\frac{G}{\hbar} = \frac{E}{\hbar}$$

obtemos

$$G = E \quad (3.31)$$

ou seja, a constante de separação G é igual a energia total E .

Assim, as equações (3.24) e (3.29) podem ser reescritas, respectivamente, como

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (3.32)$$

e

$$\varphi(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad (3.33)$$

A equação (3.32) é chamada de equação de Schroedinger independente do tempo, pois a variável t não aparece na equação.

Então, nos casos onde a energia potencial não depende explicitamente do tempo, a forma da função de onda fica

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad (3.34)$$

As funções $\psi(x)$ são chamadas de autofunções. Para serem uma solução aceitável da equação de Schroedinger independente do tempo, as autofunções $\psi(x)$ e sua derivada $\frac{d\psi(x)}{dx}$ devem ser finitas, unívocas e contínuas.

3.6 Solução da Equação de Schroedinger para um Poço de Potencial Quadrado

Como, o objetivo deste trabalho é mostrar, usando um programa, a evolução de uma partícula em um potencial quadrado, nos restringiremos a comentar sobre este potencial, nesta seção em que buscamos uma solução para a Equação de Schroedinger.

3.6.1 Poço de Potencial Quadrado Finito

Os poços de potencial finito e infinito possuem a propriedade de confinar o movimento de partículas em determinadas regiões do espaço.

A energia potencial nesse caso pode ser descrita como

$$V(x) = V_0 \text{ se } x < -\frac{a}{2} \text{ ou } x > +\frac{a}{2}$$

$$V(x) = 0 \text{ se } -\frac{a}{2} < x < +\frac{a}{2}$$

A figura 3.3 representa um poço de potencial finito para uma partícula com energia total $E < V_0$.

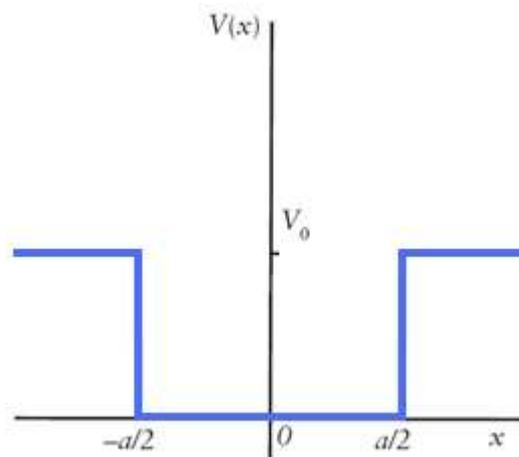


Fig. 3.3 – Poço de potencial quadrado

As previsões da teoria quântica podem ser obtidas a partir da solução da equação de Schroedinger independente do tempo, eq. (3.32).

Para $V(x) = 0$

Como no interior do poço de potencial $V(x) = 0$, substituindo esse valor na equação de Schroedinger independente do tempo, temos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \quad (3.35)$$

De acordo com a equação (3.34), as soluções da equação acima são $\psi(x)$ e $\Psi(x, t)$. Sabemos que a equação (3.3) é uma forma para a função de onda da partícula livre. Reescrevendo a equação (3.3) na forma de exponencial, encontramos

$$\Psi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)} \quad (3.36)$$

onde

$$k = \frac{p}{\hbar} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad e \quad \omega = \frac{E}{\hbar} \quad (3.37)$$

são, respectivamente, o número de onda angular e a frequência angular.

Fazendo essa equação (3.36) como um produto de dois fatores, fica assim

$$\Psi(x, t) = e^{ikx} e^{-i\omega t} = e^{ikx} e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

comparando com a equação (3.34)

$$\psi(x) e^{-\frac{iEt}{\hbar}} = e^{ikx} e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

obtemos

$$\psi(x) = e^{ikx} \quad (3.38)$$

existindo uma onda se propagando no sentido contrário, sua função de onda será

$$\Psi(x, t) = e^{i(-kx - \omega t)} \quad (3.39)$$

e sua autofunção será escrita como

$$\psi(x) = e^{-ikx} \quad (3.40)$$

Podemos ver que as autofunções (3.39) e (3.40) são soluções da equação de Schroedinger independente do tempo para $V(x) = 0$. Portanto, a solução geral da equação na região dentro do poço é

$$\psi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad \text{para } -\frac{a}{2} < x < +\frac{a}{2} \quad (3.41)$$

onde A e B são constantes arbitrárias e $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.

A descrição clássica da partícula oscilando sugere que as autofunções estão se movendo em sentidos opostos. Combinando as duas constantes $A=B$, resulta em uma onda estacionária, assim

$$\psi(x) = B(e^{ik_1x} - e^{-ik_1x}) = 2B \cos k_1x = B' \cos k_1x \quad (3.42)$$

onde $B' = 2B$. Pode-se obter também uma onda estacionária fazendo $B = -A$. Isto é,

$$\psi(x) = A(e^{ik_1x} - e^{-ik_1x}) = 2iA \sin k_1x = A' \sin k_1x \quad (3.43)$$

onde $A' = 2iA$.

Como ambas as equações 3.42 e 3.43, são soluções da equação de Schroedinger independente do tempo para o mesmo valor de E , sua soma

$$\psi(x) = A' \sin k_1x + B' \cos k_1x \quad \text{para } -\frac{a}{2} \leq x \leq +\frac{a}{2} \quad (3.44)$$

também é uma solução na região dentro do poço.

Para $V(x) = V_0$

As soluções para a equação de Schroedinger independente do tempo nas duas regiões fora do poço potencial, ou seja, $x < -\frac{a}{2}$ e $x > +\frac{a}{2}$, serão

$$\psi(x) = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x} \quad \text{para } x < -\frac{a}{2} \quad (3.45)$$

e

$$\psi(x) = Fe^{k_2x} + Ge^{-k_2x} \quad \text{para } x > +\frac{a}{2} \quad (3.46)$$

em que $k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$.

A validade das soluções para qualquer valor das constantes arbitrárias C , D , F e G podem ser verificadas substituindo-as na equação abaixo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_0\psi(x) = E\psi(x) \quad (3.47)$$

Pode-se obter autofunções aceitáveis para qualquer x juntando-se as soluções atribuídas a cada região. As três formas envolvem seis constantes arbitrárias A' , B' , C , D , F e G . para evitar que $\psi(x) \rightarrow \infty$, quando $x \rightarrow -\infty$ na equação 3.45 deve-se assumir $D=0$ e $F=0$.

Na figura 3.4 é mostrada os três autovalores de energia mais baixas (E_1 , E_2 , E_3) de um poço de potencial quadrado para uma partícula com energia total $E < V_0$.

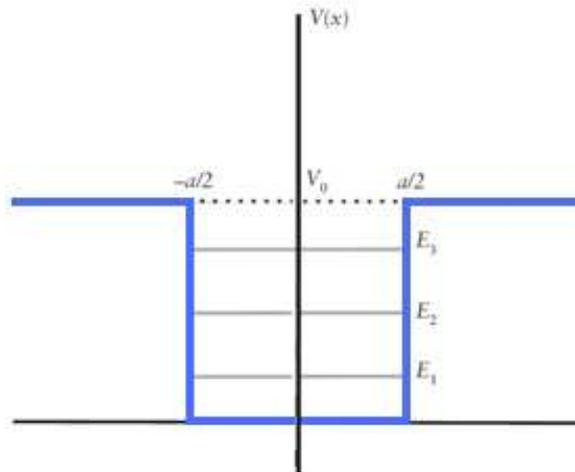


Fig. 3.4 – Poço de potencial quadrado com três autovalores dos estados ligados.

As funções de onda associadas às energias E_1 , E_2 e E_3 têm as formas indicadas na figurara 3.5.

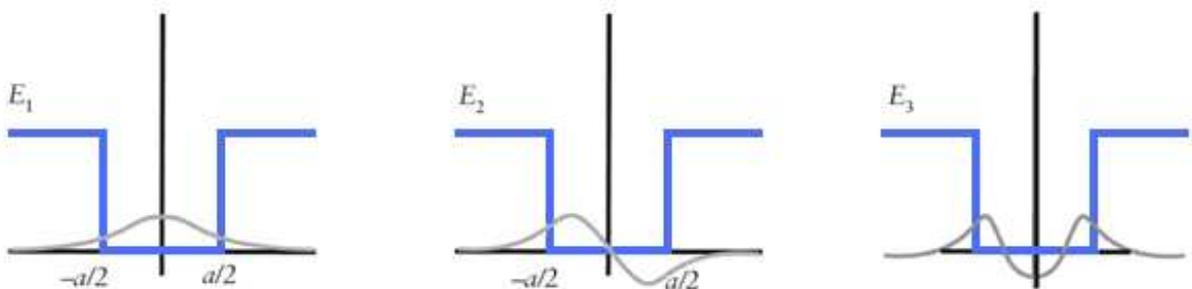


Fig. 3.5 – Três autofunções do poço de potencial quadrado.

3.6.2 Poço de Potencial Quadrado Infinito

A figura 3.6 ilustra um poço de potencial quadrado infinito.

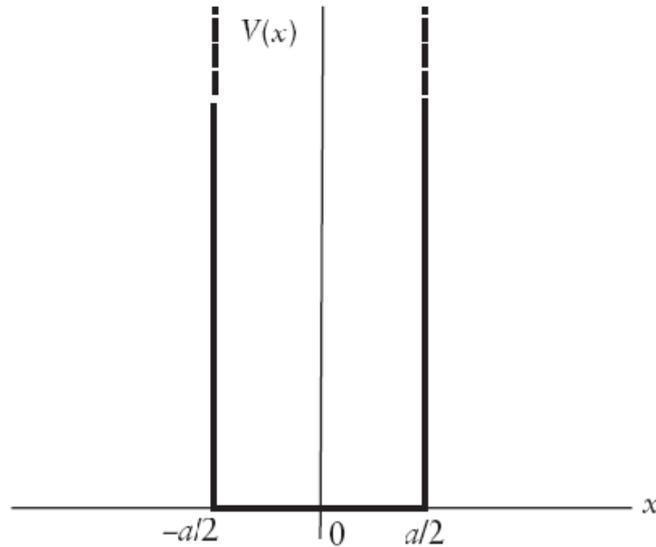


Fig. 3.4 – Poço de potencial quadrado infinito.

O poço de potencial quadrado infinito é descrito como

$$V(x) = \infty \text{ se } x < -\frac{a}{2} \text{ ou } x > +\frac{a}{2}$$

$$V(x) = 0 \text{ se } -\frac{a}{2} < x < +\frac{a}{2}$$

Na região dentro do poço, a solução geral da equação de Schroedinger independente do tempo é escrita como a equação 3.44

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx \quad \text{para } -\frac{a}{2} \leq x \leq +\frac{a}{2} \quad (3.48)$$

onde $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.

O potencial torna-se infinito quando $x \leq -\frac{a}{2}$ e $x \geq +\frac{a}{2}$, dessa maneira a equação de Schroedinger (eq. 32) só terá sentido nessas regiões se $\psi(x) = 0$.

Fazendo $x = -\frac{a}{2}$ e aplicando na equação (3.48) obtemos

$$\begin{aligned} A \sin\left(-\frac{ka}{2}\right) + B \cos\left(-\frac{ka}{2}\right) &= 0 \\ -A \sin \frac{ka}{2} + B \cos \frac{ka}{2} &= 0 \end{aligned} \quad (3.49)$$

Para $x = +\frac{a}{2}$, temos

$$A \sin \frac{ka}{2} + B \cos \frac{ka}{2} = 0 \quad (3.50)$$

Somando as equações (3.49) e (3.50), obtemos

$$2B \cos \frac{ka}{2} = 0 \quad (3.51)$$

Subtraindo as equações (3.49) e (3.50), temos

$$2A \sin \frac{ka}{2} = 0 \quad (3.52)$$

Quando (3.51) e (3.52) são satisfeitas, $\psi(x)$ e $\frac{d\psi(x)}{dx}$ serão finitas e unívocas em todos os pontos e $\psi(x)$ será contínua em todos os pontos. Para satisfazer essas equações é necessário assumir uma das seguintes condições:

$$\cos \frac{ka}{2} = 0 \quad \text{e} \quad A = 0 \quad (3.53)$$

e

$$\sin \frac{ka}{2} = 0 \quad \text{e} \quad B = 0 \quad (3.54)$$

Assim, existem dois tipos de soluções:

Para o primeiro tipo,

$$\psi(x) = B \cos kx \quad \text{onde} \quad \cos \frac{ka}{2} = 0 \quad (3.55)$$

Para o segundo tipo,

$$\psi(x) = A \sin kx \quad \text{onde} \quad \sin \frac{ka}{2} = 0 \quad (3.56)$$

Os valores possíveis para k no primeiro tipo, na equação (3.55), são

$$\frac{ka}{2} = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \frac{5\pi}{2}, \dots$$

$$k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (3.57)$$

Os valores possíveis de k para o segundo tipo, na equação (3.56), são

$$\frac{ka}{2} = \pi, 2\pi, 3\pi, \dots$$

$$k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 2, 4, 6, \dots \quad (3.58)$$

Em síntese, as soluções da equação de Schroedinger independente do tempo para um poço de potencial quadrado infinito são

$$\psi_n(x) = B_n \cos k_n x \quad \text{onde} \quad k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (3.59)$$

e

$$\psi_n(x) = A_n \sin k_n x \quad \text{onde} \quad k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 2, 4, 6, \dots \quad (3.60)$$

3.7 Programa para a Função de Onda

Nesta seção falarei brevemente e em uma linguagem simples, sobre o programa utilizado para criar a ilustração do pacote de ondas. Não irei entrar em detalhes sobre o programa Fortran 90 utilizado para compilar os arquivos e nem sobre os cálculos empregados, pois os mesmos não foram desenvolvidos por mim, apenas foram cedidos para que fosse criada uma ilustração da propagação de um pacote de ondas. Por esse motivo o material se encontra em ANEXO.

O programa criado, ver ANEXO B, descreve uma função de onda evoluindo no tempo através de um potencial, e utiliza os métodos que se encontram no ANEXO A.

Após o programa fazer a compilação para um determinado tempo escolhido, os dados são utilizados em outro programa, o OringinPro, para que seja criado um gráfico da função de onda. Depois de várias compilações para vários tempos diferentes, os gráficos são colocados no PowerPoint e apresentado em forma de filme, e assim, vemos a onda se movimentando, ou melhor, evoluindo no tempo.

CONCLUSÃO

Através desse trabalho de conclusão de curso foi possível aprender como a física quântica se desenvolveu ao longo dos primeiros 25 anos do século XX. Mas ela estava incompleta, até que a nova mecânica quântica foi elaborada entre 1925 e 1927, e um dos colaboradores foi Schroedinger, que desenvolveu sozinho as suas bases. O papel de Born na interpretação da equação de Schroedinger foi muito importante, pois ele sugeriu uma interpretação probabilística para esta equação. Ou seja, a probabilidade de encontrar uma partícula em um determinado lugar é dada por $|\Psi|^2$.

As soluções da equação de Schroedinger fornecem muitas informações a respeito de uma partícula, tais como, posição, momentum, energia e várias outras grandezas, o que nos dá uma idéia, mesmo que probabilística, do comportamento e da evolução do movimento da partícula.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

CARUSO, Francisco; OGURI, Vitor. **Física Moderna: Origens Clássicas e Fundamentos Quânticos**. Rio de Janeiro: Elsevier, 2006.

CAMINHO, Alexandre. Ondas, mulheres e DNA. **Revista Galileu**, São Paulo, jan. 2005. Disponível em: <http://revistagalileu.globo.com/EditoraGlobo/componentes/article/edg_article_print/1,3916,883991-2680-1,00.html>. Acesso em: 29 dez. 2007.

Compaq Visual Fortran Professional Edition 6.10. [S.I]: Digital Equipment Corporation, 1999. 1 CD-ROM.

EISBERG, Robert; RESNICK, Robert. **Física Quântica: Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas**. Rio de Janeiro: Editora Campus, 1979.

JUNIOR, Olival Freire; NETO, Rodolfo Alves de Carvalho. **O universo dos quanta: uma breve história da Física Moderna**. São Paulo: FTD, 1997.

Microsoft Office PowerPoint 2007. [S.I]: Microsoft Corporation, 2007. 1 CD-ROM.

Nobel Prize. Erwin Schrödinger. Disponível em: <http://nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1933/schrodinger-bio.html>. Acesso em: 7 jan. 2008.

NUSSENZVEIG, H. Moysés. **Curso de Física Básica: Ótica, Relatividade, Física Quântica**. São Paulo: Editora Edgard Blücher Ltda, 1998.

O'CONNOR, J. J.; ROBERTSON, E. F. Erwin Rudolf Josef Alexander Schrödinger. **University of St Andrews**. Scotland, out. 2003. Disponível em: <<http://www-history.mcs.st-andrews.ac.uk/Biographies/Schrodinger.html>>. Acesso em: 15 out. 2008.

OriginPro 7.0. [S.I]: OriginLab Corporation, 2002. 1 CD-ROM.

SANTOS, Carlos Alberto dos. O Indiana Jones do núcleo atômico. **Ciência Hoje**, Rio de Janeiro, jun. 2008. Disponível em: <<http://cienciahoje.uol.com.br/122576>>. Acesso em: 3 dez. 2008.

SCIENTIFIC AMERICAN BRASIL. Gênios da Ciência Quântica, Quânticos: Os homens que mudaram a física. São Paulo: Duentto editorial, n° 13, 2006.

SERWAY, Raymond A. **Física Moderna, Relatividade, Física Atômica e Nuclear**. Rio de Janeiro: LTC, 1996.

TIPLER, Paul A. **Física Moderna: Mecânica Quântica, Relatividade e a Estrutura da matéria**. Rio de Janeiro: LTC, 2000.

ANEXO A – Propagação do pacote de ondas

Transformada de Fourier

Definindo $g(k)$ a transformada de Fourier da função $f(x)$ e $f(x)$ sua inversa:

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{ikx} dx \quad (1)$$

e

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{-ikx} dk \quad (2)$$

Definindo $g(k) = \sqrt{2\pi}F(-k)$, temos

pela equação (1)

$$\sqrt{2\pi}F(-k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{ikx} dx$$

$$F(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx \quad (3)$$

pela equação (2)

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{2\pi}F(-k) e^{-ikx} dk$$

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\infty}^{-\infty} \sqrt{2\pi}F(k) e^{ikx} (-dk)$$

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} F(k) e^{ikx} dk \quad (4)$$

As equações (3) e (4) são, respectivamente, a transformada e a transformada inversa de Fourier.

Outra definição para a transformada de Fourier:

Adotando

$$g(k) = \frac{H(-\omega)}{\sqrt{2\pi}}$$

onde $k = 2\pi\omega$, obtemos pela equação (1)

$$\frac{H(-\omega)}{\sqrt{2\pi}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{i2\pi\omega x} dx$$

$$H(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-i2\pi\omega x} dx \quad (5)$$

e pela equação (2)

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{H(-\omega)}{\sqrt{2\pi}} e^{-i2\pi\omega x} dk$$

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\infty}^{-\infty} \frac{H(\omega)}{\sqrt{2\pi}} e^{i2\pi\omega x} (-2\pi d\omega)$$

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} H(\omega) e^{i2\pi\omega x} dk \quad (6)$$

Em que a equação (5) é a transformada de Fourier e a equação (6) é a inversa.

Definindo a função $\psi(x, 0)$

Seja a equação de Schroedinger:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x, t) \quad (7)$$

cuja solução é dada pela equação (8)

$$\frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2mi\hbar} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + \frac{1}{i\hbar} V(x)\psi(x, t)$$

$$\frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar} V(x)\psi(x, t)$$

$$\frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left[\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar} V(x) \right] \psi(x, t)$$

$$\psi(x, t) = e^{\frac{i\hbar t}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{it}{\hbar} V(x)} \psi(x, 0) \quad (8)$$

onde $\psi(x, 0)$ é a função que representa o pacote de ondas.

Fazendo

$$A \equiv \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

e

$$B \equiv -\frac{i}{\hbar} V(x)$$

temos

$$\psi(x, t) = e^{(A+B)t} \psi(x, 0)$$

$$e^{(A+B)t} = \left[e^{(A+B)\frac{t}{N}} \right]^N = \left[e^{(A+B)\varepsilon} \right]^{\frac{t}{\varepsilon}}$$

onde $\varepsilon = t/N$

$$e^{(A+B)t} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[e^{(A+B)\varepsilon} \right]^{\frac{t}{\varepsilon}}$$

Como não é possível trabalhar com infinitos termos na linguagem computacional, é necessário limitar o número de termos e associar um erro ε a esta função, assim, temos

$$e^{(A+B)\varepsilon} = e^{\left(\frac{B}{2} + A + \frac{B}{2}\right)\varepsilon} \approx e^{\frac{B}{2}\varepsilon} e^{A\varepsilon} e^{\frac{B}{2}\varepsilon} + o\varepsilon^n$$

$$\psi(x, t) = \left[e^{-\frac{i\varepsilon}{2\hbar}V(x)} e^{\frac{i\hbar\varepsilon}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}} e^{-\frac{i\varepsilon}{2\hbar}V(x)} \right] \dots \left[e^{-\frac{i\varepsilon}{2\hbar}V(x)} e^{\frac{i\hbar\varepsilon}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}} e^{-\frac{i\varepsilon}{2\hbar}V(x)} \right] \psi(x, 0) \quad (9)$$

em que

$$\left[e^{-\frac{i\varepsilon}{2\hbar}V(x)} e^{\frac{i\hbar\varepsilon}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}} e^{-\frac{i\varepsilon}{2\hbar}V(x)} \right] \dots \left[e^{-\frac{i\varepsilon}{2\hbar}V(x)} e^{\frac{i\hbar\varepsilon}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}} e^{-\frac{i\varepsilon}{2\hbar}V(x)} \right]$$

são N termos.

Queremos

$$e^{\frac{i\hbar\varepsilon}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}} f(x)!$$

então, escrevo $\psi(x, 0)$ em forma de transformada de Fourier

$$e^{\frac{i\hbar\varepsilon}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}} \psi(x, 0) = e^{\frac{i\hbar\varepsilon}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{ikx} dk$$

$$e^{\frac{i\hbar\varepsilon}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}} \psi(x, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{\frac{i\hbar\varepsilon}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}} e^{ikx} dk$$

$$e^{\frac{i\hbar\varepsilon}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}} e^{ikx} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i\hbar\varepsilon}{2m} \right)^n \frac{\partial^{2n}}{\partial x^{2n}} e^{ikx}$$

$$e^{\frac{i\hbar\varepsilon}{2m}\partial x^2} e^{ikx} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i\hbar\varepsilon}{2m}\right)^n (ik)^{2n} e^{ikx}$$

$$e^{\frac{i\hbar\varepsilon}{2m}\partial x^2} e^{ikx} = e^{\frac{i\hbar\varepsilon}{2m}(ik)^2} e^{ikx}$$

$$e^{\frac{i\hbar\varepsilon}{2m}\partial x^2} e^{ikx} = e^{-\frac{i\hbar\varepsilon k^2}{2m}} e^{ikx}$$

portanto

$$e^{\frac{i\hbar\varepsilon}{2m}\partial x^2} \psi(x, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{-\frac{i\hbar\varepsilon k^2}{2m}} e^{ikx} dk \quad (10)$$

onde

$$g(k) e^{-\frac{i\hbar\varepsilon k^2}{2m}} e^{ikx}$$

é a nova função.

Partícula livre $V(x) = 0$

$$\psi(x, t) = e^{\frac{i\hbar t}{2m}\partial x^2 - \frac{it}{\hbar}V(x)} \psi(x, 0)$$

$$\psi(x, t) = e^{\frac{i\hbar t}{2m}\partial x^2} \psi(x, 0)$$

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{-\frac{i\hbar\varepsilon k^2 t}{2m}} e^{ikx} dk$$

A transformada de Fourier inversa é encontrada fazendo $\psi(x, 0)$!, para o tempo que se quer.

ANEXO B – Programa em linguagem Fortran para a função de onda

```

!*****
!oooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooo
!
!
!           Este Programa apresenta a
!
!           EVOLUÇÃO TEMPORAL
!
!           PARA UMA PARTÍCULA NA PRESENÇA
!
!           DE UM POTENCIAL QUADRADO
!
!            $V(x) = 0$ 
!
!           para uma função de onda
!
!oooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooo

Program TCC
Implicit None

Integer:: N,I,INV,NpassoT
Integer,Parameter:: NB = 11

Double Precision:: deltax,x,x0,sigma,pi,w0,w,t,fator,dt
Double Precision:: C3

Double Complex:: tfator
Double Complex:: Psi_But,Func_But(0:2*Nb-1)

Common/Func/pi,deltax,x0,sigma,w0

!oooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooo

open(10,file="1Butkov_Pot.dat",status="unknown")

!oooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooo

! Declaração dos Valores:

N      = 2*Nb
deltax = 3.0d0

x0     = 2500.0d0
sigma  = 100.0d0
pi     = 4.0d0*datan(1.0d0)
w0     = -1.0d-2

```



```
Return
End Function Psi_But
```

```
!oooooooooooooooooPotencial Quadradoooooooooooooooooo
```

```
Double Precision Function V(x)
Implicit None
```

```
Double Precision:: x,xo,aux
```

```
xo=3000.0d0
```

```
! If (x.le.xo) Then
```

```
aux=2.0d-11*(x-xo)**2
```

```
! Else
```

```
! aux=0.0d0
```

```
! End If
```

```
V=aux
```

```
Return
```

```
End Function V
```

```
!*****
```

```
!%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
!ooooooooooooooooooooooooooooooooooooSub-Rotina FFToooooooooooooooooooooooooooooooooooo
```

```
SUBROUTINE BR(NB,TRANS,INV)
IMPLICIT NONE
```

```
INTEGER :: INV,N,NB,i,aux,iaux,j,jaux,nk,k,na,nc
DOUBLE COMPLEX :: TRANS(0:2**NB-1),PRIME(0:2**NB-1),temp,W
DOUBLE PRECISION :: pi
```

```
pi=4.0d0*datan(1.0d0)
N=2**NB
```

```
do i=0,N-1
```

```
aux=0
iaux=i
```

```
do j=1,NB
```

```
jaux=iaux
iaux=iaux/2
jaux=jaux-2*iaux
aux=aux+jaux*2**(NB-j)
```

```

enddo

if (aux.gt.i) then

temp=TRANS(i)
TRANS(i)=TRANS(aux)
TRANS(aux)=temp

endif

enddo

nk=1

if ((INV.eq.0).or.(INV.eq.1)) then

    INV=(-1)**INV

else

    stop 'wrong INV'

endif

do i=1,NB

    nk=nk*2

W=dcmplx(dcos(2.0d0*pi/dfloat(nk)),dfloat(INV)*dsin(2.0d0*pi/dfloat(nk)))
k=0

do j=0,N/2-1

    na=j/2**(NB-i)
nc=(j+N/2)/2**(NB-i)
temp=TRANS(k)+(W**na)*TRANS(k+1)
PRIME(j+N/2)=TRANS(k)+(W**nc)*TRANS(k+1)
PRIME(j)=temp
k=k+2

    enddo

do j=0,N-1

    TRANS(j)=PRIME(j)

enddo

enddo

return

END SUBROUTINE BR

!*****
!ooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooooSub-RotinaLaplaceoooooooooooooooooooooooooooooooooooo

```

```

Subroutine LAPLACE(NB,TRANS,deltax,dt)
Implicit None

Integer :: NB,N,INV,I
Double Complex :: TRANS(0:2**NB-1),tfator
Double Precision :: deltax,dt,w

N = 2**NB
!.....

    INV = 0

    Call BR(NB,TRANS,INV)

    Do I=N/2,N-1

        w = dfloat(I-N)/(N*deltax)
        tfator = dcmplx(dcos(dt*w**2),-dsin(dt*w**2))
        TRANS(I) = tfator*TRANS(I)

    End Do

    Do I=0,N/2-1

        w = dfloat(I)/(N*deltax)
        tfator = dcmplx(dcos(dt*w**2),-dsin(dt*w**2))
        TRANS(I) = tfator*TRANS(I)

    End Do
!.....

    INV = 1
    Call BR(NB,TRANS,INV)

    TRANS=TRANS/Dfloat(N)

    Return

End Subroutine LAPLACE

!*****
!oooooooooooooooooooooooooooooSub-Rotina Potencialooooooooooooooooooooo

Subroutine POT(NB,TRANS,deltax,dt)
Implicit None

Integer :: NB,N,I
Double Complex :: TRANS(0:2**NB-1),vfator
Double Precision :: deltax,dt,x,V

N = 2**NB

Do I=0,N-1

x = dfloat(I)*deltax
vfator = dcmplx(dcos(V(x)*dt),-dsin(V(x)*dt))
TRANS(I) = vfator*TRANS(I)

```

```

End Do

Return

End Subroutine POT

!*****
!ooooooooooooooooooooooooooooSub-Rotina Propagadoroooooooooooooooooooo

Subroutine PROPAGADOR(NB,TRANS,deltax,t,dt)
Implicit None

Integer :: NB,N,NpassoT,i

Double Complex :: TRANS(0:2**NB-1)
Double Precision :: deltax,t,dt

N      = 2**NB

NpassoT = dint(t/dt)

Print*,'t=',int(t)

!      dt      = t/NpassoT

Call POT(NB,TRANS,deltax,dt/2.0d0)
Call LAPLACE(NB,TRANS,deltax,dt)

Do I=1,NpassoT-1

!.....
!      If (I.gt.99) Then                                !
!                                                    !
!              If (MOD(I,100).eq.0) Then                !
!                  Print*,I                             !          *****
!                  End If                               !          CONTADOR
!              End If                                   !          *****
!      End If                                           !
!.....

Call POT(NB,TRANS,deltax,dt)
Call LAPLACE(NB,TRANS,deltax,dt)

End Do

Call POT(NB,TRANS,deltax,dt/2.0d0)

Return

End Subroutine PROPAGADOR

```

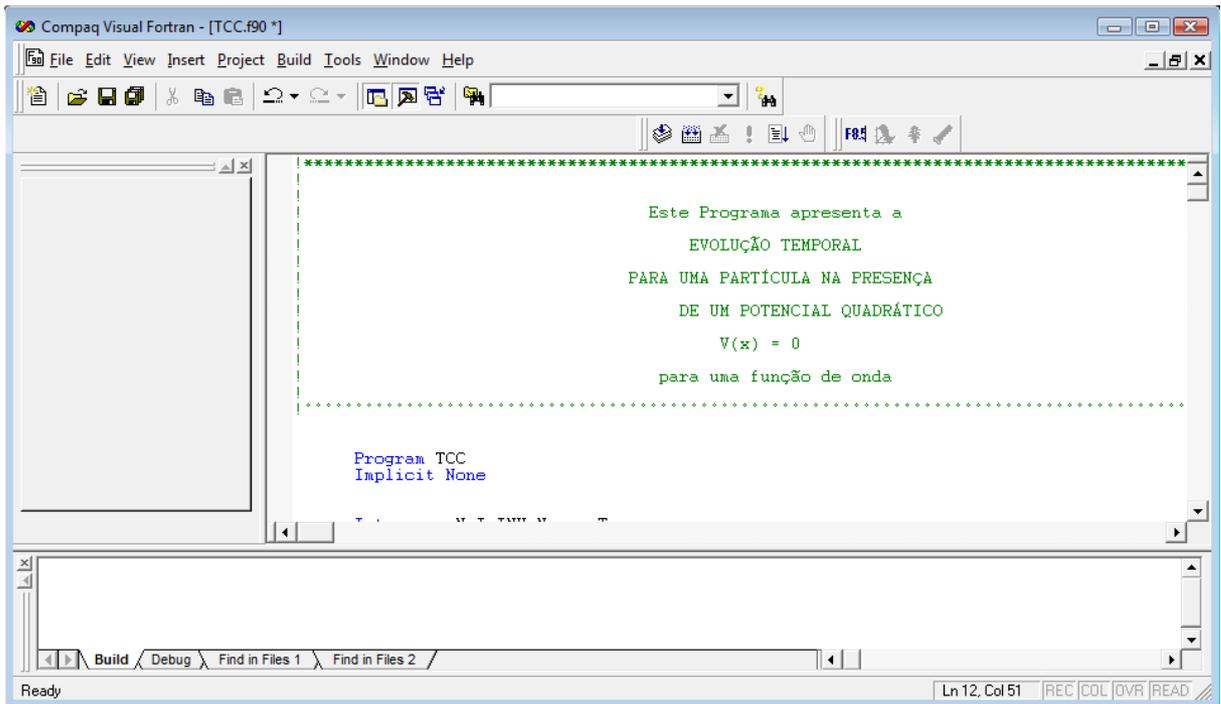


Imagem do programa Fortran 90

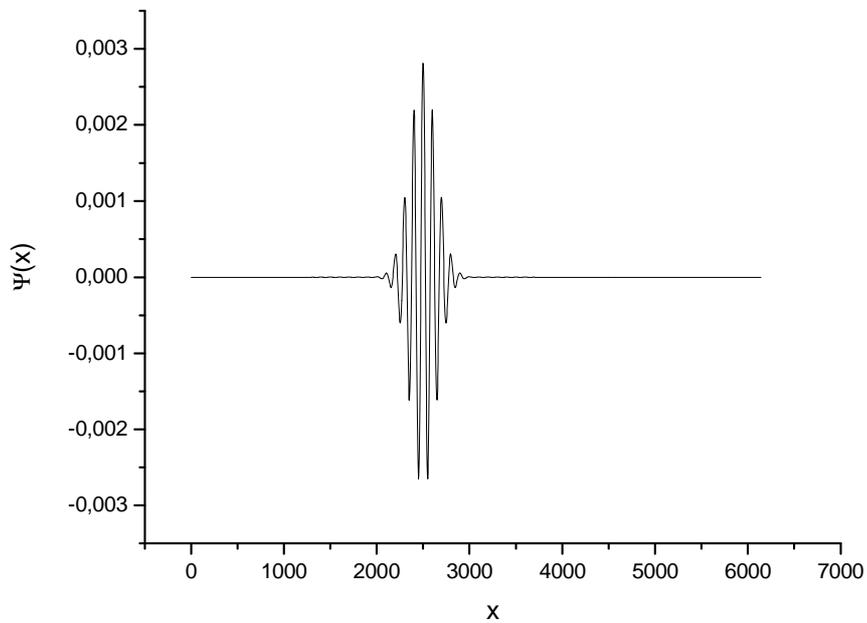


Imagem de um pacote de ondas obtido através dos programas Fortran 90 e OringinPro