

A Equação de Schroedinger e a consolidação da Mecânica Quântica: argumentação heurística, formulação algébrica e impacto na Ciência Moderna.

The Schroedinger's Equation and the Quantum Mechanics consolidation: heuristic argumentation, algebraic formulation and impact in the Modern Science.

Jailton Filho ¹

RESUMO

Na virada para o século passado, a quantização de Planck revolucionou a mecânica do muito pequeno. Sua constante (h) se tornou a lente objetiva ideal que permitiu uma observação algébrica e microscópica no interior da matéria, necessária ao entendimento da radiação emitida por objetos aquecidos, possibilitando a modelagem capaz de descrever o comportamento, por meio das características discretas próprias dos níveis energéticos, provenientes da excitação atômica. O avanço na compreensão ao estudo do espaço diminuto do átomo teve continuidade com a interpretação ondulatória da matéria, graças ao comprimento de onda ($\lambda = h/p$) de de Broglie, fato determinante para a formulação da função de onda do elétron, apresentada por Schroedinger, consolidando a Mecânica Quântica como Ciência elementar, crucial ao desenvolvimento tecnológico do mundo moderno. Neste artigo, vamos apresentar uma proposta algébrica que formaliza a Equação de Schroedinger, bem como enfatizar o quão revolucionário foi a inspiração por trás da argumentação dessa expressão, citando algumas das suas inúmeras aplicações tecnológicas, basilares à edificação da Física Moderna como mecanismo indispensável à interpretação daquilo que entendemos por realidade.

Palavras-chave: Equação de Schroedinger, Argumentação, Mecânica Quântica, Consolidação.

¹ Licenciado em Física pela Universidade Federal de Sergipe (UFS).

ABSTRACT

At the turn of the last century, Planck's quantization revolutionized the mechanics of the very small. Its constant (h) became the ideal objective lens that allowed an algebraic and microscopic observation inside the matter, necessary to understand the radiation emitted by heated objects, making possible the modeling capable of describing the behavior, through the discrete characteristics of the levels energy from atomic excitation. The advance in understanding the study of the tiny space of the atom continued with the wave-like interpretation of matter, thanks to the de Broglie wavelength ($\lambda = h/p$), a determining factor for the formulation of the wave function of the electron, presented by Schroedinger, consolidating Quantum Mechanics as an elementary Science, crucial to the technological development of the modern world. In this paper, we will present an algebraic proposal that formalizes the Schroedinger Equation, as well as emphasize how revolutionary the inspiration behind the argumentation of this expression was, citing some of its numerous technological applications, fundamental to the construction of Modern Physics as an indispensable mechanism for interpretation of that we mean by reality.

Keywords: Schroedinger's Equation, Argumentation, Quantum Mechanics, Consolidation.

1. INTRODUÇÃO

A natureza ondulatória da luz é fato conhecido da Ciência desde a comprovação de tal comportamento mostrado pelos experimentos de dupla fenda, elaborados por Thomas Young em 1801. Um século depois, a comunidade dos físicos acreditava que os estudos sobre as características da radiação luminosa já estavam consolidados, tendo a explicação dos fenômenos observados totalmente descrita pela Física, propagando-se, inclusive que posteriores lacunas seriam preenchidas com base nas aplicações das equações da Mecânica Clássica de Issac Newton e do Eletromagnetismo de Clerk Maxwell.

No entanto, o clássico modelo utilizado, tido como suficiente, não se enquadrava na modelagem comportamental da radiação térmica proveniente do aquecimento dos fornos, fato incansavelmente estudado por Max Planck no início dos anos 1900. Por conta da enorme discrepância entre as curvas obtidas pelos experimentos e as previstas pela proposta clássica, ele formalizou uma nova e revolucionária proposta, que ficou conhecida como *quantização da luz*, apresentada aos cientistas, com uma notória precisão teórica que se devia, sobretudo, a implementação de uma

constante de proporcionalidade (h) entre a Energia (E) e a frequência de vibração (ν) dos átomos aquecidos termicamente (FILHO, 2020, p. 5-6).

Eis que surge a Física Quântica, que passou a ter papel determinante nos anos seguintes à apresentação de Planck, principalmente por conta das suas aplicações descritas através do *Efeito Fotoelétrico*, cujo entendimento se embasava em um modelo corpuscular da luz, em que cada uma das suas partículas (fótons) carregam consigo pacotes (*quanta*) de energia que são os percursos da excitabilidade atômica, os quais foram explicados de forma simples e brilhante pela genial mente de Albert Einstein, evidenciando assim que uma nova interpretação do mundo subatômico urgia em ser modelada.

Com a aceitação da característica dual da luz, tendo seu comportamento observado ora como onda, ora como partícula – a depender do fenômeno estudado -, Louis de Broglie extrapolou tal dualidade a todos os entes da matéria e em 1924, mostrou por meio dos seus cálculos que o universo microscópico era descrito por uma dada função de onda, cujos efeitos ondulatórios se faziam essenciais em escalas diminutas, mas desprezíveis a nível macroscópico (EISBERG; RESNICK, 1979, p. 85). Motivado, inspirado e instigado por mostrar de maneira satisfatória a forma dessa função de onda que rege as partículas elementares, Erwin Schroedinger apresentou à comunidade acadêmica a sua “equação do elétron” em 1926, descrevendo algebricamente o comportamento atômico e proporcionando assim, o surgimento de uma nova ramificação da Física, a Mecânica Quântica, que se tornou a Ciência do mundo microscópico, essencial à explicação das interações moleculares - através dos estudos consequentes da formulação discreta para a energia dos átomos -, possibilitando uma modelagem do interior das partículas elementares e, portanto, das formas vida, até então inexploradas.

2. A EQUAÇÃO DE SCHROEDINGER

Nesta seção, vamos abordar alguns postulados consistentes que possibilitam a argumentação heurística para a formulação algébrica da Equação de Schroedinger. Vale ressaltar, contudo, que tais passos não foram, necessariamente, seguidos por esse físico austríaco à época da sua formalização, sendo a explicação que virá a ser apresentada, uma maneira alternativa e didática de introduzir os elementos matemáticos basilares à construção da expressão que modela o comportamento do elétron.

A equação que Schroedinger obteve, pela primeira vez, em 1926, é dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}, \quad (2.1)$$

a qual, a partir daqui, iremos detalhar matematicamente cada um dos seus componentes, a fim de conceituar as ideias e motivações por trás dos elementos envolvidos na elaboração da equação supracitada.

2.1 EMBASAMENTO TEÓRICO E FORMULAÇÃO ALGÉBRICA

De Broglie, em sua proposta das “ondas de matéria”, assegurou que uma partícula livre, isto é, que se move sem a influência de forças externas, tem seu comportamento descrito através de uma função ondulatória, cujo comprimento de onda (λ) associado ao seu movimento é expresso por:

$$\lambda = \frac{h}{p}. \quad (2.1.2)$$

Na Eq. (2.1.2) temos que h é a constante de proporcionalidade teorizada por Planck, elementar na quantização da energia do átomo, cujo valor é, aproximadamente $h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ J.s}$, e no denominador temos o momento linear de uma partícula massiva² que é $p = mv$.

Deseja-se que a equação que buscamos formalizar, isto é, a expressão que rege o movimento do elétron, seja consistente com a hipótese de de Broglie, afinal tal proposta impõe uma onda ao movimento, mas não diz como é a forma da função de onda a ela associada. Além disso, precisamos assegurar que a pretensa equação esteja de acordo com o postulado de Einstein, o qual simplifica a relação da energia total (E) do átomo com sua frequência de oscilação (ν), através da seguinte expressão:

² O fóton (partícula de luz) não possui massa e tem seu momento linear calculado por $p = h/\lambda$, em que h é a constante de Planck e λ seu comprimento de onda. (N.A)

$$E = h\nu \Leftrightarrow \nu = \frac{E}{h}. \quad (2.1.3)$$

Sabe-se, por outro lado, que a energia total de um objeto em movimento é descrita como a soma de suas partes cinética (K) e potencial (V). Isto é,

$$E = K + V, \quad (2.1.4)$$

em que,

$$K = \frac{mv^2}{2}; \quad p = mv \quad (2.1.5)$$

então,

$$K = \frac{p^2}{2m}. \quad (2.1.6)$$

Assim, a Eq. (2.1.4) pode ser reescrita como:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V. \quad (2.1.7)$$

Estamos tratando de referenciar a posição de uma dada partícula em um instante temporal, ou seja, analisando um movimento em que sua energia potencial unidimensional é dada em termos de x e t . Com isso, podemos definir sem prejuízo à argumentação, que a energia total associada é;

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x, t). \quad (2.1.8)$$

A equação que desejamos obter deve ser consistente com (2.1.2), (2.1.3) e (2.1.8). Além disso, é importante ressaltar que a Eq. (2.1) é uma relação que envolve derivações parciais. Isso tem implicações diretas na forma da função de onda $\Psi(x, t)$ que vamos escolher para modelar a equação, visto que é sempre possível conseguir descrição razoável para a função de onda, quando se sabe qual é a força que atua sobre a partícula analisada, por meio do valor da sua energia potencial $V(x, t)$. As derivadas parciais, por sua vez, permitem obter várias soluções para uma dada energia potencial. Para que essas soluções sejam consistentes, é necessário impor uma condição de linearidade em $\Psi(x, t)$, com o fim de encontrar uma combinação linear arbitrária para as soluções da equação de onda. Em outras palavras, se $\Psi_1(x, t)$ e $\Psi_2(x, t)$ são duas soluções para $V(x, t)$, então, $\Psi(x, t) = c_1\Psi_1(x, t) + c_2\Psi_2(x, t)$, também é solução para a mesma energia potencial (EISBERG; RESNICK, 1979, p. 176).

Em se tratando de uma partícula livre, é justo analisar os entes presentes na função de onda $\Psi(x, t)$ considerando o caso mais simples, dado em termos de uma propagação senoidal, de modo que a equação que buscamos seja consistente com a função dada por:

$$\Psi(x, t) = \sin 2\pi \left(\frac{x}{\lambda} - vt \right) \quad (2.1.9)$$

Neste escopo, é cabível utilizar o número de onda, $k = 2\pi/\lambda$, e a frequência angular, $\omega = 2\pi v$. Assim,

$$\Psi(x, t) = \sin(kx - \omega t) \quad (2.1.10)$$

Uma vez admitindo a forma da função de onda a ser utilizada na determinação do valor da energia potencial da partícula, vamos comprovar sua linearidade efetuando as derivações parciais, necessárias, em relação a x e t . Isto é,

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} = \frac{\partial \sin(kx - \omega t)}{\partial x} = k \cos(kx - \omega t); \quad (2.1.11)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} = k \frac{\partial \cos(kx - \omega t)}{\partial x} = -k^2 \sin(kx - \omega t) ; \quad (2.1.12)$$

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial \sin(kx - \omega t)}{\partial t} = -\omega \cos(kx - \omega t) \quad (2.1.13)$$

Podemos admitir, sem perda da generalidade, que a energia potencial para o caso analisado será constante, isto é, ela não possui dependência com as variáveis da posição e do tempo. Tal fato pode ser justificado pois estamos considerando uma partícula livre, e nessa situação a energia potencial está relacionada com a força aplicada por meio da seguinte expressão:

$$-\frac{\partial V(x, t)}{\partial x} = F, \quad (2.1.14)$$

Em que, para $F = 0 \Leftrightarrow V = V_0$.

Igualando (2.1.3) e (2.1.8), temos,

$$E = \frac{p^2}{2m} + V_0 = h\nu \quad (2.1.15)$$

Mas, como $\lambda = h/p \rightarrow p = h/\lambda$, então:

$$\frac{1}{2m} p^2 + V_0 = h\nu; \quad (2.1.16)$$

$$\frac{1}{2m} \frac{h^2}{\lambda^2} + V_0 = h\nu; \quad (2.1.17)$$

Como $k = 2\pi/\lambda$ e $\omega = 2\pi\nu$,

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0 = \hbar\omega. \quad (2.1.18)$$

Por praticidade, usemos a constante reduzida de Planck, de modo a não repetir fator 2π no denominador, ao logo da demonstração. Assim,

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0 = \hbar\omega; \quad \hbar = \frac{h}{2\pi} \quad (2.1.19)$$

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0 = \hbar\omega. \quad (2.1.20)$$

As derivações apresentadas em (2.1.11), (2.1.12) e (2.1.13) nos mostraram que o fato de existir um termo igual a $-k^2$ na Eq. (2.1.20) é equivalente à derivada parcial espacial de ordem dois, aplicadas a função de onda $\Psi(x, t)$, bem como a presença do negativo da primeira derivada parcial temporal implica na inserção do termo ω . Isso se deve ao fato da linearidade das soluções da função de onda $\Psi(x, t)$, impondo sua dependência às variáveis x e t . Portanto, podemos reescrever a Eq. (2.1.20) como:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V_0 = -\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}. \quad (2.1.21)$$

Contudo, não podemos garantir que os coeficientes das derivadas presentes na equação anterior sejam $-\hbar^2/2m$ e $-\hbar$. Além disso, é preciso que a energia potencial também possua dependência com o com a função de onda $\Psi(x, t)$, por conta da relação entre elas, previamente estabelecida. Portanto, buscamos uma equação da forma:

$$\alpha \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V_0 \Psi(x, t) = \beta \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}, \quad (2.1.22)$$

em que α e β , são os coeficientes a determinar, de acordo com as condições impostas. Percebemos também que estamos considerando V_0 como a energia potencial para uma partícula livre, e queremos com isso, estabelecer dependências com alguns postulados atrelados.

A equação diferencial parcial que buscamos deve ser consistente com a hipótese de de Broglie, com a relação de Einstein e deve possuir soluções lineares em termos da forma atribuída à função de onda escolhida, como consequência do valor da energia potencial. O fato de escolhermos $\Psi(x, t) = \sin(kx - \omega t)$ não garante a consistência que desejamos, por conta da reversibilidade das derivações entre senos e cossenos (EISBERG; RESNICK, 1979, p. 177). Neste sentido, para obtermos uma equação que englobe um potencial constante de modo a satisfazer as condições de linearidade imposta pelos postulados anteriores, vamos considerar agora, uma função de onda para a partícula livre, que tenha sua propagação dada em termos da seguinte combinação linear:

$$\Psi(x, t) = \cos(kx - \omega t) + \gamma \sin(kx - \omega t), \quad (2.1.23)$$

com γ sendo uma constante a ser determinada *a posteriori*.

As derivações necessárias são:

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} = -k \sin(kx - \omega t) + k\gamma \cos(kx - \omega t); \quad (2.1.24)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} = -k^2 \cos(kx - \omega t) - \gamma k^2 \sin(kx - \omega t); \quad (2.1.25)$$

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \omega \sin(kx - \omega t) - \omega\gamma \cos(kx - \omega t). \quad (2.1.26)$$

Então,

$$\alpha \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V_0 \Psi(x, t) = \beta \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}, \quad (2.1.27)$$

$$\begin{aligned} & -\alpha k^2 \cos(kx - \omega t) - \gamma \alpha k^2 \sin(kx - \omega t) + V_0 \cos(kx - \omega t) \\ & + V_0 \gamma \sin(kx - \omega t) = \beta \omega \sin(kx - \omega t) - \beta \omega \gamma \cos(kx - \omega t). \end{aligned} \quad (2.1.28)$$

Colocando os devidos termos que se repetem em evidência, segue:

$$\cos(kx - \omega t) [-\alpha k^2 + V_0 + \beta \omega \gamma] + \sin(kx - \omega t) [-\gamma \alpha k^2 + V_0 \gamma - \beta \omega] = 0 \quad (2.1.29)$$

Essa igualdade só será válida para todas as possíveis combinações lineares, em termos independentes das variáveis espacial e temporal, se os coeficientes das funções trigonométricas forem nulos. Isto é,

$$-\alpha k^2 + V_0 + \beta \omega \gamma = 0 \leftrightarrow \boxed{-\alpha k^2 + V_0 = -\beta \omega \gamma} \quad (2.1.30)$$

e

$$-\gamma \alpha k^2 + V_0 \gamma - \beta \omega = 0 \leftrightarrow \boxed{-\alpha k^2 + V_0 = \frac{\beta \omega}{\gamma}} \quad (2.1.31)$$

Desse modo, é possível atribuir os valores para as constantes escolhidas e conseqüentemente formalizar a equação por completa. Subtraindo (2.1.30) de (2.1.31):

$$0 = -\beta \omega \gamma - \frac{\beta \omega}{\gamma}$$

$$\beta\omega\gamma = -\frac{\beta\omega}{\gamma} \leftrightarrow \gamma = -\frac{1}{\gamma}$$

$$\gamma^2 = -1 \leftrightarrow \gamma = \pm\sqrt{-1} \therefore \boxed{\gamma = \pm i}$$

Não há prejuízo para a prova a escolha do sinal do imaginário i . Adotando essa constante como positiva, temos:

$$-\alpha k^2 + V_0 = -\beta\omega\gamma \rightarrow -\alpha k^2 + V_0 = -i\beta\omega. \quad (2.1.33)$$

Por outro lado, temos que

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0 = \hbar\omega.$$

Comparando-as:

$$-\alpha k^2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \rightarrow \boxed{\alpha = -\frac{\hbar^2}{2m}} \quad (2.1.34)$$

$$-i\beta\omega = \hbar\omega$$

$$i\beta = -\hbar \rightarrow \boxed{\beta = i\hbar} \quad (2.1.35)$$

Finalmente, chegamos à forma da equação que desejávamos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t)\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}. \quad (2.1.36)$$

Essa equação está de acordo com todas as exigências algébricas necessárias à descrição do movimento eletrônico. Sua formalização constitui um marco na teoria quântica, estabelecendo uma lei matemática que rege o movimento das partículas elementares em termos da sua localização e energia associadas.³ De posse da *Equação de Schrodinger*, a Física pôde dar à luz à sua mais nova ramificação, a Mecânica Quântica, a qual permitiu um entendimento, com o devido embasamento matemático, do universo subatômico.

3. CONSOLIDAÇÃO DA MECÂNICA QUÂNTICA

“O que tem a ver aquilo que sabemos ou não sabemos com as leis que governam o mundo?” (ROVELLI, 2015, p. 64) O estudo dos entes diminutos da natureza nos remete à época em que o pensamento humano começava a criar consciência de si mesmo. Saber do que somos feitos, e como tal substância orgânica se manifesta em forma de vida pulsante, é o combustível que move a curiosidade humana. Muitos foram os postulados e notórias foram as evoluções teóricas sobre os constituintes elementares da matéria, como o estudo do átomo, por exemplo, tendo suas primeiras definições teóricas antes mesmo da humanidade possuir tecnologia para enxergar o próprio objeto estudado.

Devemos à curiosidade humana a capacidade de se conectar com aquilo que não vemos. Modelar o comportamento das partículas subatômicas da foi um marco revolucionário da Ciência, o qual foi antecedido por brilhantes teorias que possibilitaram uma nova visão frente à eletrônica. O computador em que este trabalho foi produzido, o celular que nos permite contato com todo o planeta, e o advento da internet como meio de comunicação indispensável, são típicos exemplos palpáveis da aplicação e contribuição da Mecânica Quântica em nosso cotidiano.

Das idas do homem à Lua, até a mensagem de texto criptografada em um aplicativo de celular, a Mecânica Quântica está presente. Mas o que vemos é apenas a ponta do *iceberg*, há muita matemática por trás de cada nova invenção. Diariamente, milhares de cientistas ao redor do globo (e fora dele, nas estações espaciais), se debruçam sobre cálculos - teóricos e numéricos -, enormes, a fim de aprimorar ainda mais a nossa tecnologia. A equação que foi apresentada neste artigo, tem sua importância na história da Ciência e, por isso deve ser enfatizada.

³ A posição e o momento (bem como a sua energia e o intervalo de tempo da observação) de uma partícula elementar são determinados em termos probabilísticos através do “Princípio de Incerteza”, postulado por Werner Heisenberg, em 1927. (N.A)

O desenvolvimento de um postulado é, a grosso modo, uma aceitação de veracidade e como tal deve ser questionado a fim de comprovar sua eficácia. Desde sua concepção em 1926, a Equação de Schroedinger, em suas variadas formas de apresentação e aplicação,⁴ vem sendo posta à prova por experimentos cada vez mais sofisticados e até hoje não se verificou irregularidades em sua formulação (EISBERG; RESNICK, 1979, p. 179). O entendimento dos comportamentos, por vezes bizarros, da natureza faz com que o ser humano evolua junto com a ciência estudada. A natureza insiste em nos mostrar o seu modo de agir, e os cientistas tentam forma árdua (e muitas vezes sem sucesso) mostrar de que maneira ela o faz.

4. CONSIDERAÇÕES FINAIS

O presente artigo teve o fim de evidenciar a importância da Equação de Schroedinger na Ciência e no desenvolvimento da sociedade moderna. Buscou-se explicar uma proposta algébrica consistente com o postulado apresentado por Erwin Schroedinger em 1926, trazendo uma formulação matemática, com a didática e metodologia necessárias ao entendimento das hipóteses utilizadas para demonstrar a expressão que norteia o comportamento das partículas subatômicas.

Uma vez que a matemática é a linguagem universal da Ciência, é justo evidenciar sua importância através dos cálculos que possibilitam a modelagem das características da natureza, justificando a defesa dessa disciplina presente neste trabalho, enfatizando a dedução teórica como parte fundamental do desenvolvimento experimental, cruciais ao avanço tecnológico e humanitário. Vale ressaltar que a abordagem aqui utilizada foi feita de modo a contemplar uma parte do princípio quântico, que teve sua consolidação teórica obtida por meio da equação do elétron aqui apresentada, dando início a uma série de avanços na compreensão dos comportamentos, previstos e observados, dos entes microscópicos da natureza.

⁴ A formulação presente neste artigo é válida para o movimento unidimensional do elétron, e tem sua devida extrapolação para os casos em que são consideradas as demais dimensões espaciais. No entanto, deixamos a cargo do leitor a verificação da expressão algébrica presentes nas demais formas de apresentação da Equação de Schroedinger, de posse do tratamento matemático adequado. (N. A.)

5. REFERÊNCIAS

EISBERG, Robert; RESNICK, Robert. **Física Quântica**. 35 ed. Rio de Janeiro: Elsevier, 1979.

FILHO, Jailton dos Santos. “*Quantum*: uma revolução na Física”. IN: **Revista Enforcadense de Literatura**. Nossa Senhora das Dores (SE), v. 3, n. 3, p. 5-7, set. 2020.

ROVELLI, Carlo. **Sete breves lições de física**. Rio de Janeiro: Objetiva, 2015.