Ondas de Matéria.

Equação de Schrödinger:

Vamos começar este assunto discutindo um pouco a segunda lei de Newton, pois como esta, a equação de Schrödinger tem a propriedade de descrever a natureza de uma entidade física sob determinadas condições.
A segunda lei de Newton é uma representação analítica do princípio de conservação de energia, uma vez que poderia ser reescrita como:

$$F=\frac{d}{dt}p=\frac{d}{dt}(mv)\, multiplicando\ ambos\ os\ lados\ por\ dx\ e\ integrando:$$

$$W=\int F\,dx=\int \frac{d}{dt}(mv)\,dx=\int \frac{d}{dt}(mv)\,v\,dt=\int d(1/2\,m\,v^2)=\int d\,K$$

Que é o famoso teorema Trabalho – energia, $\boxed{W=\Delta K}$

Ondas de Matéria.

Equação de Schrödinger:

Se a força deriva de um potencial, ou seja ela é conservativa! Pode-se deduzir o teorema de conservação de energia fazendo os seguintes passos:

1- Reescrever a força como

$$\vec{F} = -\nabla U \; ou - F = \frac{\partial}{\partial x} U$$

2 – Substituindo na equação do trabalho de F teremos:

$$W = \int F\,dx = -\int \frac{dU}{dx}\,dx \Rightarrow W = -\Delta U$$

Mas por outro lado vimos que,

$$W = \int F\,dx = \Delta K$$

3- Juntando os dois resultados teremos:

$$\boxed{\Delta U + \Delta K = 0 \Rightarrow \Delta(U + K) = 0 \Rightarrow \Delta E = 0}$$

Ondas de Matéria.

Equação de Schrödinger:

A aceleração pode ser obtida a partir da derivada segunda da posição. Desta forma a segunda lei de Newton produz uma equação de segunda ordem, onde em geral se conhece o campo de força. A solução desta equação produz a evolução temporal do sistema dinâmico (posição e velocidade – Energia potencial e cinética)

A equação de Erwin Schrödinger foi proposta em 1926 e rege o comportamento de ondas de matéria. Em termos matemático esta equação é uma equação diferencial de segunda ordem na posição do sistema

Em termos de energia esta equação representa o princípio de conservação de energia em termos da evolução da função de onda espacial $\psi(x,y,z)$ relacionando a energia mecânica total E e a energia potencial $U(x,y,z)$ na forma:

Ondas de Matéria.

Equação de Schrödinger:

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

Que corresponde a equação de Schrödinger unidimensional independente do tempo. O primeiro termo corresponde energia cinética multiplicado pela função de onda $\psi(\mathbf{x})$, onde o operador momento linear é representado por $-i\hbar\frac{d}{dx}$ No caso mais geral, teremos uma equação de segunda ordem de derivadas parciais que envolve o tempo e as coordenadas espaciais. Neste curso trataremos da equação de Schrödinger unidimensional dada acima e que pode ser reescrita como:

$$\boxed{\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+\frac{8\pi^2 m}{h^2}[E-U(x)]\psi(x)=0}$$

Ondas de Matéria.

Equação de Schrödinger:

A função de onda $\Psi(x,y,z,t)$ completa (solução da equação anterior) é uma grandeza complexa que em sua expressão em modos normais, pode ser separada em duas, uma envolvendo coordenadas espaciais e outra com variações harmônicas no tempo, onde i representa o número imaginário puro e ω a frequência angular:

$$\Psi(x,y,z,t)=\psi(x,y,z)e^{-i\omega t}$$

A função de onda é uma grandeza está associado a uma partícula submetida a um campo de potencial U(x) e deve, por coerência, ter amplitude alta em regiões a posição onde está a partícula e pequena em regiões distantes à ela.

Ondas de Matéria.

Equação de Schrödinger:

Em termos mais específico, **"a probabilidade de se encontrar a partícula em uma dada posição é proporcional ao quadrado da amplitude da função de onda"**

$\psi(x)^2$ é a densidade de probabilidade, enquanto $\psi(x)^2\, dx$ é probabilidade de se encontrar a partícula na posição x e $x + dx$.

Exercício para a casa. Entrega até a próxima aula, solução à mão.

a)Resolva a equação de Schrödinger unidimensional independente do tempo, reescrita a seguir, para o caso de uma partícula livre com velocidade inicial v na direção x. b) Encontre a densidade de probabilidade e explique, com suas palavras, o significado do resultado encontrado.

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+\frac{8\pi^2 m}{h^2}[E-U(x)]\psi(x)=0$$