

Abordagem didática do problema da partícula na caixa unidimensional através da equação de Schrödinger, da integral de Wilson-Sommerfeld e da transformada de Laplace

Manoel Alves Machado Filho
Bacharelado em Química, UESB
E-mail: mamfilho@ yahoo.com.br

Telesson Neves Teles
Depto. de Química e Exatas, UESB
E-mail: telesson@ uesb.br

Luís Augusto Gesteira de Souza
Depto. de Química e Exatas, UESB
E-mail: lgesteira@ uesb.br

RESUMO

A mecânica quântica, através de seus postulados, constitui-se em ferramenta muito útil e poderosa na solução de diversos problemas da química. O problema da partícula na caixa unidimensional, por exemplo, nos fornece um melhor esclarecimento sobre a distribuição eletrônica dos elétrons das ligações π em dienos conjugados.

Neste trabalho buscam-se os valores para a energia quantizada para a partícula na caixa unidimensional, bem como sua correspondente função de onda. Objetivando uma compreensão plena do problema por parte do aluno de graduação em Física e Química, foram feitas três abordagens distintas para o problema, quais sejam: através da equação de Schrödinger [1], da integral de Wilson-Sommerfeld [1] e da transformada de Laplace [2].

A primeira abordagem consiste na solução usual da equação fundamental da Mecânica Quântica, desenvolvida por E. Schrödinger, é: $H\psi = E_i\psi_i$. Aqui, E_i são as energias permitidas (quantizadas), as quais são autovalores obtidos quando o operador Hamiltoniano H é aplicado sobre as funções de onda ψ_i . O operador é obtido a partir de equações da mecânica clássica para a energia, expressa em função do momento e da posição. A segunda abordagem invoca a lei de quantização de Wilson-Sommerfeld, uma generalização do modelo atômico de Bohr, que nos fornece de forma rápida e didática um resultado numérico para a energia quantizada da partícula do problema proposto. Uma terceira forma de se obter o resultado para a energia quantizada é aplicando o teorema

matemático da transformada de Laplace na equação (diferencial) de Schrödinger. Ele permite levar a resolução da equação de Schrödinger à resolução de equações polinomiais, que são muito mais simples de resolver.

Com o método de Schrödinger encontramos, da forma convencional, a energia quantizada e a função de onda da partícula. Pela regra de quantização de Wilson-Sommerfeld, obtém-se facilmente o resultado para a energia quantizada da partícula, através de uma simples integração no espaço de fase. Através da transformada de Laplace encontramos igualmente os valores quantizados para a energia e as funções de onda, bem definidas pelas condições de contorno do problema. Ocorreu, nesta última abordagem, a problemática da primeira derivada da função de onda não poder ser igual a zero, e seu valor pôde ser obtido usando a propriedade de normalização da função de onda. Em todos os casos, os resultados exprimiram soluções aceitáveis e concordantes para o problema, confirmando a eficiência das diferentes metodologias.

Referencias

- [1] EISBERG, R., RESNICK, R. Física Quântica: Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleo e Partículas. Ed. Campus, Rio de Janeiro, 1979.
- [2] BUTKOV, E. Física Matemática. Ed. Guanabara, Rio de Janeiro, 1988.