

EQUAÇÃO DE SCHROEDINGER: FUNÇÃO DE ONDA COM APLICAÇÃO NO POÇO QUADRADO INFINITO E EM PARTÍCULA LIVRE

SCHRÖDINGER EQUATION: WAVE FUNCTION WITH APPLICATION IN THE INFINITE SQUARE WELL AND IN A FREE PARTICLE

ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER: FUNCIÓN DE ONDA CON APLICACIÓN EN EL POZO CUADRADO INFINITO Y EN PARTÍCULA LIBRE

José Francisco da Silva Costa;

Doutorado em Física pelo Programa de Pós-graduação em Física-PPGF_UFPA
Faculdade de Formação e Desenvolvimento do Campo-FADECAM, Brasil.

jfsc@ufpa.br

Marinaldo Carvalho Lobato;

Mestrado em Engenharia Química pelo Programa de Pós-graduação em Engenharia
Química-PPGEQ-UFPA
Secretaria do Estado de Educação-SEDUC, Brasil

Marinaldo.lobato2014@g.mail.com

José Wilton Serrão Nascimento;

Mestrado em Engenharia de Materiais
Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia
Secretaria de Estado de Educação-SEDUC, Brasil

Nascimentowilton@yahoo.com.br

José Augusto dos Santos Cardoso,

Mestrado Profissional em Ensino de Física pela Universidade Federal do Pará,
Docente em Ciências Naturais da prefeitura de São Sebastião da Boa Vista; Brasil

augustoufpa2020@gmail.com

Mário dos Santos Torres

Graduação em Física pela Universidade Estadual do Pará(UEPA)
EMEIF Quilombola Santo André – Rio Itacuruçá, Brasil

Oiram.torres@yahoo.com.br

Eliezer Pereira Cavalheiro

Mestrado Profissional em Ensino de Física pela Universidade Federal do Pará
Papiloscopista de Polícia Civil do Estado do Pará, Brasil

eliezer.cavalheiro@policiacivil.pa.gov.br

Ilan de Jesus Baia Pinheiro

Graduação em Educação Física pela Universidade Federal do Pará(UFPA), Brasil

ilanbaiapinheiro@gmail.com

Antonio Maia de Jesus Chaves Neto;

Doutorado em Física pela Universidade Estadual de Campinas
Professor Colaborador do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química. Brasil

amchaves@ufpa.br

Resumo

Este estudo apresenta uma abordagem teórica de caráter didático e conceitual, voltada à compreensão dos fundamentos da equação de Schrödinger relacionada a função de onda, com foco em sua aplicação a dois sistemas físicos específicos: poços quadrados infinitos e partículas livres. O objetivo geral consiste em compreender os fundamentos matemáticos e físicos e explorar como a solução da equação descreve o comportamento quântico de partículas em diferentes potenciais elétricos. Os métodos utilizados são teóricos e analíticos, baseados em uma revisão da literatura pertinente à mecânica quântica. O caso unidimensional da equação transitória e sua forma estacionária são analisados para um poço quadrado infinito com ênfase na quantização da energia e a determinação das condições de contorno para os estados estacionários permitidos. Para partículas livres, examina-se como uma superposição de ondas planas associadas a um espectro de energia contínuo. As soluções obtidas são consistentes com o comportamento esperado dos sistemas quânticos ideais em poços infinitos as soluções apresentam quantização de energia e estados discretos, enquanto para partículas livres as soluções apresentam graus de liberdade de movimento com energia contínua. A conclusão é que a equação de Schrödinger é crucial para descrever fenômenos quânticos, fornecendo uma base matemática sólida para a compreensão de sistemas confinados e livres destacando a partir de exemplos, a importância das funções de onda na previsão e explicação do comportamento das partículas em sistemas quânticos, contribuindo para o avanço da física moderna.

Palavras-chaves: Equação de Schrödinger; Fundamentos matemáticos e físicos; Poços quadrados infinitos e partículas livres.

Abstract

This study presents a theoretical approach of didactic and conceptual character, aimed at understanding the foundations of the Schrödinger equation related to the wave function, with a focus on its application to two specific physical systems: infinite square wells and free particles. The general objective is to understand the mathematical and physical foundations and to explore how the solution of the equation describes the quantum behavior of particles in different electric potentials. The methods used are theoretical and analytical, based on a review of the literature relevant to quantum mechanics. The one-dimensional case of the time-dependent equation and its stationary form are analyzed for an infinite square well, with emphasis on energy quantization and the determination of boundary conditions for the allowed stationary states. For free particles, the study examines how a superposition of plane waves is associated with a continuous energy spectrum. The solutions obtained are consistent with the expected behavior of ideal quantum systems: in infinite wells, the solutions exhibit energy quantization and discrete states, whereas for free particles the solutions display degrees of freedom of motion with continuous energy. The conclusion is that the Schrödinger equation is crucial for describing quantum phenomena, providing a solid mathematical basis for understanding confined and free systems. Through examples, the study highlights the importance of wave functions in predicting and explaining the behavior of particles in quantum systems, contributing to the advancement of modern physics.

Keywords: Schrödinger Equation; Mathematical and physical foundations; Infinite square wells and free particles;

Resumen

Este estudio presenta un enfoque teórico de carácter didáctico y conceptual, orientado a la comprensión de los fundamentos de la ecuación de Schrödinger relacionados con la función de onda, con énfasis en su aplicación a dos sistemas físicos específicos: pozos cuadrados infinitos y

partículas libres. El objetivo general consiste en comprender los fundamentos matemáticos y físicos y explorar cómo la solución de la ecuación describe el comportamiento cuántico de las partículas en diferentes potenciales eléctricos. Los métodos utilizados son teóricos y analíticos, basados en una revisión de la literatura pertinente a la mecánica cuántica. El caso unidimensional de la ecuación transitoria y su forma estacionaria se analizan para un pozo cuadrado infinito, con énfasis en la cuantización de la energía y en la determinación de las condiciones de contorno para los estados estacionarios permitidos. Para las partículas libres, se examina cómo una superposición de ondas planas está asociada a un espectro continuo de energía. Las soluciones obtenidas son coherentes con el comportamiento esperado de los sistemas cuánticos ideales: en pozos infinitos, las soluciones presentan cuantización de energía y estados discretos, mientras que para partículas libres las soluciones muestran grados de libertad de movimiento con energía continua. La conclusión es que la ecuación de Schrödinger es fundamental para describir los fenómenos cuánticos, proporcionando una base matemática sólida para la comprensión de sistemas confinados y libres. A partir de ejemplos, se destaca la importancia de las funciones de onda en la predicción y explicación del comportamiento de las partículas en sistemas cuánticos, contribuyendo al avance de la física moderna.

Palabras clave: Ecuación de Schrödinger; Fundamentos matemáticos y físicos; Pozos cuadrados infinitos y partículas libres;

1. Introdução

A mecânica quântica (AKARSU, B.,2010) representa uma ruptura fundamental com a física clássica ao procurar descrever fenômenos que não podem ser explicados pelas leis de Isaac Newton (FREIRE JÚNIOR, 2013; LEITE, 2012) que se fundamenta numa física determinística com energia não quantizada. Na nova abordagem, encontra-se a equação de Schrödinger, formulada por Erwin Schrödinger em 1926, a qual estabelece a base matemática para a descrição do comportamento das partículas em escala microscópica (BOLIVAR, 2003) onde predominam um mundo probabilístico em que imperam a função de onda.

A equação de Schrödinger permite compreender a evolução temporal dos sistemas quânticos e determinar propriedades fundamentais como energia, posição e momento por meio da função de onda que pode possuir caráter dependente ou independente do tempo. A interpretação probabilística dessa função, conforme discutido por Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu e Frank Laloe (2006), busca introduzir uma mudança epistemológica profunda, ao indicar que os fenômenos quânticos não são determinísticos, mas descritos em termos de probabilidades e com propriedades importantes ligadas a função de onda.

O estudo nesse sentido, concentra-se na aplicação da equação de Schrödinger e a dois sistemas fundamentais, a saber, o poço quadrado infinito e de partícula livre que são desenvolvidos detalhadamente para explicar a validade da teoria de comportamento ondulatório. Dessa forma, o primeiro representa um modelo de confinamento quântico em que as partículas estão sujeitas a condições de contorno que resultam na quantização dos níveis de energia e na normalização da função de onda segundo afirma (FREITAS; VEIGAS; DRIGO FILHO, 2010). O segundo procura descrever as partículas sem restrições espaciais, cujas funções de onda assumem a forma de superposição de ondas planas, associadas a um espectro contínuo de energia, conforme discutido por Messiah (2000). Esses

modelos constituem a base conceitual para a compreensão de sistemas quânticos mais complexos frutos fundamentais da mecânica quântica. .

A análise teórica proposta busca estudar as soluções da equação de Schrödinger para os dois contextos, investigando as propriedades da função de onda e suas implicações físicas, bem como as comparações ou discrepâncias entre as teorias clássica e quântica. De acordo com Zaarur e Reuven (2010), esse tipo de abordagem é essencial para compreender os princípios da quantização em sistemas confinados e o comportamento de partículas em movimento livre. Além disso, conceitos como normalização da função de onda, estados estacionários e propagação ondulatória são fundamentais para a interpretação dos resultados obtidos, destacando a importância e veracidade da teoria quântica.

Dessa forma, este trabalho não se limita à exposição dos modelos da partícula livre e do poço quadrado infinito, mas propõe uma análise comparativa sistemática entre suas soluções, enfatizando a relação entre o formalismo matemático e a interpretação física.

Busca-se evidenciar, de modo crítico, como a estrutura matemática da equação de Schrödinger é capaz de condicionar as propriedades físicas observáveis, referente à quantização da energia, à normalização das soluções e aos limites da analogia com a mecânica clássica. Nessa perspectiva, os modelos analisados, conforme discutido por David J. Griffiths (2005) e por (THORNTON; MARION, 2003), representam uma constituição de instrumentos fundamentais para a compreensão dos fenômenos quânticos, evidenciando as limitações das descrições clássicas quando aplicadas ao domínio microscópico, levando a necessidade de uma abordagem que articule rigor matemático e interpretação física de forma consistente.

2. Revisão da Literatura

2.1 Partícula livre

A partícula livre de massa m , descreve situações em que não está confinada por potenciais, podendo mover-se livremente em um ambiente sem restrições ou com influências negligenciáveis. A tabela 1 mostra situações em que o sistema é considerado como partícula livre.

Tabela 1 – Modelo de partícula livre em sistemas físicos reais

Situação	Descrição
Elétrons em metais	Em modelos simplificados, os elétrons de condução em metais podem ser tratados como partículas livres, o que contribui na explicação da condutividade elétrica e térmica e nos efeitos fisiológicos de correntes elétricas em um metal.
Física de plasma	Partículas carregadas em plasmas, especialmente em regiões de baixa densidade, podem ser tratadas como livres para estudar fenômenos como ondas de plasma e interações eletromagnéticas.
Difusão molecular:	As partículas livres são usadas em modelos de transporte, como difusão em gases e líquidos, onde a interação entre partículas é pequena, podendo ser tratadas como partículas livres. ..

Aceleradores: Em aceleradores de partículas, como o LHC, as partículas são tratadas como livres entre as interações com os campos eletromagnéticos, permitindo modelar seus movimentos e trajetórias quando sujeitas nesses campos.

Fonte: Elaborado pelos autores (2026).

Ambos os modelos, apesar de idealizados, são ferramentas valiosas para introduzir e desenvolver conceitos em mecânica quântica, oferecendo uma base para análises mais complexas e experimentos aplicados.

2.2 Região classicamente proibida.

Na mecânica clássica, uma partícula de massa m só poderá existir em regiões onde sua energia total E seja maior ou igual ao potencial $V(x)$. Regiões onde $E < V(x)$ são chamadas de regiões classicamente proibidas, pois a energia cinética da partícula, $T = E - V(x)$ seria negativa, o que é impossível na física clássica. Entretanto, na mecânica quântica, devido à natureza ondulatória das partículas e à interpretação probabilística da função de onda, a partícula pode apresentar uma probabilidade não nula de estar nessas regiões proibidas. Isso ocorre devido ao fenômeno de tunelamento quântico, que não possui análogo clássico.

A "região classicamente proibida" é um conceito que se refere a uma área do espaço de fase de um sistema físico onde a mecânica clássica prediz que o sistema não pode entrar ou permanecer. Isso ocorre porque a energia do sistema é insuficiente para superar uma barreira de potencial. Considera-se como exemplo, um sistema de partícula em um poço de potencial. A energia potencial do sistema $U(x)$ conforme a equação (1)

$$U(x) = \frac{1}{2}x^2 + V_0, \quad (1)$$

onde x é a posição da partícula, V_0 é a profundidade do poço de potencial e é uma constante. A energia total E do sistema, conforme a equação (2)

$$E = U(x) + K, \quad (2)$$

onde K é a energia cinética da partícula. A região classicamente proibida é definida pela condição:

$$E < U(x). \quad (3)$$

Isso significa que a energia total do sistema é menor do que a energia potencial em uma dada posição x .

2.3 Função de onda de uma partícula livre

Seja $\psi(x, t)$ a função de onda, m a massa da partícula, \hbar a constante de Planck reduzida e E a energia total do sistema. A equação diferencial de 2º ordem da função $\varphi(x)$ é, conforme a equação (4)

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E]\varphi = 0 \quad . \quad (4)$$

Pode-se estudar o componente da partícula, bem como as propriedades da função de onda $\varphi(x)$. Como a partícula é livre, o potencial deve ser nulo. Isto é $V(x) = 0$, logo, a equação (4), pode ser escrita da seguinte maneira após a substituição,

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (-E + 0)\varphi = 0 \Rightarrow \frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi = 0 \quad , \quad (5)$$

denotando que o quadrado do número de onda K obedece a expressão,

$$K^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad , \quad (6)$$

Substituindo a expressão do número de onda em (6) na equação diferencial (5), obtém-se:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + K^2\varphi = 0 \quad . \quad (7)$$

As raízes da equação diferencial de 2º ordem em (7) são dadas conforme a equação (8)

$$r = \pm ik \quad . \quad (8)$$

Onde i é a unidade imaginária. A função de onda $\varphi(x)$ dada em (7), pode ser reescrita como a soma de função exponencial

$$\varphi(x) = A \cdot e^{ikx} + B \cdot e^{-ikx} \quad , \quad (9)$$

Considerando a função $\varphi(t)$ também é dada por uma função exponencial. Isto é,

$$\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar} \quad , \quad (10)$$

Onde, t é o tempo. logo, a função de onda $\varphi(x, t)$ pela separação de variável tem a seguinte expressão matemática,

$$\varphi(x, t) = \varphi(t) \cdot \varphi(x) \quad . \quad (11)$$

Levando a expressão (11) às expressões (9) e (10). Isto é,

$$\begin{aligned} \varphi(x, t) = \varphi(t) \cdot \varphi(x) &= e^{-iEt/\hbar} (A \cdot e^{ikx} + B \cdot e^{-ikx}) \Rightarrow \\ \varphi(x, t) &= A e^{-iEt/\hbar} \cdot e^{ikx} + B \cdot e^{-iEt/\hbar} \cdot e^{-ikx} \end{aligned}$$

ou

$$\varphi(x, t) = A \cdot e^{i\left(\frac{Et}{\hbar} + kx\right)} + B \cdot e^{-i\left(\frac{Et}{\hbar} + kx\right)} \quad . \quad (12)$$

A interpretação física de $\varphi(x, t)$ dada em (12), o primeiro termo representa uma onda que se propaga para à direita e o segundo termo uma onda que se propaga para a esquerda. Nesse caso, deve-se considerar apenas o primeiro termo. Isto é:

$$\varphi(x, t) = A \cdot e^{i\left(-\frac{Et}{\hbar} + Kx\right)} \quad (13)$$

Que representa uma onda que se propaga para a direita. A função de onda descrita pela expressão (13) para uma partícula livre explica o caráter ondulatório e probabilístico no campo da mecânica quântica em substituição à teoria mecânica clássica que fornece trajetória definida no tempo e espaço. Na ausência de potencial, as soluções comportam-se como ondas planas que procuram indicar energia contínua e liberdade de movimento, interpretadas como superposição de estados de momento. Pelo fato de não serem normalizáveis, levam a necessidade de construção de pacotes de onda, introduzindo o princípio da incerteza previsto na mecânica quântica. Para calcular a velocidade de propagação de grupo, considere que no expoente da base do logaritmo neperiano dada pela expressão em (13), deve ser uma constante. Isto é,

$$-\frac{Et}{\hbar} + Kx = CONST \quad (14)$$

Derivando (14) em função do tempo, . Ou seja:

$$\frac{d}{dt} \left(-\frac{Edt}{\hbar} + Kdx \right) = 0 \Rightarrow -\frac{Edt}{\hbar} + Kdx = 0$$

Pois a energia total E é independente do tempo, assim como a energia cinética K . Fazendo os cálculos, chega-se ao seguinte resultado:

$$Kdx = \frac{Edt}{\hbar} \Rightarrow \frac{dx}{dt} = \frac{E}{K\hbar} \Rightarrow v_{onda} = \frac{E}{K\hbar} \quad (15)$$

Onde v_{onda} é a velocidade de propagação do grupo. Sendo v_{onda} considerada a velocidade da onda. Tomando a expressão em (6). Isto é,

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow K = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (16)$$

Substituindo (16) em (15), após o desenvolvimento, chega-se ao resultado:

$$v_{onda} = \frac{E}{K\hbar} = \frac{E}{\hbar} \cdot \frac{1}{K} = \frac{E}{\hbar} \cdot \frac{\hbar}{\sqrt{2mE}} =$$

Eliminando a constante de Planck \hbar do numerador e denominador, a velocidade de onda será:

$$v_{onda} = \frac{E}{K\hbar} = \frac{E}{\hbar} \cdot \frac{1}{K} = \frac{E}{\hbar} \cdot \frac{\hbar}{\sqrt{2mE}} = E \sqrt{\frac{1}{2mE}}$$

Introduzindo a energia total E sob o sinal do radical e resolvendo os cálculos, obtém-se a expressão da velocidade da onda,

$$V_{onda} = \frac{E}{\hbar} \cdot \frac{\hbar}{\sqrt{2mE}} = E \sqrt{\frac{1}{2mE}} = \sqrt{\frac{E^2}{2mE}} = \sqrt{\frac{E}{2m}} \quad (17)$$

O que mostra que a velocidade da partícula aumenta com o aumento da energia e diminui com o aumento de massa. A velocidade correspondente à função

de onda mostra que no campo da mecânica quântica, o movimento das partículas não pode ser tratado pelos conceitos clássicos de trajetória e velocidade bem definidos, pois a densidade de probabilidade implica na incerteza de localizar pontualmente a partícula, pois depende de grandezas ondulatórias, como energia e número de onda. A discrepância entre as duas velocidades quântica e clássica condiz com a necessidade de reinterpretar esses ambos conceitos, pois do ponto de vista microscópico, a velocidade está intrinsicamente ligada a função de onda e expressa a dualidade onda-partícula, diferentemente, portanto, da velocidade na mecânica clássica onde a energia é contínua e a localizada a qualquer tempo e posição é possível.

Sendo m a massa da partícula e $E = \frac{1}{2}mv^2$ a energia cinética no campo da mecânica clássica, isolando o velocidade v em função da massa m e da energia cinética E , será,

$$v^2 = \frac{2E}{m} \Rightarrow v = \sqrt{\frac{2E}{m}} \quad (18)$$

Considerando a velocidade de uma partícula V_c na mecânica clássica e de uma outra velocidade V_q na mecânica quântica, a relação entre elas de acordo com as expressões (17) e (18), realizando a razão entre elas. Isto é:

$$\frac{V_q}{V_c} = \sqrt{\frac{E}{2m} \cdot \frac{m}{2E}} = \sqrt{1/4} \Rightarrow V_q = \frac{V_c}{2} \quad (19)$$

Considerando o aspecto teórico, compreende que a comparação entre as velocidades clássica e quântica deduzidas anteriormente, não deve ser interpretada como equivalência direta, pois na mecânica quântica, a noção de velocidade está associada à velocidade de grupo do pacote de onda, enquanto na mecânica clássica decorre de uma trajetória bem definida e com energia contínua. Portanto, a relação entre ambas não é direta, mas depende da interpretação do estado quântico considerado.

Ou seja, a diferença está intrinsecamente ligada no movimento que não é mais descrito por trajetórias precisas, mas por conceitos probabilísticos ligado a densidade de probabilidade e limitadas pelo princípio da incerteza que caracteriza a dualidade onda-partícula (AYENE et al., 2011). Dessa maneira, a descrição clássica é restrita, aparecendo como uma aproximação e a mecânica quântica fornece uma compreensão mais profunda e fundamental do movimento.

No contexto da partícula livre, a solução da equação de Schrödinger pode ser expressa na forma de uma onda plana, cuja estrutura matemática permite distinguir diferentes noções de velocidade associadas ao movimento ondulatório. Nesse cenário, é fundamental separar rigorosamente os conceitos de velocidade de fase, velocidade de grupo e velocidade clássica, que não são equivalentes. A velocidade de fase é definida como a razão entre a frequência angular e o número de onda, sendo dada por

$$v_f = \frac{\omega}{k} \quad (20)$$

No contexto da partícula livre, a solução da equação de Schrödinger pode ser expressa na forma de uma onda plana, cuja estrutura matemática permite distinguir diferentes noções de velocidade associadas ao movimento ondulatório. Nesse cenário, é fundamental separar rigorosamente os conceitos de velocidade de fase, velocidade de grupo e velocidade clássica, que não são equivalentes. A velocidade de fase é definida como a razão entre a frequência angular e o número de onda, conforme verificado na expressão (20).

Essa velocidade descreve a propagação das frentes de fase da onda, não correspondendo diretamente ao deslocamento físico da partícula.

No da partícula livre, a solução da equação de Schrödinger pode ser escrita como uma onda plana. A estrutura matemática dessa solução permite definir diferentes velocidades associadas ao movimento ondulatório. Uma delas é a velocidade de fase, conforme foi mostrado na relação (20). A seguir, demonstra-se essa expressão de forma rigorosa. A solução geral de onda plana é dada por conforme a expressão,

$$\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}, \quad (21)$$

onde: A é a amplitude, k é o número de onda, ω é a frequência angular. A fase da onda é:

$$\theta(x, t) = kx - \omega t. \quad (22)$$

A velocidade de fase corresponde à velocidade com que um ponto de **fase constante** se desloca. Impondo que,

$$\theta(x, t) = kx - \omega t = \text{const.} \quad (23)$$

derivamos em relação ao tempo:

$$\frac{d}{dt}(kx - \omega t) = 0. \quad (24)$$

Como k e ω são constantes:

$$k \frac{dx}{dt} - \omega = 0. \quad (25)$$

Isolando $\frac{dx}{dt}$, obtém-se a relação,

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\omega}{k}. \quad (26)$$

Portanto, definindo como sendo a velocidade. Isto é,

$$v_f = \frac{\omega}{k}$$

Obtém-se a velocidade de fase conforme foi mostrado em (20).

Por outro lado, a velocidade de grupo é definida como

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} \quad (37)$$

Onde v_g velocidade de grupo, ω é frequência angular e k representa o número de onda. A expressão (37) representa a propagação de um pacote de ondas, isto é, à superposição de ondas planas que permite a localização probabilística da partícula. Diferentemente da velocidade de fase, a velocidade de grupo possui interpretação física direta, pois corresponde à velocidade com que a probabilidade de encontrar a partícula se desloca no espaço.

Um outro ponto interessante é a obtenção do grupo de ondas. No estudo da partícula livre, a solução da equação de Schrödinger pode ser expressa como uma onda plana, como já foi verificado. Entretanto, uma única onda plana não descreve uma partícula localizada; para isso, utiliza-se um pacote de ondas, formado pela superposição de ondas com números de onda próximos. Nesse contexto, a velocidade relevante para o transporte de informação, energia ou probabilidade é a velocidade de grupo. A partir da função de onda $\psi(x, t)$, pretende-se obter a relação conforme pode ser visto na expressão (37),

Para o caso de um pacote de ondas, pode ser escrito como:

$$\psi(x, t) = \int A(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk, \quad (38)$$

onde $A(k)$ é uma função concentrada em torno de um valor central k_0 .

Pretende-se considerar a Expansão de $\omega(k)$ em torno de k_0 . Para k próximo de k_0 , expandimos $\omega(k)$ linearmente:

$$\omega(k) \approx \omega(k_0) + \frac{d\omega}{dk} \Big|_{k_0} (k - k_0). \quad (39)$$

Definindo: $\omega_0 = \omega(k_0)$, $\omega'(k_0) = \frac{d\omega}{dk} \Big|_{k_0}$,

obtem-se que,

$$\omega(k) \approx \omega_0 + \omega'(k_0)(k - k_0). \quad (40)$$

Substituindo essa aproximação no pacote de ondas. Isto é,

$$\psi(x, t) \approx \int A(k) e^{i[kx - (\omega_0 + \omega'(k_0)(k - k_0))t]} dk. \quad (41)$$

Reorganizando o argumento da exponencial:

$$kx - \omega_0 t - \omega'(k_0)(k - k_0)t = k(x - \omega'(k_0)t) + \text{termos independentes de } k.$$

Assim, a integral assume a forma:

$$\psi(x, t) \sim e^{i(\text{fase global})} \int A(k) e^{ik(x - \omega'(k_0)t)} dk. \quad (42)$$

A parte importante é o fator:

$$x - \omega'(k_0)t. \quad (43)$$

O máximo do pacote de ondas se desloca de modo que:

$$x - \omega'(k_0)t = \text{const.} \quad (44)$$

Derivando em relação ao tempo a expressão (35). Isto é,

$$\frac{d}{dt}(x - \omega'(k_0)t) = 0, \Rightarrow \frac{dx}{dt} = \omega'(k_0).$$

Portanto, a velocidade de grupo é:

$$v_g = \frac{dx}{dt} = \frac{d\omega}{dk} \Big|_{k_0}. \quad (45)$$

Como k_0 é arbitrário, a expressão geral é representado justamente, pela expressão (37). A velocidade de grupo surge naturalmente ao analisar a propagação da envoltória de um pacote de ondas. Diferentemente da velocidade de fase, ela está associada ao transporte efetivo de informação, energia e probabilidade, justificando sua importância física.

velocidade de fase não possui significado físico direto, a velocidade de grupo representa a velocidade efetiva da partícula, sendo consistente com a descrição

clássica no limite apropriado. Essa distinção é essencial para evitar interpretações equivocadas do movimento quântico, especialmente quando se trabalha com soluções do tipo onda plana, que isoladamente não são normalizáveis e exigem a construção de pacotes de onda para uma descrição física completa.

2.4 A Equação de Schrödinger e solução

A Equação de Schrödinger é um dos pilares da mecânica quântica, pois permite descrever o comportamento de partículas em escalas microscópicas, onde as leis da física clássica deixam de ser válidas (CUSTODIO, 2002). Seu papel central é determinar a função de onda, que fornece a probabilidade de encontrar uma partícula em determinado lugar, introduzindo uma visão não determinista da realidade sendo possível ser interpretada pela solução de uma equação diferencial parcial (SANTOS, 2010), .

Além de seu valor teórico, ela fundamenta diversas tecnologias modernas, como semicondutores e dispositivos eletrônicos, e é essencial para a compreensão de fenômenos químicos e materiais. Sua importância vai além da física, pois também provoca uma mudança profunda na forma de interpretar o universo, mostrando que, no nível quântico, a realidade é essencialmente probabilística e não totalmente previsível. A Equação de Schroedinger obedece a seguinte expressão diferencial de segunda ordem,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = V\Psi(x,t) \quad . \quad (46)$$

Onde V representa o potencial, $\Psi(x,t)$ é a função de onda dependente do tempo t e do espaço x e m a massa. A seguir procura-se encontrar a solução da expressão (46) para o caso da função de onda independe do tempo. Para simplificar, seja $\Psi(x,t) = \varphi$. Substituindo na expressão anterior,

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = V\varphi \quad . \quad (47)$$

Considerando que a função de onde seja, na verdade um produto entre duas outras funções $\varphi(t)$ e $\psi(x)$. Isto é. Realizando a separação de variáveis,

$$\Psi(x,t) = \varphi(t)\psi(x), \quad (48)$$

Substituir isso na equação de Schrödinger.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [\varphi(x)\varphi(t)] + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} [\varphi(x)\varphi(t)] = V[\varphi(x)\varphi(t)]$$
$$\Rightarrow i\hbar \varphi(x) \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} + \varphi(t) \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} = V\varphi(x)\varphi(t) : \varphi(x)\varphi(t).$$

$$\frac{1}{\varphi(t)} i\hbar \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} + \frac{1}{\varphi(x)} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} = V(x) \Rightarrow$$

$$\frac{1}{\varphi(t)} i\hbar \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} = -\frac{1}{\varphi(x)} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + V(x) \quad . \quad (49)$$

Se duas funções são iguais, para resolvê-las, deve-se considerar que são iguais a uma constante A . Isto é:

$$\frac{1}{\varphi(t)} i\hbar \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} = A \quad . \quad (50)$$

E

$$-\frac{1}{\varphi(x)} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + V(x) = A \quad . \quad (51)$$

Resolvendo, primeiramente (50), operando no denominador na unidade imaginária i e operando o logarítmico em ambos os lados, obtém-se que,

$$\frac{1}{\varphi(t)} \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} = \frac{A}{i\hbar} = -\frac{A}{\hbar} i \Rightarrow \ln \varphi(t) = -i \frac{A}{\hbar} t \Rightarrow \varphi(t) = e^{-\frac{iAt}{\hbar}} .$$

Como a constante A representa a energia E . Isto é, $E = A$, tendo em vista que na teoria da mecânica quântica a grandeza que divide a constante de Planck \hbar é a energia. Logo:

$$\varphi(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad . \quad (52)$$

Seja a expressão em (51) que representa a segunda parte da função de onda. Realizando o desenvolvimento, tem-se que,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x) \Rightarrow \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} V(x)\varphi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} E\varphi(x) = 0 \Rightarrow$$

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E]\psi(x) = 0 \quad . \quad (53)$$

a solução completa da equação dependente do tempo é:

$$\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar}, \quad (54)$$

onde $\psi(x)$ satisfaz a equação independente do tempo (53). Como mostra a equação de segunda ordem em (53), a solução da equação de Schrödinger independente do tempo depende da função de onda $\varphi(x)$.

A equação de Schrödinger independente do tempo mostra que pode ser separada em partes espacial e temporal, permitindo a obtenção de estados estacionários com energia bem definida e quantizada. A energia surge como um autovalor, indicando que apenas certos estados são permitidos no sistema quântico, sendo portanto um sistema discreto que não assume qualquer valor de energia, como no caso da mecânica clássica.

Na parte espacial da função de onda, acontece a distribuição de probabilidade da partícula que pode ser assegurada pelas propriedades da função de onda, como normalização etc. A parte temporal indica a evolução da partícula no tempo, mostrando como pode ser analisada levando em conta as duas funções temporal e espacial. A função dada por (26), simplifica a análise dos sistemas e torna possível identificar os estados físicos possíveis, mostrando que a energia é o elemento central na descrição quântica. O objetivo é restringir a equação diferencial de segunda ordem e obter a função $\psi(x)$. A Equação de Schrödinger independente do tempo em uma dimensão é representada pela expressão (53). Isto é,

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E]\psi(x) = 0.$$

A sua solução depende da forma do potencial $V(x)$. A seguir, resolve-se a equação para o caso mais geral e importante que para o potencial constante. Seja Potencial Constante $V(x) = V_0$. Quando o potencial é constante, a equação (53) torna-se:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)\psi(x) = 0. \quad (54)$$

Definindo:

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0). \quad (55)$$

Com isso, a equação (54) se transforma em:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0. \quad (56)$$

A solução depende do sinal de k^2 , isto é, se $E > V_0$ ou $E < V_0$.

Caso A) No caso em que a energia maior que o Potencial ($E > V_0$)

Se $E > V_0$, então $k^2 > 0$ e a equação (56) é oscilatória:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0.$$

A solução geral é:

$$\psi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx), \quad (57)$$

ou, equivalentemente,

$$\psi(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx}. \quad (58)$$

Representam ondas planas, típicas de partículas livres ou regiões onde a energia supera o potencial.

Caso B): Energia Menor que o Potencial ($E < V_0$)

Se $E < V_0$, define-se:

$$\kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) > 0. \quad (59)$$

A equação (56) torna-se:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \kappa^2\psi(x) = 0. \quad (60)$$

A solução geral é:

$$\psi(x) = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}. \quad (61)$$

Essas são soluções exponenciais, típicas de regiões de barreira ou tunelamento quântico. Em problemas físicos reais, descarta-se o termo que diverge no infinito. Quanto a Interpretação Física das Soluções, para o regime ($E > V_0$), a partícula tem energia suficiente para se mover livremente. A função de onda é uma combinação de senos e cossenos. A probabilidade é distribuída ao longo de todo o espaço.

No caso B), que representa o regime evanescente ($E < V_0$), a partícula está em uma região classificada como "proibida" pela física clássica. A função de onda decai exponencialmente. Esse comportamento permite o tunelamento quântico. Portanto, a equação,

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E]\psi(x) = 0$$

só pode ser resolvida analiticamente quando o potencial $V(x)$ é simples. Para o caso fundamental de potencial constante, obtêm-se: Ondas oscilatórias quando $E > V_0$, Ondas exponenciais quando $E < V_0$. Essas duas soluções são a base para resolver: poços infinitos, poços finitos, barreiras de potencial, tunelamento e estados ligados e espalhamento.

2.4 Propriedades da função de onda

2.4.1 As funções de onda $\varphi_u(x)$ são mutuamente ortogonais

, se $\varphi_1(x)$ é ímpar, então $\varphi_2(x)$ é par. E assim, sucessivamente. Logo, as integrais dessas funções podem ser escritas conforme a expressão,

$$\int_0^a \varphi_1(x) * \varphi_2(x) dx = 0 \quad , \quad (62)$$

ou de um modo geral

$$\int_0^a \varphi_n(x) \varphi_m(x) dx = 0 \quad , \quad (63)$$

desde que , $n \neq m$

A integral em (63) expressa como certas propriedades matemáticas paridade e simetria permitem justificar formalmente a forma das integrais, considerando que o conhecimento físico depende de estruturas lógicas e dedutivas. Portanto, evidencia-se que compreender o comportamento das funções envolve reconhecer os princípios teóricos que fundamentam a interpretação dos resultados.

2.4.2 As funções $\varphi_n(x)$ são normalizáveis.

Seja a integral,

$$\int_0^a \varphi_n * \varphi_n dx = 1 \quad p/ m = n \quad , \quad (64)$$

logo as funções de ondas de uma partícula num poço potencial quadrado infinito são ortomalizáveis. Logo, introduzindo o δ na integral em (64), obtém-se,

$$\int_0^a \varphi_n \varphi_m dx = \delta_{mu} \begin{cases} \delta_{mu} = 0 & \text{se } m \neq u \\ \delta_{mu} = 1 & \text{se } m = u \end{cases} \quad . \quad (65)$$

A ortonormalização das funções de onda esclarece que o conhecimento físico depende de critérios matemáticos que assegura consistência e interpretação dos estados quânticos. Isto é, a validade epistemológica da teoria decorre da coerência entre estrutura formal e significado físico.

2.4.3 Alternadamente pares e ímpar.

Seja, a função de onde senoidal descrita a seguir,

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right), \quad (66)$$

se $n = 1$

$$\varphi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right), \quad (67)$$

se $n = 2$

$$\varphi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right), \quad (68)$$

$\varphi_1, \varphi_3, \varphi_5, \varphi_7 \dots$ São funções de ondas ímpares e $\varphi_2, \varphi_4, \varphi_6, \varphi_8 \dots$ São funções de ondas pares. A distinção entre funções de onda pares e ímpares são capazes de mostrarem propriedades matemáticas que estruturam a interpretação física dos estados quânticos onde o conhecimento em mecânica quântica depende da articulação entre simetria formal e significado físico dos estados permitidos.

2.4.4 São completos.

$$\sum_{n=1}^{\infty} c_n \int_0^a \varphi_m^*(x) \varphi_n(x) dx$$

Uma função $f(x)$ pode ser expressa como combinação linear de uma função de onda $\varphi_n(x)$, conforme a expressão,

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n(x) \quad (69)$$

Como

$$\begin{aligned} \varphi_n(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \Rightarrow \\ f(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \end{aligned} \quad (70)$$

No entanto, para encontrar os coeficientes c_n realiza-se uma integração e considerando que $\varphi_m^*(x)$, seja definido como o conjugado de $\varphi_n(x)$. Levando a expressão em (69) a uma integração após substituição de $\varphi_m^*(x)$, obtém-se que,

$$\int_0^a \varphi_m^*(x) f(x) dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \int_0^a \varphi_m^*(x) \varphi_n(x) dx \quad (71)$$

ou

$$\int_0^a \varphi_m^*(x) f(x) dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \int_0^a \varphi_m^*(x) \varphi_n(x) dx \quad (72)$$

Considerando a propriedade da integral de Dirac,

$$\int_0^a \varphi_m^*(x) \varphi_n(x) dx = \delta_{mn} \quad (73)$$

E conforme a integral em (72), obtém-se o resultado,

$$\int_0^a \varphi_m^*(x) f(x) dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \delta_{mn} = c_m \quad (74)$$

Ou equivalentemente,

$$c_n = \int_0^a \varphi_n^*(x) f(x) dx \quad (75)$$

Essas propriedades são extremamente importantes ao poço quadrado infinito e não apenas especiais a esse poço, mas também, para a função de onda

$\varphi(x, t)$. De acordo com a equação diferencial de Schrödinger, conforme (46), e a relação da mesma função pelo método de separação de variável conforme (48), a função temporal $\varphi(t)$ de natureza exponencial conforme a expressão em (10). De acordo a relação do quadrado do número de onda k como função da massa m da partícula e da energia total E verificado na expressão (6). Isto é,

$$K^2 = \frac{2mE}{\hbar^2},$$

Para o caso específico de um poço quadrado infinito com largura a , número quântico n , m sendo a massa da partícula presa no poço quadrado infinito. Nesse caso específico, o número de onda k extraído da solução da função de onda $\varphi(x)$, pode ser obtida a raiz conforme a expressão,

$$K^2 = \frac{n^2\pi^2}{a^2} \quad (76)$$

Fazendo a equivalência das duas expressões em (6) e (76). Isto é,

$$\frac{n^2\pi^2}{a^2} = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (77)$$

Ou expressando a energia E em função de outras grandezas da expressão em (77), obtém-se que,

$$E = \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2ma^2}. \quad (78)$$

Da função de onda temporal $\varphi(t)$ dada pela expressão (10), pode-se expressar a função de onda temporal da partícula presa no poço com a substituição da expressão (78) em (10). Isto é,

$$\varphi(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} = e^{-\frac{in^2\hbar^2\pi^2}{2ma^2}t} = e^{-\frac{in^2\hbar\pi^2}{2ma^2}t} \quad (79)$$

Para analisar o comportamento da função de onda $\varphi(x, t)$ da partícula presa no poço, substitui a expressão da função espacial $\varphi(x)$ dada por (70) e da temporal $\varphi(t)$ dada por (78) na expressão de separação de variável dada por (48), obtém-se a função de onda generalizada conforme é mostrado a seguir,

$$\varphi(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \cdot e^{-\frac{in^2\hbar^2\pi^2}{2ma^2}t} \quad (80)$$

Dado o potencial $V(x)$ independente do tempo e uma função de onda inicial $\varphi(x, 0)$, para tratar o problema de obter $\varphi(x, t)$ para qualquer tempo subsequente t . Para uma energia E , a função de onda $\varphi_1(x, t)$ dada pela expressão (54) obtida pela separação de varável. Isto é,

$$\varphi_1(x, t) = \varphi_1(x) \cdot e^{-\frac{E_1 t i}{\hbar}} \quad (81)$$

Para uma energia E_2 , a função de onda pode ser escrita,

$$\varphi_2(x, t) = \varphi_2(x) \cdot e^{-\frac{E_2 t i}{\hbar}} \quad (82)$$

Logo como $\varphi(x, t)$ é uma combinação linear, tem-se que: $\varphi(x, t)$ assume valores diferentes para cada energia permitida. Logo, uma solução mais geral para a função de onda $\varphi(x, t)$ para valores discretos, será,

$$\varphi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \phi_n(x) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}, \quad (83)$$

Toda solução da equação de Schrödinger pode ser escrita dessa forma. Considerando $t = 0$, a função de onda assume a forma,

$$\varphi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \phi_n(x). \quad (84)$$

Pois a exponencial tende ao valor unitário. A expressão (84), $\phi_n(x)$ representa autofunção associada à energia E_n e c_n são os coeficientes determinados pela condição inicial $\phi(x, 0)$. A expressão em (84) representam os estados estacionários no sentido de que todas as probabilidades e valores esperados são independentes do tempo.

A normalização da função de onda para uma partícula livre esclarece que, mesmo em sistemas não confinados, a interpretação probabilística da mecânica quântica deve ser preservada e deve estar em ressonância com os conceitos probabilísticos que a situa num modelo e comportamento ondulatório. Para a questão de normalização, a densidade de probabilidade se entende a toda região. Isto é, a função se estende ao infinito, sua normalização exige tratamentos matemáticos mais sofisticados, frequentemente associados à superposição de estados.

De acordo com a solução apresentada, a função de onda do ponto de vista probabilístico, possui natureza exponencial, descrevendo o movimento da partícula e que para o caso confinado, o sistema livre confirma a universalidade dos princípios quânticos e a necessidade de interpretar corretamente suas soluções físicas.

2.6 Poço quadrado infinito

As situações em que os modelos do poço quadrado infinito e da partícula livre podem ser aplicados são amplas, especialmente no contexto da mecânica quântica. Esses modelos simplificados fornecem insights sobre sistemas reais, sendo úteis para explicar e prever comportamentos de partículas em diversos cenários físicos e tecnológicos (PAULINO, 2010).

O poço quadrado infinito é aplicado em situações em que uma partícula está confinada em uma região espacial limitada, com barreiras de potencial tão elevadas que a probabilidade de a partícula escapar é praticamente nula (GASIOROWICZ, 1996); (SCHIFT, 1955). A tabela a seguir mostra as situações em que o sistema pode ser considerado como poço de potencial (tabela 2).

Tabela 2-Tipos de poço de potencial em situações reais.

POÇO DE POTENCIAL	PRESENÇA DO POÇO POTENCIAL REAL
Caixas Quânticas	Nos materiais semicondutores, como pontos quânticos, os elétrons podem ser confinados em potenciais quase ideais que se assemelham ao poço infinito. Esses sistemas são muito usados em dispositivos ópticos, como lasers e LEDs, além de aplicações em biotecnologia e também em outras áreas tecnológicas.

Núcleos de Átomos:	Apesar de existir potencial real no núcleo e ser mais complexo, o modelo de poço quadrado infinito pode aproximar estados de partículas nucleares confinadas onde a quantização de energia está em consonância com a previsão teórica .
Confinamento de Partículas em Cavidades:	Átomos ou partículas confinados em cavidades ou armadilhas quânticas podem ser analisados inicialmente com base no poço quadrado infinito para simplificar os cálculos e +possibilitar a análise do fenômeno observado e previsto pela teoria quântica .
Osciladores Moleculares:	Em algumas moléculas, os estados de vibração de partículas, como elétrons, podem ser modelados de forma aproximada usando o poço infinito, abrindo possibilidades de estudar os modos vibracionais em determinadas frequências de ondas.

Fonte: Elaborado pelos autores (2026).

Em relação ao estudo em mecânica quântica, uma partícula livre possui um potencial nulo. Isto é, $V(x) = 0$. Nesse caso, a partícula fica presa entre as extremidades $0 \leq x \leq a$, nos pontos extremos uma força infinita impede a partícula de sair. Nesse caso, as funções de ondas devem ser nulas nas extremidades $\varphi(0) = \varphi(a) = 0$. Usando a equação de Shrodinger, pode-se obter como a partícula se comporta nesse poço quadrado infinito, bem como a energia associada a ela, verificando se a mesma é contínua ou discreta (EISBERG e RESNICK, 1979); (YOUNG e FREEDMAN, 2009),. Logo, usando a expressão da equação diferencial de segunda ordem em $\varphi(x)$ dada por (53). Isto é,

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} \varphi[-E + V(x)] = 0.$$

Supondo que o potencial foi considerado nulo, a equação diferencial em (53), transforma-se em,

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi = 0. \quad (85)$$

De acordo com a expressão da energia total em que a partícula fica está sujeita é representada pela expressão (6) e supondo que o número de onda seja k_0 , pode-se escrever (6) como,

$$E = \frac{\hbar^2 K_0^2}{2m}. \quad (86)$$

Levando na equação diferencial, a expressão da energia, obtém-se que,

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + K_0^2 \varphi = 0 \quad (87)$$

Para resolver a equação diferencial em (87), pode-se considerar a equação característica:

$$r^2 + K_0^2 = 0 \Rightarrow r = \pm iK_0.$$

Nesse caso, a solução da expressão em (87) é dada pela combinação linear ou equivalente em forma exponencial:

$$\phi(x) = \varphi(x) = A \cdot e^{k_0ix} + B \cdot e^{-iK_0x}, \quad (88)$$

que representa a função de onda da partícula independente do tempo. Usando

as condições iniciais, na função de onda em (88). Isto é,

$$\varphi(0) = A \cdot e^{K_0 i \cdot 0} + B \cdot e^{-i K_0 i \cdot 0} = A + B.$$

como

$$\varphi(0) = 0 \Rightarrow A + B = 0$$

e

$$\varphi(a) = 0 \Rightarrow A \cdot e^{K_0 i a} + B \cdot e^{-i K_0 a} = 0 \Rightarrow A = -B,$$

Substituindo $A = -B$ em (88), tem-se que,

$$A \cdot e^{K_0 i a} - A \cdot e^{-i K_0 a} = 0$$

Ou

$$A(e^{i K_0 a} - e^{-i K_0 a}) = 0 \quad (89)$$

Como

$$e^{i K_0 a} = \cos K_0 a + i \operatorname{sen} K_0 a . \quad (90)$$

E

$$e^{-i K_0 a} = \cos K_0 a - i \operatorname{sen} K_0 a . \quad (91)$$

Levando a (90) e (91) na expressão da exponencial em (89), obtém-se que,

$$e^{i K_0 a} - e^{-i K_0 a} = 2i \sin K_0 a \quad (92)$$

De acordo com a condição em (89), pode-se supor que,

$$2Ai \sin K_0 a = 0 \Leftrightarrow K_0 a = n\pi$$

Ou

$$K_0 = \frac{n\pi}{a} , \quad (93)$$

A expressão em (93) mostra que o número de onda é proporcional ao número quântico principal. Este número quântico pode variar como um número natural ($n = 0, 1, 2, 3 \dots$). Considerando a expressão da energia em (86) e com base no número de onda em (93), pode-se obter a expressão da energia em função do número quântico n . Isto é,

$$E = \frac{\hbar^2 K_0^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} . \quad (94)$$

O que mostra que na mecânica quântica uma partícula presa num poço de quadrado infinito possui uma quantização de energia. Isto é, a energia não é contínua como na mecânica clássica (JOHN R. TAYLOR, 2013). De acordo com essa equação, observa-se que a partícula de grande massa possui energia baixa e se a largura do poço aumentar a energia diminui e no caso contrário, aumenta.

O poço quadrado infinito possui como análise, a quantização da energia como um princípio central da mecânica quântica, diferentemente do que acontece no caso da mecânica clássica. Além disso é possível obter o comportamento da função de onda graficamente, considerando valores de n para os três primeiros valores ((DONANGELO E CAPAZ, 2009).

No caso da mecânica quântica, as condições de contorno implicam que a partícula só exige energias discretas, pois o confinamento espacial altera a dinâmica do sistema, fazendo com que a energia dependa do número quântico e das dimensões do poço.

3. Metodologia

A análise desse estudo, foi conduzida a partir da resolução analítica da equação de Schrödinger em duas configurações específicas: potencial nulo (partícula livre) e potencial quadrado infinito. As soluções foram obtidas por separação de variáveis e aplicação de condições de contorno, sendo posteriormente interpretadas à luz da mecânica quântica padrão.

A pesquisa configura-se como um estudo teórico-conceitual, de caráter analítico, fundamentado na revisão e sistematização da literatura em mecânica quântica, enfatizando a equação de Schrödinger como base das soluções das equações diferenciais para avaliar o poço quadrado infinito e a partícula livre. Nesse sentido, o artigo não se orienta por investigação empírica, mas pela construção conceitual e pela interpretação formal dos fenômenos quânticos.

A metodologia nesse sentido, caracteriza-se como uma pesquisa teórica de abordagem qualitativa, fundamentada em uma revisão bibliográfica do tipo narrativa, orientada à análise e sistematização dos principais referenciais da mecânica quântica relacionados à equação de Schrödinger. A seleção das referências foi realizada com base em critérios de relevância científica, consistência teórica e reconhecimento acadêmico dos autores, priorizando obras clássicas e estudos consolidados na área, bem como artigos que abordam aplicações específicas, como partícula livre e poço quadrado infinito. Adicionalmente, consideraram-se textos que apresentam rigor matemático e clareza na interpretação física, permitindo a construção de uma análise coerente entre os modelos estudados e os fundamentos da teoria quântica.

A opção metodológica se justifica pelo caráter abstrato do sistema, que exige rigor matemático aliado à interpretação física, dispensando experimentação empírica e buscando um desenvolvimento no formalismo matemático com demonstrações detalhada do problema de uma função de onda dependente e independente do tempo. Nesse sentido, verifica-se pontos centrais da teoria quântica em comparação com resultados previsto pela mecânica clássica, principalmente a diferença entre comportamento ondulatório, quantização de energia e o princípio da incerteza vinculado a densidade de probabilidade.

Para consolidar o estudo, realiza-se uma revisão bibliográfica com base em autores clássicos e contemporâneos da mecânica quântica, visando estabelecer o referencial teórico sobre a equação de Schrödinger e a função de onda de uma partícula livre e o problema de um poço de potencial com aplicação de métodos

como resolução de equações diferenciais, imposição de condições de contorno e normalização chegando à equação de onda dependente e independente do tempo.

No estudo da partícula livre, analisaram-se soluções na forma de ondas planas e sua propagação para a direita, enquanto, no poço quadrado infinito, evidencia-se a quantização da energia na forma quantizada em comparação com a forma de energia contínua prevista pelo sistema da mecânica clássica. Procedeu-se ainda com uma análise comparativa entre os modelos, destacando as diferenças entre sistemas confinados e não confinados, buscando articular os resultados com interpretações físicas e aplicações, garantindo a coerência e fundamentação à investigação pesquisada nesse âmbito da teoria quântica.

4. Resultados e Discussão

A análise desenvolvida neste estudo não se fundamenta na obtenção de dados empíricos, mas na derivação e interpretação das soluções da equação de Schrödinger em sistemas ideais. Nesse sentido, os “resultados” devem ser compreendidos como consequências teóricas do formalismo matemático, cuja validade decorre da consistência interna da mecânica quântica e de sua consolidação na literatura científica.

Inicialmente, no caso da partícula livre, a solução da equação de Schrödinger conduz a funções de onda do tipo onda plana, associadas a um espectro contínuo de energia. Tal resultado não apenas confirma a ausência de confinamento espacial, mas evidencia uma característica central da mecânica quântica: a necessidade de interpretar a função de onda em termos probabilísticos. A não normalizabilidade das ondas planas, por sua vez, impõe a construção de pacotes de onda, introduzindo uma dimensão interpretativa essencial ao formalismo, especialmente no que se refere à localização da partícula.

No que concerne ao poço quadrado infinito, a imposição de condições de contorno conduz à quantização da energia, resultando em um conjunto discreto de estados estacionários. Esse resultado revela, de forma direta, que a estrutura matemática da equação de Schrödinger não apenas descreve o sistema, mas determina suas propriedades físicas fundamentais, como os níveis de energia permitidos e a forma das funções de onda. A presença de nós e a distribuição espacial da probabilidade reforçam a ruptura com a noção clássica de trajetória.

A comparação entre os dois modelos evidencia que o potencial exerce papel estruturante na definição do comportamento quântico. Enquanto a ausência de potencial permite liberdade de movimento e espectro contínuo, o confinamento espacial impõe restrições que se traduzem matematicamente em autovalores discretos de energia. Essa distinção não é apenas formal, mas constitui um dos fundamentos da interpretação física da mecânica quântica.

Além disso, observa-se que, no limite de números quânticos elevados, os resultados obtidos para o poço quadrado infinito aproximam-se do comportamento clássico, em conformidade com o princípio da correspondência. Tal convergência indica que a mecânica clássica pode ser compreendida como um caso limite da teoria quântica, reforçando a consistência entre os dois domínios.

A discussão permite ainda destacar que a equação de Schrödinger atua como um formalismo unificador, capaz de descrever sistemas com

comportamentos distintos a partir de uma mesma estrutura matemática, sendo o potencial o elemento que diferencia qualitativamente as soluções. Nesse sentido, fenômenos como o tunelamento quântico e a dualidade onda-partícula emergem não como hipóteses adicionais, mas como consequências diretas do formalismo.

Ressalta-se que, embora os modelos analisados sejam idealizados, eles desempenham papel central na construção conceitual da mecânica quântica, funcionando como referenciais fundamentais para a compreensão de sistemas mais complexos. Assim, os resultados discutidos devem ser interpretados como modelos teóricos estruturantes, cuja função não é reproduzir diretamente a realidade empírica, mas fornecer as bases para sua compreensão.

Ressalta-se, entretanto, que ambos os modelos analisados são idealizações, não contemplando efeitos como interações externas ou potenciais reais complexos, o que limita sua aplicação direta a sistemas físicos reais.

5. Conclusão

A análise da equação de Schrödinger aplicada à partícula livre e ao poço quadrado infinito em que mostrou a enorme discrepância entre a mecânica clássica e quântica, evidenciou com base na teoria desenvolvida e nos exemplos dados, o imenso papel central da mecânica quântica na descrição do mundo microscópico em que os conceitos de densidade de probabilidade correspondem a um papel central no comportamento de um sistema quântico, como no caso de uma partícula livre que leva a conceitos fundamentais como quantização e probabilidade, ausentes na física clássica.

No poço quadrado infinito, observou-se a existência de níveis discretos de energia, verificados a partir do número quântico n que não aceita qualquer valor de energia, pois o sistema sendo não contínuo, exige a existência de número quântico inteiro assim como se verificou no caso da partícula livre, que conduz a espectro contínuo de energia e ao movimento sem restrições, caracterizado pela propagação ondulatória.

Portanto, destacou-se que como premissa no contexto anterior que a função de onda representa um elemento importante para descrever sistemas quânticos que podem ser analisados e interpretados com base na função de onda dependente e independente do tempo juntamente com o caráter espacial que caracteriza completamente o sistema do ponto de vista probabilístico. Nesse comportamento ondulatório, ampliam-se os conceitos, restringindo-se a noção clássica de trajetória e sua certeza de encontrar o sistema quântico simultaneamente no tempo e na região em que existe. Dessa maneira, a equação de Schrödinger mostrou-se um formalismo unificador, capaz de explicar diferentes regimes físicos e fenômenos como o tunelamento quântico, partícula livre e poço de potencial que, embora idealizados, são fundamentais para a compreensão de sistemas reais e para o avanço científico e tecnológico.

O estudo evidenciou que a estrutura matemática da equação de Schrödinger determina diretamente as propriedades físicas dos sistemas analisados, particularmente no que se refere à quantização da energia e à natureza probabilística dos estados quânticos. A comparação entre partícula livre e poço quadrado infinito revelou o papel decisivo das condições de contorno na definição

dos espectros energéticos. Apesar da consistência dos resultados com a teoria quântica padrão, reconhece-se que os modelos adotados são idealizações, o que limita sua aplicação direta a sistemas reais mais complexos. Trabalhos futuros podem explorar potenciais finitos e interações externas, ampliando a validade física das soluções obtidas.

Referências

AKARSU, B. Einstein's redundant triumph "quantum physics": an extensive study of teaching/learning quantum mechanics in college. *Latin American Journal of Physics Education*, v. 4, n. 2, p. 273–285, 2010.

AYENE, M.; KRIEK, J.; DAMTIE, B. Wave-particle duality and uncertainty principle. *Physical Review Physics Education Research*, v. 7, n. 2, p. 020113, 2011. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevSTPER.7.020113>

BOLIVAR, A. O. Limite clássico da mecânica quântica. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 25, n. 2, p. 169–175, 2003.

COHEN-TANNOUJDI, C.; DIU, B.; LALOË, F. *Quantum mechanics*. New York: Wiley, 2019.

CUSTODIO, R. et al. Quatro alternativas para resolver a equação de Schrödinger. *Química Nova*, v. 25, n. 1, p. 159–170, 2002.

DONANGELO, R. J.; CAPAZ, R. B. *Introdução à mecânica quântica*. Rio de Janeiro: Cecierj, 2009.

EISBERG, R.; RESNICK, R. *Física quântica*. Rio de Janeiro: Elsevier, 1979.

FREIRE JUNIOR, O.; GRECA, I. M. Informação e teoria quântica. *Scientiae Studia*, v. 11, n. 1, p. 11–33, 2013.

FREITAS, G. B.; VEIGAS, R. G.; DRIGO FILHO, E. Poço quântico finito. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 32, n. 1, p. 1502–1506, 2010.

GASIOROWICZ, S. *Quantum physics*. New York: Wiley, 1996.

GRIFFITHS, D. J. *Introduction to quantum mechanics*. 2. ed. Pearson, 2005.

KLEPPNER, D.; KOLENKOW, R. J. *An introduction to mechanics*. Cambridge: Cambridge University Press, 2013.

LEITE, P. K. Causalidade e teoria quântica. *Scientiae Studia*, v. 10, n. 1, p. 165–177, 2012.

MESSIAH, A. *Quantum mechanics*. New York: Dover, 2000.

PAULINO, K. H. et al. Solução quântica para o poço duplo. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 32, n. 4, p. 4306, 2010.

SANTOS, L. C. N. *Método de operadores em mecânica quântica*. Dissertação (Mestrado) – UFSC, 2010.

SCHIFF, L. I. *Quantum mechanics*. New York: McGraw-Hill, 1955.

SILVA JÚNIOR, N. L.; ANDRADE-NETO, A. V. Probabilidade de tunelamento. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 35, n. 3, p. 1–6, 2013.

SISMANOGLU, B. N.; NASCIMENTO, J. C.; ARAGÃO, E. C. Tunelamento quântico. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 37, n. 1, p. 1312, 2015.

SYMON, K. R. *Mecânica*. Rio de Janeiro: Campus, 1996.

TAYLOR, J. R. *Mecânica clássica*. Porto Alegre: Bookman, 2013.

THORNTON, S. T.; MARION, J. B. *Classical dynamics*. Belmont: Brooks/Cole, 2003.

YOUNG, H. D.; FREEDMAN, R. A. *Ótica e física moderna*. São Paulo: Pearson, 2009.

ZARUR, E.; REUVEN, P. *Schaum's outline of quantum mechanics*. New York: McGraw-Hill, 2010.

APÊNDICE 1

Exemplo 1

Considerando uma função inicial não normalizada, aplica-se o procedimento de normalização para garantir a consistência probabilística do modelo. O resultado evidencia que

$$\varphi(x, 0) = Ax(x - a) \quad P/ \quad 0 \leq x \leq a$$

Normaliza-se, primeiramente a a função de onda:

$$\int_0^a \varphi^t(x) \varphi(x) dx = 1 \rightarrow \int_0^a A^2 x^2 (x - a)^2 dx = 1$$
$$\int_0^a A^2 x^2 (x^2 - 2ax + a^2) dx = A^2 \left[\frac{x^5}{5} - \frac{2}{4} ax^4 + \frac{x^3}{3} a^2 \right] \Big|_0^a = 1 \rightarrow$$
$$A^2 \cdot \left(\frac{a^5}{5} - \frac{2a^5}{4} + \frac{a^5}{5} \right) = \frac{12a^5 - 30a^5 + 20a^5}{60} \rightarrow \frac{2}{60} a^5 A_c^2 = 1 \rightarrow A = \sqrt{30/a^5}$$

Logo:

$$c_n = \int_0^a \varphi(x) * \varphi(x, 0) dx$$

Onde para um poço quadrado infinito, tem-se que:

$$\varphi * (x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$$

e

$$\varphi(x, 0) = \sqrt{\frac{30}{a^5}} \cdot x(x - a)$$

Que é a função dada ($f(x)$). Assim:

$$c_n = \sqrt{\frac{60}{a^5}} \cdot \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) x(x - a) dx$$

$$= \frac{2\sqrt{15}}{a^3} \left[\int_0^a x^2 \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) dx - \int_0^a x_a \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) dx \right] \rightarrow c_n = \frac{2\sqrt{15}}{a^3} (I_1 - I_2)$$

Exemplo de aplicação 2

A função de onda da partícula é dada pela expressão,

$$\varphi(x) = A \cdot e^{K_0 ix} + B \cdot e^{-K_0 ix}$$

Fazendo $A = -B$, tem-se que,

$$\varphi(x) = A \cdot e^{K_0 ix} - A \cdot e^{-K_0 ix} \Rightarrow \varphi(x) = A \cdot (e^{K_0 ix} - e^{-K_0 ix})$$

Como

$$e^{K_0 ix} - e^{-K_0 ix} = 2 \sin K_0 x \Rightarrow \varphi(x) = 2Ai \sin K_0 x$$

Considerando que,

$$K_0 = \frac{n\pi}{a} \Rightarrow \varphi(x) = A \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$$

Uma vez que a probabilidade de encontrar a partícula no poço quadrado infinito é 1. Tem-se que:

$$\int_0^a |\varphi(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow \int_0^a A^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{a} x\right) dx = 1 \Rightarrow \frac{n\pi}{a} x = u \Rightarrow dx = \frac{a}{n\pi} du \Rightarrow$$

$$1 = A^2 \int_0^a \sin^2 u \cdot \left(\frac{a}{n\pi}\right) du \Rightarrow \frac{n\pi}{a} = A^2 \int_0^a \sin^2 u du$$

Como,

$$\cos 2u = -\cos^2 u + \sin^2 u = +1 + 2 \sin^2 u \Rightarrow \sin^2 u = \frac{1A \cos 2u}{2}$$

$$\begin{aligned}\Rightarrow \frac{n\pi}{a} &= A^2 \int_0^a \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos 2u \right) du = \frac{A^2}{2} \cdot u \Big|_0^a + \frac{1}{4} \sin 2u \Big|_0^a \\ \frac{n\pi}{a} &= \frac{A^2}{2} \cdot \left(\frac{n\pi}{a} x \right) \Big|_0^a + \frac{1}{4} \sin \left(\frac{u\pi^0}{a} x \right) \Big|_0^a \Rightarrow \frac{n\pi}{a} = \frac{A^2}{2} \cdot \frac{n\pi}{a} (a - 0) \\ &\Rightarrow 1 = \frac{a}{2} A^2 \rightarrow A = \sqrt{2/a}\end{aligned}$$

Assim sendo a função de onda da partícula presa no poço quadrado infinito é dada por:

$$\varphi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$$

A normalização da função de onda no poço quadrado infinito como mostrado, mostra que o princípio probabilístico da mecânica quântica conduz a garantia de que a probabilidade total de encontrar a partícula seja igual a unidade, dando a certeza de 100% de encontrar a partícula. Nesse exemplo, observa-se o sentido físico às soluções obtidas em que as funções de onda associadas a estados estacionários mostram que a energia é quantizada e depende das condições de contorno do sistema. Isto é, a normalização consolida a ligação entre o formalismo matemático e a interpretação física, permitindo descrever corretamente a distribuição de probabilidade da partícula e a certeza de encontrar na região em que está confinada. .

Exemplo de aplicação 3

Uma partícula livre possui a seguinte função de onda não normalizada

$$\varphi(x, 0) = A \cdot e^{-ax^2}$$

Onde A e a são constantes (a é real e positivo). Obtenha:

- A função de onda normalizada.
- a função de onda da partícula.

Solução

- expressão da função de onda no instante t para normalizar, usa-se a expressão de densidade de probabilidade. Isto é,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi^* \varphi dx = 1$$

Logo, substituindo $\varphi(x, 0)$, vem que,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi^* (x, 0) \varphi(x, 0) dx = \int_{-\infty}^{\infty} A^2 \cdot e^{-2ax^2} dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2ax^2} dx$$

Fazendo a mudança de variável,

$$2ax^2 = u$$

E derivando,

$$4a \cdot x dx = du \rightarrow x = \frac{u}{\sqrt{2a}} \Rightarrow \frac{ua\sqrt{11}}{\sqrt{2a}} dx = du \Rightarrow \sqrt{\frac{16a^2}{2a}} dx = u^{-1/2} du$$

Logo,

$$dx = \sqrt{\frac{1}{8a}} u^{-1/2} \cdot du$$

Levando na expressão anterior, vem que,

$$A^2 \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{1}{8a}} u^{-1/2} e^{-u} du = A^2 \int_0^{\infty} 2 \cdot \sqrt{\frac{1}{8a}} u^{-1/2} e^{-u} du$$

Fazendo

$$r(u) = u^{-1/2} e^{-u}$$

Logo,

$$A^2 \cdot \sqrt{\frac{1}{2a}} r(u) \Rightarrow -1/2 = n - 1 \Rightarrow A^2 \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{2a}} = 1 \Rightarrow A = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4}$$

O que leva a função independente do tempo:

$$\varphi(x, 0) = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4} \cdot e^{-ax^2}$$

Para obter a expressão para $\varphi(x, t)$,

Como

$$\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar},$$

Logo, considerando,

$$\varphi(x, t) = \varphi(x)\varphi(t)$$

Tem-se que,

$$\varphi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(k) e^{ikx} \cdot e^{-\frac{\hbar k^2 t}{2m}} dk$$

Fazendo

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

Como

$$\varphi(x, 0) = A \cdot e^{-ax^2}$$

Obtém-se que,

$$\varphi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} A \cdot e^{-ax^2 - ikx} dx$$

Logo:

$$\varphi(k) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(ax^2 + ikx)} dx$$

Considerando o desenvolvimento,

$$ax^2 + ikx = a \left(x^2 + \frac{ik}{a} x \right) = a \left[x^2 + \frac{ik}{a} x + \frac{i^2 k^2}{4a^2} - \frac{i^2 a^2}{4a^2} \right]$$

$$= a \left(x + \frac{ik}{2a} \right)^2 + \frac{k^2}{4a} = \left(\sqrt{ax} + \frac{ik}{2\sqrt{a}} \right)^2 - k^2/4a \, dx$$

Ou

$$\sqrt{ax} + \frac{ck}{2\sqrt{a}} = u \Rightarrow du = \sqrt{a} dx \Rightarrow dx = \frac{du}{\sqrt{a}}$$

Assim sendo,

$$\varphi(k) = \frac{A}{\sqrt{2a\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} \cdot e^{-k^2/4a} du = \frac{A \cdot e^{-k^2/4a}}{\sqrt{2a\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} du$$

Ou

$$\varphi(k) = \frac{A \cdot e^{-k^2/4a}}{\sqrt{2a} \cdot \sqrt{\pi}} \cdot \sqrt{\pi} \Rightarrow \varphi(k) = \frac{A}{\sqrt{2a}} e^{-k^2/4a}$$

Portanto:

$$\begin{aligned} \varphi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{A}{\sqrt{2a}} \cdot e^{-k^2/4a} \cdot e^{ikx} \cdot e^{-\frac{hk^2 t}{2m}} dk \Rightarrow \\ \varphi(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2a}} e^{-k^2/4a} \cdot e^{-ikx} \cdot e^{-\frac{hk^2 t}{2m}} \Rightarrow \\ &= \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2a}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-k^2 \left(\frac{1}{4a} + \frac{hit}{2m} \right) + ikx} = \frac{A}{2\sqrt{\pi a}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-k^2 b + ikx} dk \end{aligned}$$

Fazendo,

$$b = \frac{m + 2aith}{4am}$$

Logo:

$$\begin{aligned} -k^2 b + ikx &= -b(k^2 - ikx) = -b \left[k^2 - ikx + \frac{i^2 k^2 x^2}{4b^2} - \frac{i^2 k^2 x^2}{4b^2} \right] \\ &= -b \left[\left(k - \frac{ikx}{2b} \right)^2 + \frac{k^2 x^2}{4b^2} \right] = - \left(k - \frac{ikx}{2b} \right)^2 - \frac{bk^2 x^2}{4b^2} \rightarrow \\ \varphi(x, t) &= \frac{A}{2\sqrt{\pi a}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-b \left(k - \frac{ikx}{2b} \right)^2} \cdot e^{-bk^2 x^2 / 4b^2} dk \Rightarrow \\ \varphi(x, t) &= \frac{A}{2\sqrt{\pi a}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(\sqrt{b} k - \frac{ikx}{2\sqrt{b}} \right)^2} \cdot e^{-k^2 x^2 / 4b} dk \\ \sqrt{b} k - \frac{ikx}{2\sqrt{b}} &= u \Rightarrow \sqrt{b} dk = du \Rightarrow dk = \frac{du}{\sqrt{b}} \end{aligned}$$

Dessa maneira,

$$\begin{aligned} \varphi(x, t) &= \frac{A}{2\sqrt{\pi a}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} \cdot e^{-x^2/4b} \frac{du}{\sqrt{b}} \\ &= \frac{A}{2\sqrt{\pi} \cdot \sqrt{a}} \cdot \frac{1}{\sqrt{b}} \cdot \sqrt{\pi} \cdot e^{-x^2/4b} \Rightarrow \frac{A}{2\sqrt{a}} \cdot \frac{1}{\sqrt{b}} e^{-x^2/4b} \Rightarrow b = \frac{m + 2aith}{4am} \Rightarrow \\ &= \frac{A}{2\sqrt{a}} \cdot \frac{2\sqrt{am}}{\sqrt{m + 2aith}} \cdot e^{-ax^2/(1+2aith/m)} \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\varphi(x, t) = A / (1 + 2aith/m) \cdot e^{-ax^2 / (1+2aiht/m)}$$

Que representa a função de onda da partícula