

Mecânica Quântica na Descrição de Schrödinger

(Quantum Mechanics in the description of Schrödinger)

Rafael de Lima Rodrigues^{a)}

Departamento de Ciências Exatas e da Natureza

Universidade Federal da Paraíba, Cajazeiras, PB - 58.900-000 - Brasil

e

Departamento de Física, Universidade Federal da Paraíba

Campina Grande, PB - 58.109-970 - Brasil

Trabalho recebido em 10 de fevereiro de 1996

Apresentamos um trabalho de revisão sobre a construção da mecânica quântica não-relativística na descrição de Schrödinger. Consideramos uma idéia intuitiva da elaboração da equação de Schrödinger e aplicamos o método de fatorização para uma resolução espectral do oscilador quântico, analisando também os postulados e outras aplicações da mecânica quântica.

Abstract

We present a review work on the construction of the non-relativistic quantum mechanics in the Schrödinger's description. An intuitive idea of the elaboration of the Schrödinger equation and an application of the factorization method for a spectral resolution of the quantum oscillator have been considered, analysing also the postulates and other applications of the quantum mechanics.

I. Introdução

Este artigo de revisão é o resultado de um segundo mini-curso sobre introdução à Mecânica Quântica, ministrado no Centro de Ciências e Tecnologia da UFPB, para uma clientela mista de alunos de graduação, em sua maioria do curso de Engenharia Elétrica da UFPB, alunos graduados do Curso de Licenciatura Plena em Física da Universidade Estadual da Paraíba e alguns professores, no período de dois meses. O curso tinha como objetivo principal, formar os bolsistas do PIBIC/UFPB/CNPq (alunos do Curso de Engenharia Elétrica dentro) do projeto "Método Alternativo em Mecânica Quântica". Alguns alunos se inscreveram com o intuito de ter uma noção dos conceitos e aplicações da física quântica, e outros, com o objetivo de buscar subsídios para estudar física teórica. Contamos também com a participação dos bolsistas de outros projetos. Em cada aula foi dado uma lista de exercícios

propostos e resolvidos em sala de aula.

No mini-curso anterior, vimos que a Mecânica Clássica Não-Relativística pode ser descrita através de três formalismos equivalentes, a saber: newtoniano, lagrangeano e hamiltoniano [1]. Estes formalismos descrevem o movimento de um sistema físico (um corpo ou um sistema de vários corpos) macroscópico¹. O estado de um sistema mecânico macroscópico é completamente determinado pelo conhecimento dos valores das coordenadas de posição e da velocidade em um dado instante de tempo.

Entretanto, no caso de um sistema físico subatômico, o seu estado é representado por uma função de onda cujo símbolo é a letra grega ψ . A função de onda normalizável pertence a um espaço vetorial de funções complexas de quadrado integráveis, o qual no caso unidimensional, matematicamente é representado por $L^2(\mathbf{R}, dx)$. No caso não-relativístico, ψ satis-

¹Um sistema físico em Mecânica clássica não-relativística é caracterizado por baixa velocidade (velocidade muito menor do que a velocidade da luz no vácuo) e por possuir uma massa mensurável no contexto da Física Clássica. No caso em que tais sistemas forem conservativos, a energia total é a soma da energia cinética com a energia potencial.

faz a uma equação diferencial de segunda ordem nas coordenadas espaciais e de primeira ordem na coordenada temporal, a qual é denominado de equação de Schrödinger. A interpretação física para a função de onda decorre do seguinte postulado: ao efetuarmos, num certo instante de tempo, uma medida da posição de uma partícula, ela representa a amplitude de probabilidade de encontrar a partícula microscópica numa região entre x e $x + dx$.

Consideramos o Método Algébrico ou Método de Fatorização (MF) em Mecânica Quântica para o oscilador harmônico simples. Algumas aplicações da equação de Schrödinger em três dimensões via outros métodos algébricos são comentadas, apontando as referências principais. Investigamos as soluções explícitas da equação de Schrödinger unidimensional para uma partícula livre e o oscilador harmônico simples. Finalizamos este trabalho, abordando sucintamente os postulados da Mecânica quântica, o princípio de incerteza de Heisenberg e a dualidade onda-partícula.

II. A elaboração da Mecânica quântica

O avanço tecnológico deste século foi devido, entre outros fatores, ao desenvolvimento da teoria que governa o movimento de sistemas microscópicos, a qual é denominada de Mecânica Quântica ou Mecânica ondulatória².

A Mecânica Quântica é uma ampla teoria sobre a qual é baseado muito do nosso conhecimento de mecânica e radiação. É uma teoria recente. Em 1900, a mecânica da matéria, baseada nas leis do movimento de Newton, tinha resistido a alterações durante séculos. Assim, do mesmo modo, a teoria ondulatória da luz, baseada na teoria eletromagnética, resistia sem modificações por vários anos. Vinte e seis anos depois, ocorreu uma revolução científica. Em 1905, Einstein mostrou que a luz, seguramente, possuía algumas propriedades como aquelas das partículas. Em 1913, as mais recentes teorias do átomo de hidrogênio de Bohr mostraram que partículas, como elétrons, diferiam em sua mecânica daquela sugerida por Newton. Então, em seqüência à audaz sugestão de de Broglie, em 1924, de que, em certas circunstâncias, os elétrons comportavam-se como ondas, foi dada uma formulação precisa por Schrödinger e Heisenberg em 1926. Esta era a teoria da mecânica ondulatória ou quântica. Ela contribuiu para uma solução quase completa de alguns

problemas, por mostrar que há aspectos ondulatórios na partícula elementar.

A Mecânica quântica é uma teoria notável. Parece não haver nenhuma dúvida real que muito da física e tudo da química seriam deduzidos de seus postulados ou "leis". Ela tem respondido corretamente a muitas questões e tem dado uma visão profunda dos processos naturais, estando preparada para contribuir muito mais.

A Mecânica quântica faz parte de quase todos os ramos da física moderna. Ela é multi-disciplinar, fazendo parte das descrições de fenômenos físicos em que há consideração sobre os constituintes internos dos corpos em observação, seja com energia de alguns elétron-volts, em sistema com elementos de física molecular ou física atômica, seja com energia de alguns MeV, em sistemas com elementos de física nuclear. Com a descoberta dos fenômenos de radioatividade, raios-x e dos elétrons, no fim do século dezanove, muitas experiências foram realizadas e surgiram muitos resultados que não podiam ser explicados pela Mecânica clássica.

Na virada do século, houve muitas especulações na busca de uma nova teoria que descrevesse, satisfatoriamente, as experiências em escalas submicroscópicas, envolvendo os átomos e seus constituintes. Somente por volta de 1926 tal teoria foi construída e denominada de Mecânica Quântica. A priori, com o advento da Mecânica Quântica formulada por Schrödinger (1926) [2, 3], sob a ótica do tratamento não-relativístico, e por Dirac (1927) [3], levando-se em conta a relatividade especial de Einstein, acreditava-se que muitos problemas do mundo microscópico seriam resolvidos. No entanto poucos potenciais físicos puderam ser resolvidos exatamente pela Mecânica Quântica não-relativística, como, por exemplo, o átomo de hidrogênio, os osciladores harmônicos unidimensional e tridimensional, os potenciais de Pöschl-Teller e Morse (com aplicação em teoria molecular), etc, e menos ainda pela Mecânica quântica relativística. Na verdade, muito pouco foi explicado diante do que ainda falta ser entendido. Mesmo assim, da década de vinte até hoje, o mundo passou por um grande avanço tecnológico, em parte graças a uma melhor compreensão da Mecânica quântica, principalmente no campo da eletrônica.

A teoria microscópica que descreve a interação da luz com os átomos é baseada na Mecânica Quântica e

²A rigor, Mecânica Quântica Ondulatória refere-se à Mecânica Quântica na formulação de Schrödinger. A formulação de Heisenberg, por exemplo, é chamada de Mecânica Matricial

chama-se de Óptica Quântica. Tal interação, no caso de luz coerente pode ser através de laser, o qual tem inúmeras aplicações tecnológicas. Além do mais, com a descoberta do laser, na década de sessenta, muitas experiências têm sido realizadas com o intuito de se verificarem as previsões da física quântica.

As partículas microscópicas são idênticas e indistinguíveis, e governadas por modelos probabilísticos que dependem de seus atributos fundamentais, a saber, a massa, spin, carga, etc. “O momento angular intrínseco” destas partículas, denominado de spin, é colocado à mão no caso não-relativístico, mas surge naturalmente no caso relativístico de Dirac, para uma partícula de spin 1/2. Até o momento, não existe uma teoria consistente para partículas de spin maior do que dois. As partículas existentes na natureza são divididas em dois tipos, de acordo com o teorema de spin-estatística:

(i) Bósons: são aquelas partículas idênticas descritas, em Mecânica Quântica, por funções de onda simétricas e satisfazem a estatística de Bose-Einstein. Portanto, possuem spin inteiro e seus operadores de criação e aniquilação, na versão da segunda quantização, satisfazem a relações de comutação. Ex: fóton, H , H_2 , D_2 , etc.

(ii) Férmions: são todas as partículas idênticas descritas, em Mecânica quântica, por funções de onda antissimétricas e satisfazem a estatística de Fermi-Dirac. Portanto, possuem spin semi-inteiro e seus operadores de criação e aniquilação, no contexto da segunda quantização, satisfazem a relações de anticomutação. Ex: elétron, próton, nêutron, etc.

A nossa motivação principal está voltada para uma melhor compreensão de alguns métodos teóricos em Mecânica Quântica. A nossa análise é baseada em técnicas algébrica e analítica. Após a sua construção por Heisenberg, no contexto matricial, e por Schrödinger, baseada em equações diferenciais de segunda ordem, muitas técnicas alternativas têm surgido. Na mesma época em que Schrödinger formulou a teoria da Mecânica Quântica não-relativística, ele mostrou a equivalência àquela construída por Heisenberg.

Os sistemas quânticos com simetrias dinâmicas podem ser resolvidos algebricamente, e para eles podem-se aplicar o método de fatorização [3, 2] ou a técnica algébrica de supersimetria em Mecânica Quântica (SUSI MQ) não-relativística [4]. O leitor poderá encontrar também aplicações da SUSI MQ para o caso

relativístico em [5] e, inclusive, nas referências citadas lá. A SUSI MQ, é uma técnica alternativa para resolver a equação de Schrödinger, cuja solução são as autofunções e os autovalores de energia. A SUSI MQ pode ser utilizada para se construir novos potenciais³ isoespectrais (mesmos autovalores de energia) a partir de um potencial conhecido [6, 7], fornecendo uma ampliação da classe de potenciais com soluções exatas das respectivas equações de Schrödinger. Para os potenciais quânticos que possuem uma simetria dinâmica em conexão com osciladores quânticos, aplicam-se também a técnica algébrica de Wigner-Heisenberg [8].

Em síntese, os eventos que culminaram com a criação da Mecânica Quântica (MQ) foram os seguintes:

1901 → Planck → Hipótese quântica da radiação do corpo negro.

1905 → Einstein → Efeito foto-elétrico.

1913 → Bohr → Teoria Quântica do espectro do átomo de hidrogênio.

1922 → Compton → Espalhamento de fótons ao se chocar com elétrons.

1925 → Pauli → Princípio de exclusão para férmions.

1925 → de Broglie → Hipótese de ondas de matéria.

1926 → Schrödinger → Equação de onda para a partícula de de Broglie.

1927 → Heisenberg → Relação de incerteza.

1927 → Davison e Germer → Experimento sobre as propriedades ondulatória de elétrons.

1927 → Born → Interpretação física da função de onda.

Na seção seguinte veremos uma idéia intuitiva para chegarmos à equação de Schrödinger e analisaremos a construção das funções de onda que descrevem os estados quânticos estacionários. Matematicamente, veremos que as funções de onda geram um espaço vetorial de funções, munido de um produto escalar, denominado de espaço de Hilbert.

Uma variável dinâmica genérica em mecânica clássica $A(\vec{x}; \vec{p})$ é representada em MQ por um operador linear, o qual tem a seguinte propriedade: $A(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1(A\psi_1) + c_2(A\psi_2)$. Os operadores lineares atuam na função de onda do sistema físico, convertendo-a em outra função de onda pertencente também ao espaço de Hilbert, $\phi = \mathbf{A}\psi$. Os operadores

³Em Mecânica Quântica é comum usar a palavra potencial ao invés de energia potencial, ou seja, por potencial entendemos como sendo a energia potencial.

em MQ são restritos a classe dos operadores hermitianos ou operadores auto-adjuntos. Definimos o hermitiano conjugado (ou adjunto de um operador) \mathbf{A} por: \mathbf{A}^\dagger (lê-se A dagger) = $(\mathbf{A}^T)^*$, onde \mathbf{A}^T é a matriz transposta e o asterísco (*) é o complexo conjugado. O operador hermitiano (ou auto-adjunto) é aquele em que o seu adjunto resulta nele mesmo, ou seja: $\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A}$. Os operadores hermitianos possuem autofunções ortogonais (isto é, o produto escalar de duas autofunções que diagonalizam um operador hermitiano deve ser nulo) e os seus autovalores são reais.

Destacaremos, aqui quatro propriedades importantes sobre operadores:

- i) $(\mathbf{A}^\dagger)^\dagger = \mathbf{A}$;
- ii) $(\mathbf{AB})^\dagger = \mathbf{B}^\dagger \mathbf{A}^\dagger$;
- iii) $(\mathbf{A} + \mathbf{B})^\dagger = \mathbf{A}^\dagger + \mathbf{B}^\dagger$;
- iv) $(\lambda \mathbf{A})^\dagger = \lambda^* \mathbf{A}^\dagger$, onde λ é um número complexo e \mathbf{B} é um operador linear.

Na seção VI, consideraremos uma análise detalhada de outras propriedades de operadores adjuntos em Mecânica Quântica.

Neste estágio, o leitor está percebendo que a linguagem abstrata da Mecânica Quântica incide sobre espaços vetoriais. Antes de retomarmos a análise da estrutura matemática da Mecânica Quântica, gostaríamos de fazer alguns comentários pertinentes. Para você que está querendo desvendar os mistérios que existem por trás da roupagem matemática da Mecânica Quântica, sugerimos que pare a leitura por alguns dias, para estudar um pouco de álgebra linear (espaço vetorial e equação de autovalor), equações diferenciais, de segunda ordem, teoria clássica de probabilidade e teoria clássica de ondas.

Nas bibliotecas de Física o leitor pode encontrar alguns livros com problemas resolvidos sobre Mecânica Quântica. Mas, seria prudente consultar um professor desta disciplina para evitar perda de tempo e não ficar lendo qualquer livro disponível.

Introduzimos a Física Quântica, iniciando pela análise da elaboração da Mecânica Quântica, culminando com a construção da equação de Schrödinger [2, 3].

III. A equação de Schrödinger e os estados estacionários

Nesta seção, daremos uma idéia intuitiva de como Schrödinger construiu a equação para as ondas de matéria de de Broglie, que propiciou o surgimento da

Mecânica Quântica (MQ). A equação de Schrödinger dá a evolução temporal da função de onda, cuja abordagem a seguir pode ser encontrada na referência [3].

Considere uma partícula com valores bem definidos de velocidade \vec{v} , momento linear \vec{p} e energia E movendo-se livremente em uma dimensão. Sabemos (desde que não haja nenhuma força atuando sobre ela, ou seja, não haja energia potencial) que se a partícula for não relativística, $\vec{p} = m\vec{v}$ e $E = \frac{1}{2}mv_x^2$. A relação energia - momento é

$$E = \frac{p_x^2}{2m}. \quad (1)$$

De acordo com a hipótese de de Broglie, associada à partícula livre deve existir uma onda caracterizada pelo seguinte comprimento de onda:

$$\lambda = \frac{h}{p} \Rightarrow \hbar k = p, \quad \hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,0545 \times 10^{-27} \text{ erg.s}$$

e, considerando a hipótese de quantização de Einstein,

$$\hbar\omega = E, \quad (2)$$

onde $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ é o módulo do vetor número de onda e $\omega = 2\pi\nu$ é a frequência angular, obtém-se:

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (3)$$

Esta equação evidencia o fato de que a onda plana de de Broglie é dispersiva. O próximo passo será deduzir uma equação diferencial que descreve a dinâmica da respectiva onda de de Broglie.

As formas possíveis para tal onda são as seguintes ondas harmônicas: $\cos(kx - \omega t)$ ou $\sin(kx - \omega t)$, ou ainda, de forma mais geral, como uma combinação linear das duas, a saber:

$$\psi(x, t) = a \cos(kx - \omega t) + b \sin(kx - \omega t) \quad (4)$$

onde a e b são constantes arbitrárias. Esta onda é solução da seguinte equação de onda unidimensional:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = 0, \quad v = \frac{\omega}{k}. \quad (5)$$

Vamos construir uma equação diferencial para a onda harmônica ψ de modo que a equação (3) seja satisfeita. Note que para ψ ser uma onda harmônica ela deve ter derivada de segunda ordem em relação a coordenada espacial.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial x} &= k[-a \sin(kx - \omega t) + b \cos(kx - \omega t)], \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} &= -k^2[a \cos(kx - \omega t) + b \sin(kx - \omega t)] = -k^2 \psi, \\ \frac{\partial \psi}{\partial t} &= -\omega[-a \sin(kx - \omega t) + b \cos(kx - \omega t)] \quad e \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} &= -\omega^2 \psi. \end{aligned} \quad (6)$$

Das possíveis equações diferenciais para ψ , duas obviamente são:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{-\omega}{k} \frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \frac{\omega^2}{k^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}. \quad (7)$$

A segunda equação é exatamente a equação de onda clássica, a qual não satisfaz à condição dada pela equação (3). Precisamos agora de uma única equação cujas soluções representem todos os movimentos de uma partícula livre, isto é, aquela que é satisfeita pelas ondas de matéria em todos os instantes. A equação diferencial que procuramos não pode ter derivada de segunda ordem no tempo porque violaria a relação entre a frequência angular e vetor número de onda, conforme a equação (6).

A partir da análise das equações (3) e (6) vemos que $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ deve ser relacionada com $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$, através de alguma constante de proporcionalidade. Assim, fazemos com que a razão entre os coeficientes das funções cosseno nos dois casos seja a mesma que a razão entre os coeficientes das funções seno:

$$\frac{a}{b} = -\frac{b}{a} \Rightarrow b^2 = -a^2 \quad (8)$$

isto é, $b = ia$, ψ se reduz a

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= a[\cos(kx - \omega t) + i \operatorname{sen}(kx - \omega t)] \\ &= ae^{i(kx - \omega t)}. \end{aligned} \quad (9)$$

Esta onda harmônica complexa é solução também da equação de onda unidimensional (5).

Desta forma as ondas de matéria para uma partícula de momento \vec{p} são representadas por uma função harmônica complexa de x e t . Pela diferenciação direta de ψ na equação (9) encontramos que:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\omega\psi, \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -k^2\psi = -\frac{2m\omega}{\hbar}\psi \quad (10)$$

onde a equação (3) foi utilizada na última etapa. Logo, obtemos a seguinte equação diferencial parcial de segunda ordem na coordenada espacial e de primeira ordem no tempo:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2}. \quad (11)$$

Esta é a equação de Schrödinger para uma partícula livre em uma dimensão. Comparando com a energia cinética em termos do momento linear vemos que na descrição de Schrödinger temos a seguinte correspondência das variáveis dinâmicas x e p_x com os respectivos operadores \hat{x} e \hat{p}_x :

$$x \rightarrow \hat{x} = x, \quad p_x \rightarrow \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (12)$$

Com esta representação em termos de um operador diferencial, é fácil de verificar que em MQ $\hat{x}\hat{p}_x$ é diferente $\hat{p}_x\hat{x}$. Isto está relacionado com o fato de que em MQ a posição e o momento linear não podem ser medidos simultaneamente, o que será discutido na seção sobre o princípio de incerteza de Heisenberg. Outras propriedades de operadores serão analisadas na seção sobre os postulados da MQ.

Agora consideraremos a interpretação física da função de onda e sua condição de admissibilidade. A integral definida abaixo

$$\int_a^b |\psi(x)|^2 dx, \quad (13)$$

representa a probabilidade de encontrar a partícula entre x e $x + dx$. Logo, $|\psi(x)|^2$ é a densidade de probabilidade e, por sua vez, a integral deve ser finita com a seguinte condição de contorno: $\psi(x) \rightarrow 0$ quando $x \rightarrow \pm\infty$. Quando a integral é efetuada em todo o espaço, obtemos a condição de normalização da função de onda, a saber:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1, \quad (14)$$

a qual representa a certeza de encontrarmos a partícula em algum lugar da reta. Retomaremos esta análise quando discutirmos os postulados da MQ.

Para uma partícula livre movendo-se num espaço tridimensional a relação entre a energia e o momento linear é dada por:

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \quad (15)$$

onde p_x , p_y e p_z são as componentes do vetor momento linear \vec{p} . Para a onda harmônica ser associada com a partícula livre, de momento \vec{p} , ela precisa ter a forma

$$\psi(\vec{x}, t) = ce^{i/\hbar(\vec{p}\cdot\vec{x} - Et)}, \quad \vec{p}\cdot\vec{x} = p_x x + p_y y + p_z z, \quad (16)$$

onde c é uma constante de normalização e usamos as relações de de Broglie e de Einstein $\hbar\vec{k} = \vec{p}$ e $\hbar\omega = E$. Esta é a generalização do caso unidimensional. É simples de verificar que a onda harmônica acima satisfaz a seguinte equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t), \quad \vec{\nabla} = \vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z}. \quad (17)$$

Esta é a equação de Schrödinger para uma partícula livre em três dimensões. Aqui ∇^2 é o operador laplaciano $\nabla^2 = \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$. Entretanto, a integral do módulo quadrado desta função de onda não satisfaz a condição de normalização referida acima. Na seção V, veremos como contornar este problema para o caso unidimensional. A idéia é colocar a partícula dentro de uma caixa cúbica com paredes rígidas.

Analogamente ao caso unidimensional obtemos, a seguinte representação para o operador momento linear em três dimensões:

$$\vec{p} \rightarrow \hat{p} = -i\hbar \vec{\nabla}. \quad (18)$$

Considerando uma partícula sujeita a força conservativa em três dimensões,

$$\vec{F} = -\vec{\nabla} V(x, y, z)$$

sua energia total conservativa é dada por:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x, y, z). \quad (19)$$

Neste caso, de acordo com a hipótese de de Broglie ($p = \hbar k$), obtém-se a seguinte relação para o módulo do vetor número de onda:

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V). \quad (20)$$

Neste caso, a equação de Schrödinger é dada por:

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, y, z) \right) \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t}. \quad (21)$$

Em termos do operador hamiltoniano, temos a seguinte equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = H \psi(\vec{r}, t), \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t). \quad (22)$$

Note que a energia potencial pode depender do tempo, o que, neste caso, torna difícil a resolução da equação de Schrödinger.

Para um sistema quântico conservativo o operador hamiltoniano H , é dado por:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}). \quad (23)$$

Como a energia potencial depende somente do vetor posição \vec{r} , ou seja, $V = V(\vec{r})$, então podemos usar o método de separação de variáveis para resolver a equação diferencial parcial. Neste caso, a função de onda que descreve o estado quântico torna-se:

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \psi(t). \quad (24)$$

Substituindo esta decomposição da função de onda ψ na equação de Schrödinger, obtemos:

$$\frac{i\hbar}{\psi(t)} \frac{d}{dt} \psi(t) = \frac{1}{\psi(\vec{r})} H \psi(\vec{r}). \quad (25)$$

Como o primeiro membro depende do tempo t e o segundo membro depende do vetor \vec{r} , a solução desta equação é uma constante que podemos identificar com a energia E .

Então podemos escrever

$$\frac{i\hbar}{\psi(t)} \frac{d}{dt} \psi(t) = \frac{1}{\psi(\vec{r})} H \psi(\vec{r}) = E = \text{constante}, \quad (26)$$

e resolvendo esta equação com relação ao tempo, encontramos a seguinte solução:

$$\psi(t) \propto e^{-iEt/\hbar}, \quad (27)$$

o que dá a dependência temporal explícita da função de onda:

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar}. \quad (28)$$

O estado quântico descrito por uma função de onda deste tipo é denominado de estado estacionário, pois $|\psi|^2$ não depende do tempo, ou seja, $|\psi(\vec{r}, t)|^2 = |\psi(\vec{r})|^2$.

A partir da equação (26), vemos que a parte espacial da função de onda satisfaz a uma equação de autovalor

$$H \psi_E(\vec{r}) = E \psi_E(\vec{r}), \quad (29)$$

onde ψ_E representa o autovetor denominado de autofunção associado ao autovalor de energia E ; tais autovalores de energia E , podem ser contínuos ou discretos. Esta é a equação de Schrödinger independente do tempo. Quando tivermos o potencial (a energia potencial) escrito(a) da seguinte forma

$$V(\vec{r}) = V(x) + V(y) + V(z),$$

o método de separação de variáveis de equações diferenciais parciais nos fornece uma autofunção de energia em

termos do produto de três autofunções independentes, a saber:

$$\psi(\vec{r}) = \psi(x)\psi(y)\psi(z), \quad (30)$$

onde $\psi(x)$, $\psi(y)$ e $\psi(z)$ satisfarão a três equações de Schrödinger independentes do tempo, na representação de coordenadas x , y e z , respectivamente.

IV. O oscilador quântico via o método de fatorização

Vamos introduzir dois operadores não-hermitianos, a^- e a^+ definidos a partir da combinação linear dos operadores de posição e momento linear (\hat{x} e $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$)

$$a^- = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}(\omega\hat{x} + i\hat{p}_x) \quad (31)$$

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}(\omega\hat{x} - i\hat{p}_x), \quad (32)$$

veremos na seção dos postulados que $\hat{p}_x^\dagger = \hat{p}_x \Rightarrow a^+ = (a^-)^\dagger$ e $a^- = (a^+)^\dagger$. Neste caso, diz-se que a^\pm são operadores mutuamente adjuntos. Escrevendo \hat{x} e \hat{p}_x em termos de a^- e a^+ , obtemos:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}(a^+ + a^-) \quad (33)$$

$$\hat{p}_x = i\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}(a^+ - a^-), \quad (34)$$

onde a^- é chamado de operador de abaixamento e a^+ é o operador de levantamento dos autovalores de energia do OHS, cuja terminologia será justificada posteriormente.

Em segunda quantização, quando quantizamos o campo eletromagnético surgem operadores análogos aos operadores escadas (a^\pm) do OHS, mas eles fazem partes do campo e não são combinação lineares de \hat{p}_x com \hat{x} . Em teorias de campos os operadores a^\pm são denominados de operadores de criação e aniquilação.

Os operadores a^- e a^+ não comutam e satisfazem a seguinte relação de comutação:

$$[a^-, a^+] \equiv a^- a^+ - a^+ a^- = 1. \quad (35)$$

Essa expressão é bastante evidente a partir do momento que substituírmos as equações (33) e (34) no comutador $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$ e usarmos o fato de que todo operador comuta com ele mesmo.

Substituindo (33) e (34) no hamiltoniano do OHS, obtemos:

$$H = \frac{1}{2}(\hat{p}_x^2 + \omega^2 \hat{x}^2)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{\hbar\omega}{2}(a^- a^+ + a^+ a^-) \\ &= \hbar\omega(a^+ a^- + \frac{1}{2}) \\ &= \hbar\omega a^+ a^- + E_0, \end{aligned} \quad (36)$$

onde a constante $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ é chamada de energia do ponto zero do oscilador associada ao estado fundamental (ou estado de menor energia). Estamos considerando o sistema de unidade em que $m = 1$. Lembre-se que em Mecânica clássica, a energia mínima do oscilador é zero. Um bom exercício, seria mostrar diretamente, escrevendo os operadores a^\pm em termos de x e do operador derivada $\frac{d}{dx}$. Lembrando-se que os operadores atuam sobre as funções de onda, o leitor deve calcular os produtos dos operadores, neste caso, atuando-os sobre as autofunções unidimensionais. Calcula-se separadamente, $a^+ a^- \psi_n(x)$ e $a^- a^+ \psi_n(x)$ depois faz-se a adição obtendo, então, o hamiltoniano acima. Fazendo a subtração das duas equações resultantes desta operação, obtém-se a relação de comutação canônica acima (35).

Considerando a seguinte propriedade de comutador $[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C$ e $[a^-, \text{comutação importantes}]$, a saber:

$$[a^-, a^+ a^-] = a^- , \quad (37)$$

$$[a^+, a^+ a^-] = -a^+ . \quad (38)$$

O operador hermitiano $a^+ a^-$ é muito frequentemente utilizado e por isso nós passaremos a representá-lo pela letra N :

$$N = a^+ a^- = N^\dagger. \quad (39)$$

N é chamado de operador de número porque seus autovalores são números inteiros, $n = 0, 1, 2, 3, \dots$. Reescrevendo em termos de N as duas últimas relações de comutação que apresentamos, teremos:

$$N a^- = a^- (N - 1), \quad (40)$$

$$N a^+ = a^+ (N + 1). \quad (41)$$

Neste estágio, devemos dizer que toda as vezes que tivermos equações desse tipo esses operadores a^\pm serão interpretados como sendo os operadores de levantamento (a^+) e abaixamento (a^-) dos autovalores de energia do hamiltoniano. De fato, é óbvio que o hamiltoniano está relacionado com N através da seguinte expressão:

$$H = \hbar\omega(N + \frac{1}{2}), \quad (42)$$

onde podemos dizer que N vale $\frac{1}{\hbar\omega}H - \frac{1}{2}$.

IV.1 O Problema de Autovalor de Energia na Representação de Número

De acordo com a interpretação física da Mecânica Quântica, os autovalores de energia são valores obtidos através de medidas experimentais de energia. Para comparar os resultados teóricos com os experimentais, precisamos resolver a equação de autovalor

$$H |n\rangle = E |n\rangle, \quad (43)$$

onde estamos usando a notação de Dirac, a qual denota o vetor bra $\langle n |$ de complexo conjugado do vetor ket $|n\rangle$. Na descrição Schrödinger temos a seguinte correspondência da função de onda com o produto escalar do bra-ket de x com n :

$$\langle x | n \rangle = \psi_n(x) \Rightarrow \langle n | x \rangle = \psi_n^*(x). \quad (44)$$

Devido à relação entre H e N , o problema de autovalor para H estará resolvido quando for solucionado o problema de autovalor para N , ou seja,

$$N |n\rangle = n |n\rangle. \quad (45)$$

Logo, os autovalores de energia para o OHS tornam-se

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right),$$

devido ao fato de $H |n\rangle = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) |n\rangle = E_n |n\rangle$. Desde que H e N são observáveis, os autokets $|n\rangle$ formam um conjunto completo ortonormal de bases vectoriais na representação de número.

Se operarmos ambos os lados da expressão $Na^- = a^-(N-1)$ com $|n\rangle$ obteremos o seguinte resultado

$$Na^- |n\rangle = (n-1)a^- |n\rangle \quad (46)$$

Como $Na^+ |n\rangle = a^+(N+1) |n\rangle$, temos:

$$Na^+ |n\rangle = (n+1)a^+ |n\rangle. \quad (47)$$

Isso mostra que se $|n\rangle$ é um autoket de N com autovalor n , então $a^- |n\rangle$ é um autoket de N com autovalor

A norma do vetor $a^+ |n\rangle$ é

$$\|a^+ |n\rangle\|^2 = \langle n | a^- a^+ |n\rangle = \langle n | (1 + a^+ a^-) |n\rangle = (1+n) \langle n | n \rangle. \quad (52)$$

Desde que $n \geq 0$ e $\langle n | n \rangle > 0$, percebemos que $a^+ |n\rangle$ nunca pode ser nulo.

$n-1$ e $a^+ |n\rangle$ é um autoket com autovalor $n+1$. A partir de $|n\rangle$ geramos mais dois autokets.

O processo pode ser repetido para ambos os lados de $Na^- = a^-(N-1)$ com o autoket $a^- |n\rangle$ e gerar o autoket $a^{-2} |n\rangle$ com autovalor $n-2$. Da mesma forma aplicando sobre $a^+ |n\rangle$ geraremos o autoket $a^{+2} |n\rangle$ com o autovalor $n+2$. Esse processo pode continuar indefinidamente gerando um conjunto de autokets e autovalores, a partir de um autoket conhecido:

$$\begin{aligned} N |n\rangle &= n |n\rangle \\ Na^- |n\rangle &= Na^{-2} |n\rangle = (n-2)a^{-2} |n\rangle \\ &\vdots \end{aligned} \quad (48)$$

$$\begin{aligned} Na^+ |n\rangle &= (n+1)a^+ |n\rangle \\ Na^{+2} &= (n+2)a^{+2} |n\rangle \\ &\vdots \end{aligned} \quad (49)$$

Desde que o operador N seja hermitiano, o autovalor n precisa ser real e por isso a norma de qualquer vetor precisa ser maior ou igual a zero. Se $|n\rangle$ é um autoket, então $\langle n | n \rangle > 0$. Vamos fazer o produto escalar de $N |n\rangle$ com $\langle n |$:

$$\langle n | N |n\rangle = \langle n | a^+ a^- |n\rangle = n \langle n | n \rangle. \quad (50)$$

Mas esta é a norma do vetor $a^- |n\rangle$ que tem de ser maior ou igual a zero. Desde que $\langle n | n \rangle > 0$ e $\langle n | a^+ a^- |n\rangle \geq 0$, concluímos que $n \geq 0$. Portanto, os autovalores de N são reais e não-negativos. Se $n = 0$, então:

$$a^- |0\rangle = 0. \quad (51)$$

Substituindo o operador a^- em termos dos operadores x e $p_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$, esta condição de aniquilação torna-se uma equação diferencial de primeira ordem, cuja solução nos fornece o ket $|0\rangle$ e, por sua vez, leva à função de onda do estado fundamental para o oscilador quântico unidimensional, $u_0(x) = \langle x | 0 \rangle$.

Se n não é um inteiro a sequência dos autovalores eventualmente se tornarão negativos, devido a (48), e as normas dos vetores associados serão negativas, o que não pode acontecer. A única maneira de impedir isso é fazer com que n seja um inteiro positivo ou zero.

Dessa forma, os autovalores de N são inteiros positivos ou zero, como havíamos proposto inicialmente.

Os autokets gerados pela aplicação sucessiva de a^- e a^+ são normalizados da seguinte forma: desde que $a^- |n\rangle$ é um autoket de N com autovalor $n-1$, $a^- |n\rangle$ pode diferir de $|n-1\rangle$ por uma constante. Portanto, podemos escrever:

$$a^- |n\rangle = c_n |n-1\rangle \quad \text{ou} \quad (a^- |n\rangle)^\dagger = \langle n | a^+ = \langle n-1 | c_n^*. \quad (53)$$

O valor esperado de $a^+ a^-$ em $|n\rangle$ é dado por

$$\begin{aligned} \langle n | a^+ a^- |n\rangle &= n \langle n | n \rangle = |c_n|^2 \langle n-1 | n-1 \rangle \\ &\text{ou} \\ \langle n | a^+ a^- |n\rangle &= \langle n | a^+ c_n |n-1\rangle = \langle n-1 | c_n^* c_n |n-1\rangle \\ &= |c_n|^2 \langle n-1 | n-1 \rangle. \end{aligned} \quad (54)$$

Se $\langle n-1 | n-1 \rangle = \langle n | n \rangle = 1$, devido ao fato de os autovetores serem ortonormais, então o valor de $|c_n|$ será \sqrt{n} . Portanto a equação (53) poderá ser reescrita como segue:

$$a^- |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle. \quad (55)$$

Restringimos n para ser maior que zero, já que $|-1\rangle$ não tem sentido.

Analogamente, podemos escrever

$$a^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle. \quad (56)$$

Se $\langle 0 | 0 \rangle$ é normalizado, então todos os outros também o serão.

Podemos selecionar os quatro últimos resultados importantes:

$$\begin{aligned} N |n\rangle &= n |n\rangle, \\ a^- |0\rangle &= 0, \\ a^- |n\rangle &= \sqrt{n} |n-1\rangle, \\ a^+ |n\rangle &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle. \end{aligned} \quad (57)$$

Um resultado extremamente importante é obtido ao aplicarmos o operador a^+ sobre o ket do autoestado fundamental ($|0\rangle$) n vezes. Disto construiremos o autoket $|n\rangle$ associado ao n -ésimo estado excitado do OHS dado por:

$$|n\rangle = c_n (a^+)^n |0\rangle = \frac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle. \quad (58)$$

No cálculo da constante de normalização do ket do n -ésimo estado quântico sugerimos usar a seguinte expressão na álgebra dos operadores a^\pm :

$$|n\rangle = \frac{c_n}{c_{n-1}} c_{n-1} (a^+)^{n-1} |0\rangle = \frac{c_n}{c_{n-1}} a^+ |n-1\rangle.$$

Substituindo esta equação na condição de normalização, temos:

$$1 = \langle n | n \rangle = \langle n-1 | a^- \frac{c_n}{c_{n-1}} \frac{c_n}{c_{n-1}} a^+ |n-1\rangle = \left| \frac{c_n}{c_{n-1}} \right|^2 \langle n-1 | a^- a^+ |n-1\rangle;$$

agora, usando a equação (36) e substituindo o operador $a^+ a^-$ em termos do hamiltoniano, temos:

$$1 = \frac{1}{\hbar\omega} \left| \frac{c_n}{c_{n-1}} \right|^2 \langle n-1 | \left(H + \frac{\hbar\omega}{2} \right) |n-1\rangle = n \left| \frac{c_n}{c_{n-1}} \right|^2.$$

Resultando na seguinte iteração da relação de recorrência:

$$|c_n|^2 = \frac{1}{n} |c_{n-1}|^2 = \frac{1}{n} \frac{1}{n-1} |c_{n-2}|^2 = \frac{1}{n} \frac{1}{n-1} \frac{1}{n-2} |c_{n-3}|^2 = \dots = \frac{1}{n!} |c_0|^2.$$

Escolhendo $c_0 = 1$, obtemos a constante de normalização:

$$e_n = \sqrt{\frac{1}{n!}}.$$

Desde que a norma desses autovetores ($|n\rangle$) é finita, eles formam um conjunto ortonormal completo de vetor para o espaço de Hilbert, o que nos permite escrever a seguinte relação de completudeza: $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$, onde n varia de 1 até o infinito. Portanto, qualquer vetor desse espaço pode ser escrito como uma combinação linear dos outros vetores.

Aqui é importante ressaltar a elegância do método de fatorização, pois ele permite encontrarmos as autofunções e os do OHS sem a necessidade de resolver a equação de Schrödinger, através dos métodos de solução de equações diferenciais de segunda ordem.

V. Aplicação da equação de Schrödinger via equações diferenciais ordinárias de segunda ordem

Agora, faremos duas aplicações da equação de Schrödinger independente do tempo em uma dimensão. A primeira aplicação é para uma partícula de massa de m dentro de uma caixa com duas paredes impenetráveis (paredes no infinito) e obrigada a mover-se sobre um fio muito fino sem atrito e fixo entre as paredes [3]. Este exemplo simples nos dá uma profunda percepção da importância das condições de contorno. Veremos que as condições de contorno nos fornecem a quantização da energia. O potencial (A energia potencial), V , torna-se:

$$V = \begin{cases} 0, & \text{para } 0 < x < L; \\ \infty, & \text{para } x \geq L \text{ ou } x \leq 0. \end{cases} \quad (59)$$

Na região fora da caixa o hamiltoniano é infinito, logo $\psi(x)=0$. Considerando a Equação de Schrödinger independente do tempo, $\psi'' + \beta^2\psi = 0$ na região dentro da

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} + (\lambda - \rho^2)u = 0, \quad \rho = \alpha x, \quad \alpha = (m\omega_x/\hbar)^{1/2}, \quad E = \frac{1}{2}\lambda\hbar\omega_x. \quad (65)$$

A solução mais geral tem a seguinte forma:

$$u(\rho) = e^{-\frac{1}{2}\rho^2} v(\rho). \quad (66)$$

Substituindo na equação (65), teremos

$$v'' - 2\rho v' + (\lambda - 1)v = 0, \quad (67)$$

onde $v' = \frac{dv}{dx}$ e $v'' = \frac{d^2v}{dx^2}$. A solução desta Equação Diferencial Ordinária de 2ª ordem é finita somente quando

caixa $0 < x < L$, tem-se a seguinte solução:

$$\psi(x) = A \operatorname{sen} \beta x + B \operatorname{cos} \beta x, \quad \beta^2 = \frac{8\pi^2 m E}{h^2}, \quad (60)$$

onde A e B são constantes. Aplicando as condições de contorno, em que $\psi(x) = 0$ para $V \rightarrow \infty$ e desde que $\psi(x)$ é uma função contínua, $\psi(0) = 0 = \psi(L)$, vemos que $\psi(0) = 0 \Rightarrow B = 0$ e $\psi(L) = 0 \Rightarrow \beta = \frac{n\pi}{L}$, logo obtemos:

$$\psi(x) = A \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi x}{L} \right), \quad (61)$$

o que nos dá os autovalores de energia discreto para uma partícula dentro de uma caixa unidimensional de lado L ,

$$E_n = \frac{h^2}{8mL^2} n^2, \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (62)$$

Esta equação evidencia a natureza quântica da energia da partícula dentro da caixa. Os níveis de energia entre os n -ésimo e o $(n+1)$ -ésimo níveis não são permitidos para a partícula. Por outro lado, classicamente a partícula pode ter qualquer energia.

A segunda aplicação é para o Oscilador Harmônico Simples (OHS) [3]. Conforme vimos na seção anterior, os operadores de posição e de momento linear, em uma dimensão, não comutam, ou seja, $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$, onde $\hat{x} = x$ e $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$. O OHS é descrito pelo seguinte hamiltoniano

$$H = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + V(\hat{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2. \quad (63)$$

Neste caso, a equação de Schrödinger independente do tempo torna-se:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2 \right\} u(x) = E u(x). \quad (64)$$

Esta equação pode ser escrita em uma forma mais simples

tivermos $\lambda = (2n + 1)$, ($n = 0, 1, 2, \dots$); usando a última das equações (65), obtemos:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_x, \quad (68)$$

os autovalores de energia do oscilador harmônico simples. Note que a energia foi quantizada, isto é, a energia agora assume somente alguns valores bem definidos. O

número quântico ($n = 1, 2, \dots$) rotula cada nível de energia. Por outro lado, sabemos que os polinômios de *Hermite* satisfazem a seguinte equação:

$$H_n''(\rho) - 2\rho H_n'(\rho) + 2nH_n(\rho) = 0. \quad (69)$$

Comparando (69) com (67), vemos que $v(\rho) = H_n(\rho)$. Logo, as autofunções de energia do oscilador harmônico unidimensional são dadas por:

$$u_n(x) = N_n e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} H_n(\alpha x), \quad (n = 0, 1, 2, \dots), \quad (70)$$

as quais descrevem exatamente os n -ésimos estados excitados do oscilador harmônico simples. A autofunção do estado fundamental é obtido fazendo $n = 0$. Neste caso, o polinômio de Hermite é igual a unidade e a função de onda do estado fundamental torna-se uma gaussiana centrada na origem.

$$u_0(x, t) = N_0 e^{-\frac{1}{2}(\alpha^2 x^2 + i\omega_x t)}, \quad (71)$$

onde N_0 é a constante de normalização. O autovetor de energia associado ao estado fundamental é dado por: $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_x$. Esta é a energia de ponto zero. Lembre-se que classicamente a energia mínima do oscilador harmônico simples é zero e, além desse valor, a energia pode assumir um contínuo de valores possíveis.

VI. Os postulados da Mecânica Quântica

O postulado fundamental da Mecânica Quântica está associado a representação do estado quântico. Não existe uma sequência privilegiada para enunciar os postulados da Mecânica Quântica. Apresentaremos aqui a representação de estados quânticos e a representação de variáveis dinâmicas, valores esperados e observáveis, percorrendo sobre o seu significado em Mecânica Quântica.

a) Representação de estados.

Uma explanação natural foi encontrada para a existência dos estados estacionários, originalmente postulados de forma *ad hoc* por Niels Bohr.

Postulado 1

O estado quântico de um sistema físico em três dimensões é descrito ou representado por uma função de onda $\psi(\vec{r}, t)$. Ela é solução da equação de Schrödinger dependente do tempo. Esta função contém todas as informações sobre o estado do sistema em qualquer instante de tempo. Além do mais, uma função de onda

(ψ) multiplicada por uma constante (real ou complexa, c), isto é, $c\psi$, descrevem o mesmo estado quântico.

Frequentemente se fala do "estado ψ ", significando o conceito físico (o estado) descrito pela função matemática $\psi(\vec{r}, t)$. Entretanto, a função de onda não é diretamente mensurável, pois ela é uma função complexa.

O princípio da superposição estabelece que, experimentalmente, se ψ_1 e ψ_2 são funções de onda descrevendo dois estados quaisquer de um dado sistema físico, então a combinação linear ($c_1\psi_1 + c_2\psi_2$) das duas funções também representará um outro estado quântico do sistema. Este é um princípio fundamental em Mecânica Quântica. É a possibilidade da superposição que torna o fenômeno da interferência possível.

Um pacote de onda de uma partícula livre unidimensional é dado pela seguinte superposição:

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} a(k) e^{i(kx - \omega t)} dk, \quad (72)$$

onde $a(k)$ é a amplitude da componente harmônica com constante de propagação k ($\lambda = \frac{2\pi}{k}$) e frequência angular ω .

Este pacote é a superposição das ondas de de Broglie estados das partículas livres, as quais podem ter vários momentos lineares.

O princípio da superposição tem profundo significado matemático. Ele é uma característica fundamental dos vetores representando pontos no espaço. Assim, é possível (e útil) pensar nas funções de onda como vetores de alguma espécie.

Os vetores ordinários requerem apenas três números reais para determiná-los completamente, $\vec{v} = (v_x\vec{i} + v_y\vec{j} + v_z\vec{k})$ no espaço tridimensional. Porém, cada autofunção $\psi(\vec{x})$ requer um conjunto infinito de números complexos para a sua especificação, os valores de ψ em todos os pontos do espaço de configurações, ou seja, ψ é uma base de funções de um espaço vetorial de dimensão infinita.

Numa visão "geométrica" da função de onda, as grandezas da autofunção $\psi(\vec{x})$ para vários vetores \vec{x} são como diferentes "componentes" da função vetorial ψ . Aqui a variável contínua \vec{x} serve como um "rótulo" distinguindo as diferentes componentes de ψ , de maneira equivalente ao índice i das componentes v_i ($i = x, y, z$) de um vetor ordinário \vec{v} . Assim, a norma

$$\int |\psi(\vec{x})|^2 d\tau \equiv \int \int \int |\psi(\vec{x})|^2 dx dy dz \quad (73)$$

é o equivalente da norma de um vetor em três dimensões, a saber,

$$\|\vec{v}\| = \sum_{i=1}^n v_i^2 \quad (74)$$

e pode ser visto como o "quadrado do comprimento" da função vetorial.

Desde que $\psi(x)$ é uma função complexa, o quadrado absoluto $|\psi(\vec{x})|^2$ tem sido usado para obter um "comprimento" real e, é claro, é uma "soma" (integração) sobre $\vec{x} = (x, y, z)$.

Agora definiremos o produto escalar entre duas funções complexas. A integral tripla

$$(\phi(\vec{x}), \psi(\vec{x})) = \int \phi^*(\vec{x})\psi(\vec{x})d\tau, \quad (75)$$

onde τ é o elemento infinitesimal de volume, é definida como sendo o produto escalar de ϕ e ψ , analogamente ao produto escalar $\vec{u} \cdot \vec{v} = \sum_{i=1}^3 u_i v_i$ para vetores ordinários em três dimensões. O produto escalar entre ϕ e ψ satisfaz as seguintes propriedades:

- (i) $(\phi, \psi) = (\psi, \phi)^*$
- (ii) $(\phi, c\psi) = c(\phi, \psi)$
- (iii) $(c\phi, \psi) = c^*(\phi, \psi)$
- (iv) $(\psi, \psi) \geq 0$ (norma de ψ), com a igualdade se mantendo se, e só se, $\psi \equiv 0$. O espaço vetorial gerado por ψ , munido pelo produto escalar acima, de modo que sua norma seja finita é denominado de espaço de Hilbert.

b) Representação de variáveis dinâmicas: valores esperados e observáveis.

Postulado 2

Cada variável dinâmica $A(\vec{x}; \vec{p})$ é representada na Mecânica Quântica por um operador linear⁴:

$$A_{op} = A = A(\vec{x}_{op}; \vec{p}_{op}) \equiv A(\vec{x}, -i\hbar\vec{\nabla}). \quad (76)$$

Gostariamos de enfatizar que os operadores atuam na função de onda do sistema, convertendo-a em outra função de onda, $\phi = A\psi$. O operador é linear quando ocorrer:

$$A(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1(A\psi_1) + c_2(A\psi_2). \quad (77)$$

Os operadores em Mecânica Quântica não são, em geral, comutativos:

$$\mathbf{AB} \neq \mathbf{BA}. \quad (78)$$

Para o leitor que iniciou a leitura por esta seção devemos dizer que a diferença $\mathbf{AB} - \mathbf{BA}$ é chamada de comutador de \mathbf{A} e \mathbf{B} , nesta ordem. O comutador é representado pela notação de colchetes:

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{AB} - \mathbf{BA}. \quad (79)$$

As relações de comutação das variáveis de posição e momento linear podem ser facilmente deduzidas. Em três dimensões, se x_i e $p_j \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j}$ são, respectivamente, os operadores representando a i -ésima e a j -ésima componentes da posição e do momento de uma partícula, temos que:

$$x_i p_j \psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \psi. \quad (80)$$

Com isso,

$$x_i p_j - p_j x_i = i\hbar \delta_{ij} \quad (81)$$

ou

$$[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}, \quad (82)$$

onde

$$\delta_{ij} = 1, \text{ se } i = j; \text{ e } \delta_{ij} = 0, \text{ se } i \neq j, \quad (83)$$

é chamado delta de Kronecker. É trivial verificar que:

$$[x_i, x_j] = 0 \text{ e } [p_i, p_j] = 0. \quad (84)$$

Antes de apresentarmos o postulado 3, devemos dar a definição de um operador adjunto, o qual é representado como \mathbf{A}^\dagger , o qual como foi dito na segunda seção ele é de crucial interesse em MQ. Usando as propriedades do produto escalar temos:

$$\begin{aligned} (\phi, A\psi) &= (A\psi, \phi)^* \\ &= \int (A\phi)^* \psi d\tau \\ &= \left(\int \psi^* A^\dagger \phi d\tau \right)^* \\ &= \int (A^\dagger \phi)^* \psi d\tau \\ &= (A^\dagger \phi, \psi), \end{aligned} \quad (85)$$

onde A^\dagger é o adjunto do operador A . Logo, após uma integração por partes obtém-se: $\left(\frac{d}{dx}\right)^\dagger = -\frac{d}{dx}$.

Postulado 3

Quando um grande número de medidas de uma variável dinâmica é feito num sistema, o qual é preparado para estar num estado quântico ψ antes de cada

⁴Distinguir o momento \vec{p} do operador momento \vec{p}_{op} , como descrito acima ($\vec{p}_{op} = -i\hbar\vec{\nabla}$).

medida, os resultados de cada medida individual serão em geral diferentes, mas a média (valor esperado) de todos os valores observados é dada por:

$$\langle A \rangle_\psi = \int \psi^* A \psi d\tau \equiv (\psi, A\psi). \quad (86)$$

A grandeza $\langle A \rangle_\psi$ é chamada de valor esperado da variável dinâmica A no estado quântico ψ . Note que, dentro da integral, A é um operador; fora, é a variável dinâmica.

Fazendo um estudo do caso particular em que A é a variável de posição de quaisquer das partículas, torna-se evidente que a definição de valor esperado implica na

$$\langle A \rangle_\psi = (\psi, A\psi) = \int \psi^* A \psi d\tau = \langle A \rangle^* = \left(\int \psi^* A \psi d\tau \right)^* = \int (A\psi)^* \psi d\tau = (A\psi, \psi), \quad (88)$$

mas o adjunto do operador $A(A^\dagger)$ é dado por:

$$(\psi, A\psi) = (A^\dagger \psi, \psi). \quad (89)$$

Comparando as duas últimas equações acima, obtemos:

$$A^\dagger = A, \quad (90)$$

o qual é denominado de operador auto-adjunto ou hermitiano. Todo o operador hermitiano possui autovalor real e suas autofunções são ortogonais. Logo, se $A\psi = a\psi$ e $A\psi' = a'\psi'$, então o produto escalar entre ψ e ψ' é nulo, isto é, $(\psi, \psi') = 0$.

VII. Relações de Incerteza de Heisenberg

Como é bem conhecido, a física clássica descreve completamente as partículas macroscópicas, cujas trajetórias são exatamente determinadas.

Quando investigamos o comportamento dos constituintes internos da matéria, não podemos fazer qualquer observação sem alterar os seus respectivos estados quânticos. Pois, mesmo quando usamos luz para observá-los ocorrerá a interação dos fótons com as partículas subatômicas. Diante desse problema da interação experimentada pelo sistema, Heisenberg enunciou um princípio segundo o qual não podemos definir simultaneamente a posição e a velocidade de um elétron (ou qualquer partícula subatômica). Quando observamos um sistema subatômico, para realizarmos uma medida de uma certa quantidade física verificamos uma grande incerteza na medida.

A Mecânica Quântica, que descreve as partículas subatômicas, está associada a uma descrição de fatos observáveis. Ela nos fornece as propriedades observáveis.

Há um limite bem definido para o conhecimento do

movimento de uma partícula subatômica, como foi mostrado por Heisenberg em 1927, através do seu Princípio de Incerteza.

$$\int d^3x_1 \int d^3x_2 \dots \int d^3x_n |\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n)|^2 = 1 \quad (87)$$

onde d^3x_i é o elemento diferencial de volume da i -ésima partícula.

As quantidades físicas mensuráveis em Mecânica Quântica são os observáveis, os quais são representados pelos operadores lineares e hermitianos, que possuem valor esperado real, pois eles irão representar as medidas das variáveis dinâmicas do sistema, ou seja:

movimento de uma partícula subatômica, como foi mostrado por Heisenberg em 1927, através do seu Princípio de Incerteza.

O Princípio de Incerteza, mostrado por Heisenberg em 1927, nos assegura que é possível medir a posição ou a velocidade, mas nunca ambos simultaneamente. A medida da posição de uma partícula subatômica perturba a medida de sua velocidade e vice-versa. Considerando que a incerteza na posição seja Δx , e a incerteza do momento linear seja Δp_x , a relação de incerteza de Heisenberg é dada pela seguinte inequação:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{h}{4\pi} = \frac{\hbar}{2}. \quad (91)$$

onde h é a constante de Planck. A incerteza mínima é obtida somente para pacotes de onda gaussianos. Por exemplo, para o oscilador quântico unidimensional no estado fundamental obtém-se $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{4\pi}$.

Por outro lado, a relação de incerteza na energia ΔE , e de incerteza do tempo Δt , é dada pela seguinte inequação:

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{h}{4\pi} = \frac{\hbar}{2}. \quad (92)$$

O princípio de incerteza de Heisenberg pode ser muito bem ilustrado considerando o espalhamento de um fóton por um elétron. Lembra-se que segundo de Broglie, a relação entre o comprimento de onda (λ) e o momento linear (p) de uma partícula subatômica é dado por $\lambda = \frac{h}{p}$. Considere primeiro, um fóton incidente com momento linear muito pequeno, o que implica num comprimento de onda muito grande. Neste caso, o elétron não será perturbado e não saberemos qual sua posição. Por outro lado, quando o fóton incidente tiver um momento linear muito grande, o seu comprimento de onda será muito pequeno. Logo, neste caso o elétron será localizado. Porém, devido à energia muito alta do fóton ele será perturbado e sairá com uma velocidade não mensurável.

Não podemos deixar de abordar a dualidade onda-partícula da luz e da matéria. Aqui, consideraremos uma análise sucinta desta questão. Sabemos que os conceitos de ondas clássicas e partículas clássicas não descrevem convenientemente ao mesmo tempo ambos os fenômenos. Existem situações em que a teoria clássica de partículas e a teoria clássica de ondas fornecem os mesmos resultados. Por exemplo, se o comprimento de onda é muito menor do que o objeto ou fenda, a teoria de partícula pode ser usada bem como a teoria de onda, para descrever a propagação de ondas, pois os efeitos de difração e interferência são muito pequenos para serem observados.

Agora considere uma experiência em que a luz ilumina um anteparo com duas fendas. A medida simultânea dos aspectos de onda e partícula de luz, é impossível. Quando colocamos detectores junto das fendas para medir as propriedades de partícula da luz, as propriedades ondulatórias de interferência não podem ser observadas. Neste caso, devemos realizar a experiência sem detectores próximos das fendas. Não podemos portanto dizer se um fóton passou por uma ou outra fenda. Este resultado é conhecido como "o princípio da complementariedade de Bohr" - os aspectos de partícula e de onda complementam um ao outro. Ambos são necessários, mas não podem ser observados ao mesmo tempo. A observação de um ou de outro aspecto depende do arranjo experimental.

Conclusão

Neste trabalho, foi feita uma introdução à Mecânica Quântica não-relativística. Mostramos uma idéia intuitiva da construção da equação de Schrödinger que

governa a dinâmica de sistemas subatômicos, sob energia de alguns elétron-volts. Consideramos os vários aspectos históricos da elaboração da teoria dos quanta ao princípio de incerteza de Heisenberg, analisamos também a dualidade onda-partícula.

Abordamos a Mecânica Quântica indicando sua importância no contexto de ciências e tecnologia, dando ênfase ao seu caráter multidisciplinar. Foram feitas algumas aplicações conhecidas, porém com uma abordagem bastante didática, analisando também os postulados da Mecânica Quântica.

Destacamos a importância do método de fatorização em Mecânica Quântica, como uma técnica algébrica que nos fornece as autofunções e os autovalores de energia do oscilador harmônico unidimensional. Este método transforma o problema de dinâmica associado a equação de Schrödinger em um problema bastante simples, em que trabalhamos somente com a cinemática dos operadores de abaixamento e levantamento dos níveis de energia e, por sua vez, geramos as n -ésimas funções de onda dos estados excitados. Utilizando o método de fatorização resolvemos somente uma equação diferencial de primeira ordem, a qual nos fornece a autofunção do estado fundamental.

Existem também algumas generalizações para outros sistemas quânticos. Neste caso, trabalhamos com as álgebras graduadas de Lie, como por exemplo, as álgebras de supersimetria [4, 6, 7] e a super-álgebra de Wigner-Heisenberg [8] em Mecânica Quântica não-relativística. Porém estas generalizações estão fora do escopo deste trabalho. Para os leitores interessados em tais abordagens veja as referências nos trabalhos citados aqui. A referência [8] traz também a conexão entre as técnicas algébricas de Wigner-Heisenberg e de supersimetria em Mecânica Quântica.

Para os leitores interessados em estudar o método de fatorização em termos dos operadores de abaixamento e levantamento dos níveis de energia do oscilador harmônico simples, sugerimos a leitura das referências [2,3,8]. Recentemente, foi mostrado um método algébrico [9] para sistemas quânticos tridimensionais, inclusive para o oscilador, o qual foi considerado como sendo o método de fatorização em Mecânica Quântica. No entanto, vale a pena salientar que no referido trabalho os operadores considerados como sendo de abaixamento e levantamento não geram os autoestados associados aos números quânticos principais que rotulam os níveis de energia. Esse problema pode ser explicado via a super-álgebra de Wigner-Heisenberg. De

fato, na referência [8], foi mostrado como se construir os operadores de abaixamento e levantamento para os níveis de energia de sistemas quânticos tridimensionais.

Finalizamos este trabalho destacando a importância dos operadores de levantamento e abaixamento (a^{\pm}) na construção dos estados coerentes em Mecânica Quântica [11]. Os estados coerentes para o OHS são análogos as autofunções que diagonalizam o operador de aniquilação de fótons associados a um único modo do campo eletromagnético, sendo ingredientes básicos na Óptica Quântica.

Devemos dizer também que na análise de equações de estabilidade de soluções solitônicas em (1 + 1) dimensões (uma dimensão espacial e uma dimensão temporal) aparece uma equação diferencial de segunda ordem tipo-equação de Schrödinger tanto na abordagem de um único campo escalar [11] como em sistemas relativísticos envolvendo dois ou mais campos escalares acoplados [12].

Agradecimentos

O autor agradece aos Departamentos de Física dos Campi I e II, e ao Departamento de Ciências Exatas e da Natureza do Campus V da Universidade Federal da Paraíba, pelo apoio. Agradece também ao *Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq)* e a PRPG/UFPB pelo auxílio financeiro parcial, através de bolsas de estudo de seus alunos de iniciação científica do PIBIC/UFPB/CNPq. Em especial aos bolsistas João Noilton da Costa, Israel Fonseca Neto, Damásio Fernandes Júnior, Sheyla Marques Baptistas, Leopoldo Canú, Sergio Ribeiro Leite, Apoena Augusto Feitosa Gurgel, Antônio Inácio da Silva, ao mestrando em física Silvanio Bezerra de Oliveira e aos alunos dos mini-cursos ministrados no CCT/UFPB e aos Professores Jambunatha Jayarama e Arvind Narayan Vaidya pelas inúmeras discussões sobre física clássica e quântica.

(a) rafael@dfjp.ufpb.br ou cendfi76@vm.npd.ufpb.br

References

- [1] R. de Lima Rodrigues, *Notas de aula do mini-curso sobre Métodos Alternativos em Mecânica Clássica: Formalismo Lagrangeano e Hamiltoniano*, ministrado no CCT-UFPB, Campina Grande, janeiro/fevereiro/1996; Keyth R. Symon - *Mecânica*, Tradução [de] Gilson Brand Batista, Rio de Janeiro (1982); Coleção Schaum Murray R. Spiegel, *MECÂNICA RACIONAL*, Editora McGraw-Hill do Brasil Ltda - São Paulo (1976); Herbert Goldstein - *Mecânica Clássica* - versão em Espanhol- Coleccion Ciencia y Tecnica-angular, Madrid (1979); J. W. Leech - *Mecânica Analítica* - Tradução [de] Carlos Campos de Oliveira, EDUSP, Rio de Janeiro (1971); L. Landau e E. Lifchitz - *MECÂNICA*, (trad.: José Severo de Camargo Pereira), Hemus - Liv. Editora Ltda, São Paulo (1970).
- [2] Erwin Schrödinger, *A Method of Determining Quantum Mechanical Eigenvalues and Eigenfunctions*, Proceedings of the Royal Irish Academy, **Vol. XLVI, Sect. A**, 590, (1946); I. Infeld e T. E. Hell, *Rev. Mod. Phys.*, **23**, 21, (1950) (Este artigo aborda várias aplicações do método de fatorização em Mecânica Quântica.) Erwin Schrödinger, *Collected Papers on Wave Mechanics*, Second English Edition, Chelsea Publishing Company New York, New York, 1978; Stephen Gasiorowicz, *Quantum Physics*, John Wiley & Sons, New York (1974) (Há uma versão deste livro traduzida para o português, a qual pode ser encontrada nas bibliotecas de física.); R. L. Liboff, *Introductory Quantum Mechanics*, Addison Wesley, 2nd edition, (1992) (Este livro contém exemplos de alguns sistemas quânticos recentes.); J. Leite Lopes, *A Estrutura Quântica da Matéria*, editora da UFRJ, 2^a edição, (1993) (Este livro é para estudantes dos cursos de graduação e pós-graduação em física, química, e engenharias.); David K. Ferry, *Quantum Mechanics - An Introduction for Device Physicists and Electrical Engineers*, IOP Publishing Ltda, (1995).
- [3] P. M. Mathews e K. Venkatesan, *A Text Book of Quantum Mechanics*, Tata McGraw. Hill, New Delhi, (1987). (Este livro tem várias vantagens em ser adquirido: abrange a Mecânica Quântica não-relativística e relativística, é muito didático, inclusive com um inglês fácil de ler; é um livro texto de baixo custo.); J. J. Sakurai, *Advanced Quantum Theory*, Addison-Wesley Publishing Company, London, Ninth printing, (1982).
- [4] E. Witten, *Nucl. Phys.* **B185**, 513, (1981); C. V. Sukumar, *J. Phys. A: Math. Gen.* **18**, 2917, (1985); R. Dutt, A. Khare and U. P. Sukhatme, *Am. J. Phys.* **56**, 163, (1988); N. A. Alves e E. Drigo Filho, *The factorisation method and supersymmetry*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **21**, 3212, (1988); R. de Lima Rodrigues e Arvind Narayan Vaidya, *SUPERSIMETRIA: DA MECÂNICA CLÁSSICA À MECÂNICA QUÂNTICA*, *Rev. Bras. de Ensino de Física*, no prelo.
- [5] R. de Lima Rodrigues, *Simetrias Dinâmicas de alguns Sistemas Quânticos*, tese de doutorado defendida no Instituto de Física da Universidade Federal do Rio de Janeiro, 16 de novembro de 1992, sob orientação do Prof. Dr. Arvind Narayan Vaidya.
- [6] R. de Lima Rodrigues, *New potential scalar models via the kink of the $\lambda\phi^4$ theory*, *Mod. Phys. Lett.* **10A**, 1309, (1995).
- [7] M. N. Nieto, *Phys. Lett.* **B145**, 208, (1984); W.-Y. Keung, U. P. Sukhatme, Q. Wang and T. D. Imbo, *J. Phys. A: Math. Gen.* **22**, L987, (1989); A. Khare and

- U. P. Sukhatme, *J. Phys. A: Math. Gen.* and P. K. Bera, *J. Phys. A: Math. Gen.* **25**, 4073, (1992).
- [8] R. de Lima Rodrigues, *Alguns estudos sobre a Mecânica Quântica supersimétrica e a álgebra de Wigner-Heisenberg para sistemas quânticos em conexões com osciladores*, tese de mestrado em física defendida no departamento de Física, UFPB, Campus I, João Pessoa-PB, 29 de agosto de 1988, sob orientação do Prof. Dr. Jambunatha Jayaraman. (Parte desta tese está contida nos dois trabalhos a seguir.); J. Jayaraman and R. Lima de Rodrigues, *J. Phys. A: Math. Gen.* **23**, 3123, (1992); J. Jayaraman and R. Lima de Rodrigues, *Mod. Phys. Lett.* **A9**, 1047, (1994).
- [9] M. Goto, *O método dos operadores em sistemas quânticos tridimensionais*, *Rev. Bras. de Ensino de Física*, **15**, (1993); M. Goto, *O método dos operadores na equação de Legendre*, *Rev. Bras. de Ensino de Física*, **16**, 21, (1994).
- [10] R. de Lima Rodrigues, Damásio Fernandes Júnior, Shelyla Marques Batista e Arvind Narayan Vaidya, *Os Estados Coerentes em Mecânica Quântica*, preprint DF/CCT/04/96, a ser submetido à publicação na *Rev. Bras. de Ens. de Física*.
- [11] R. Lima Rodrigues, New potential scalar models via the kink of the $\lambda\phi^4$ theory, *Mod. Phys. Lett.*, **10A**, 1309, (1995).
- [12] R. de Lima Rodrigues, Pedro Barbosa da Silva Filho e A. N. Vaidya, Linear classical stability from three coupled real scalar fields, *Brazilian National Meeting on Particles and Fields*, página 447, (1995).