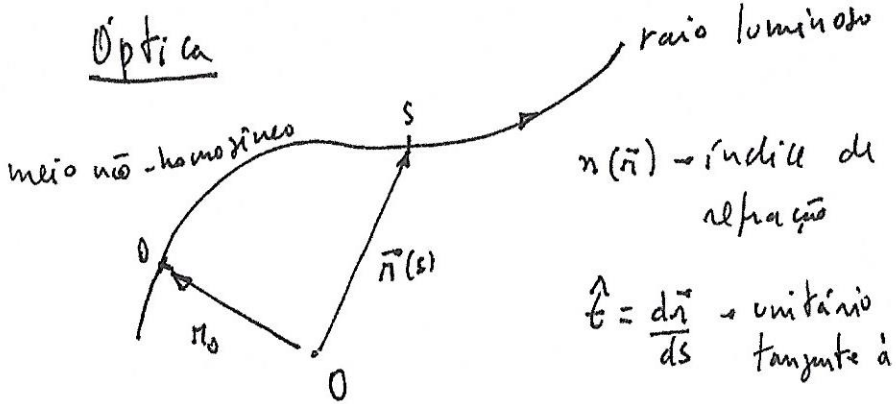
Analogia de Hamilton

Óptica



$n(\vec{r})$ → índice de refração

$\hat{t} = \dfrac{d\vec{r}}{ds}$ → unitário tangente à trajetória

$$dn = \vec{\nabla} n \cdot \underbrace{d\vec{r}}_{\hat{t}\,ds} = (\hat{t}\cdot\vec{\nabla} n)\,ds \Longrightarrow \boxed{\frac{dn}{ds} = \hat{t}\cdot\vec{\nabla} n}$$

$$n\hat{t}\cdot n\hat{t} = n^2 \Longrightarrow 2n\hat{t}\cdot d(n\hat{t}) = 2n\,dn$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{\hat{t}\cdot\frac{d}{ds}\left(n\,\frac{d\vec{r}}{ds}\right) = \frac{dn}{ds}}$$

$$\boxed{\vec{\nabla} n = \frac{d}{ds}\left(n\,\frac{d\vec{r}}{ds}\right)}$$ eq. dos raios

Mecânica

$$\begin{cases} \dfrac{d\vec{p}}{dt} = -\vec{\nabla} V(\vec{r}) & \text{campo conservativo} \\[2mm] |\vec{p}| = p = \sqrt{2m(E-V)} \end{cases}$$

$$\vec{\nabla} p = \overbrace{\frac{\partial p}{\partial x}}^{\frac{\partial p}{\partial V}\frac{\partial V}{\partial x}}\hat{i} + \overbrace{\frac{\partial p}{\partial y}}^{\frac{\partial p}{\partial V}\frac{\partial V}{\partial y}}\hat{j} + \overbrace{\frac{\partial p}{\partial z}}^{\frac{\partial p}{\partial V}\frac{\partial V}{\partial z}}\hat{k} = \frac{\partial p}{\partial V}\underbrace{\left(\frac{\partial V}{\partial x}\hat{i} + \frac{\partial V}{\partial y}\hat{j} + \frac{\partial V}{\partial z}\hat{k}\right)}_{\vec{\nabla} V}$$

$$\frac{\partial p}{\partial V} = -m\left[2m(E-V)\right]^{-1/2} = -\frac{m}{p}$$

$$\boxed{-\vec{\nabla} V = \frac{p}{m}\vec{\nabla} p} = \frac{d\vec{p}}{dt}$$

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{d\vec{p}}{ds}\underbrace{\left(\frac{ds}{dt}\right)}_{v = p/m} = \frac{p}{m}\frac{d}{ds}\left(m\,\frac{d\vec{r}}{dt}\right) = \frac{p}{m}\frac{d}{ds}\left(m\,\frac{d\vec{r}}{ds}\underbrace{\frac{ds}{dt}}_{v = p/m}\right) = \frac{p}{m}\frac{d}{ds}\left(p\,\frac{d\vec{r}}{ds}\right)$$

> a trajetória de uma partícula de massa $\underline{m}$ e energia E, em uma região onde a energia potencial é $V(\vec{r})$, é idêntica à trajetória de um raio luminoso em um meio não-homogêneo de índice de refração $n(\vec{r})$ proporcional a $\sqrt{E - V(\vec{r})}$.

$$\boxed{\vec{\nabla} p = \frac{d}{ds}\left(p\,\frac{d\vec{r}}{ds}\right)}$$

Equação de Schrödinger

meio dielétrico : $\vec{\nabla} \cdot \begin{pmatrix} \vec{D} \\ \vec{B} \end{pmatrix} = 0 \qquad \vec{\nabla} \times \begin{pmatrix} \vec{E} \\ \vec{B} \end{pmatrix} = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} -\vec{B} \\ \vec{D} \end{pmatrix}$

linear : $\vec{D}(\vec{r},t) = \varepsilon(\vec{r})\, E(\vec{r},t)$
não-homogêneo

$\xRightarrow{\text{altas freq.}}$ $\vec{\nabla}\cdot\vec{D} \simeq \varepsilon\, \nabla\cdot\vec{E} = 0 \implies \nabla\cdot\vec{E} = 0$

$\frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \simeq \varepsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$

$$\underbrace{\vec{\nabla}\times(\vec{\nabla}\times\vec{E})}_{\vec{\nabla}(\cancel{\vec{\nabla}\cdot\vec{E}})^{0} - \nabla^2\vec{E}} = -\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\overbrace{(\vec{\nabla}\times\vec{B})}^{\frac{\varepsilon}{c}\frac{\partial \vec{E}}{\partial t}} = -\frac{\varepsilon}{c^2}\frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} \implies \boxed{\nabla^2 \psi = \frac{\varepsilon}{c^2}\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}}$$

eq. de D'Alembert

$(\psi = E_x, E_y, E_z, B_x, B_y, B_z)$

$v = \frac{c}{\sqrt{\varepsilon}} \implies \frac{c}{v} = \boxed{n(\vec{r}) = \sqrt{\varepsilon(\vec{r})}}$

índice de refração

campos monocromáticos : $\psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})\, e^{-i\omega t} \implies \nabla^2\psi(\vec{r}) = -\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \varepsilon(\vec{r})\, \psi(\vec{r})$

$\Downarrow$

$$\boxed{-\nabla^2\psi(\vec{r}) \sim n^2(\vec{r})\,\psi(\vec{r})}$$

eq. de Helmholtz

$\Downarrow$ analogia de Hamilton

$-\nabla^2\psi \sim p^2\psi$

Schrödinger : $-\nabla^2\psi = \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r})$

$\hbar^2 \rightarrow$ dimensão de momentum angular

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r}) = E\,\psi(\vec{r})}$$

eq. de Schrödinger independente do tempo

(partícula em um campo conservativo)

- Segundo Schrödinger, cada valor de energia E e a correspondente função $\psi_E(\vec{r})$, que satisfazem à <u>eq. de Schrödinger independente do tempo</u>, caracterizam a dependência espacial de um possível autoestado de energia da partícula em um campo conservativo $V(\vec{r})$.

- a partir dessa equação, Schrödinger determinou as energias (espectro) e os correspondentes autoestados de energia do elétron no átomo de hidrogênio, bem como o espectro e os autoestados de energia de um oscilador harmônico.

- Uma vez determinado o espectro e a dependência espacial dos autoestados de energia, a dependência espaço-temporal de cada autoestado de energia (E) é dada por

$$\boxed{\Psi_E(\vec{r},t) = \psi_E(\vec{r})\, e^{-i\frac{E}{\hbar}t}}$$ (autoestado de energia)

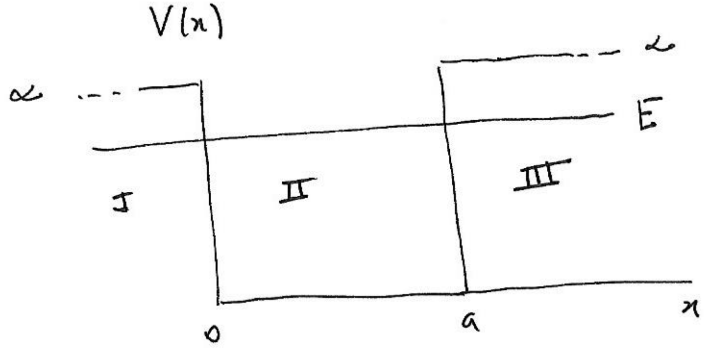
- Uma vez que para cada autoestado de energia, $\Psi_E(\bar{r},t) = \psi_E(\bar{r})\, e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$

$$\begin{cases} \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\bar{r})\right]\Psi_E(\bar{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\bar{r})\right]\psi_E(\bar{r})\, e^{-i E/\hbar\, t} = E\,\underbrace{\psi_E(\bar{r})\, e^{-i\frac{E}{\hbar}t}}_{\Psi_E(\bar{r},t)} \\ i\hbar\,\frac{\partial \Psi_E(\bar{r},t)}{\partial t} = E\,\underbrace{\psi_E(\bar{r})\, e^{-i E/\hbar\, t}}_{\Psi_E(\bar{r},t)} \end{cases}$$

e considerando que qualquer estado de uma partícula em um campo conservativo pode ser representado pela superposição de seus autoestados de energia (princípio da superposição), Schrödinger postula que a dependência espaço-temporal do estado de uma partícula em um campo similar é dado por

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\bar{r},t)\right]\Psi(\bar{r},t) = i\hbar\,\frac{\partial \Psi(\bar{r},t)}{\partial t}}$$ (equação de Schrödinger)

Poço infinito



partícula de massa m confinada no intervalo $0<x<a$

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x<0 \quad \text{(região I)} \\ 0 & 0<x<a \quad \text{(região II)} \\ \infty & x>a \quad \text{(região III)} \end{cases}$$

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

eq. dif. linear homogênea de 2ª ordem

$\Downarrow$

ψ e $\dfrac{d\psi}{dx}$ devem ser contínuas (condições de contorno)

região I : $\psi_I = 0 \quad (x<0)$

região III : $\psi_{III} = 0 \quad (x>a$

região II : $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_{II}(x) = E\,\psi_{II}(x) \Longrightarrow \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + \overbrace{\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)}^{k^2}\psi_{II} = 0 \Longrightarrow \psi_{II} = A \operatorname{sen} kx + B\cos kx$$

condições de contorno

$$\psi_{II}(0) = \psi_I = 0 \Longrightarrow B = 0 \Longrightarrow \boxed{\psi_{II} = A \operatorname{sen} kx}$$

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III} = 0 \Longrightarrow \operatorname{sen} ka = 0 \Longrightarrow ka = n\pi \Longrightarrow \boxed{E_n = n^2\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}} \text{ (espectro)}$$

$$\boxed{\phi_n = A_n \operatorname{sen}\frac{n\pi}{a}x} \Longrightarrow \boxed{\psi_n(x,t) = A_n \operatorname{sen}\frac{n\pi}{a}x\; e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}} \text{ (autoestados de energia)}$$

sol. geral: $$\boxed{\Psi(x,t) = \sum_n c_n \psi_n(x,t) = \sum_n c_n\,\phi_n(x)\,e^{-iE/\hbar\, t}}$$

$A_n = ?$
$c_n = ?$

• Os auto estados de energia, ou auto funções da eq. de Schrödinger, são ortogonais.

$$\int_0^a \underbrace{\left(\mathrm{sen}\, l\frac{\pi}{a}x\right)^*\left(\mathrm{sen}\, n\frac{\pi}{a}x\right)}_{\frac{1}{2}\left[\cos(l-n)\frac{\pi}{a}x - \cos(l+n)\frac{\pi}{a}x\right]} dx = \frac{1}{2}\left[\frac{\mathrm{sen}(l-n)\frac{\pi}{a}x}{(l-n)\frac{\pi}{a}x}\Bigg|_0^a - \overset{0}{\cancel{\frac{\mathrm{sen}(l+n)\frac{\pi}{a}x}{(l+n)\frac{\pi}{a}x}}}\Bigg|_0^a\right] = 0 \quad (l \neq n)$$

(condição de ortogonalidade)

$$\lim_{l\to n} \frac{\mathrm{sen}\,(l-n)\frac{\pi}{a}x}{(l-n)\frac{\pi}{a}x} = x \implies \int_0^a \left(\mathrm{sen}\, n\frac{\pi}{a}x\right)\left(\mathrm{sen}\, n'\frac{\pi}{a}x\right) dx = \int_0^a \mathrm{sen}^2\, n\frac{\pi}{a}x\, dx = \frac{a}{2} \quad (l = n)$$

• as auto funções $\boxed{\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\,\mathrm{sen}\, n\frac{\pi}{a}x}$ são os auto estados normalizados de energia da partícula em um poço infinito de largura a.

$$\boxed{\int_D \phi_l^*(x)\,\phi_n(x)\,dx = \delta_{ln}}$$

$D = (0, a)$ é o domínio de definição das auto funções

- Devido à ortogonalidade das autofunções da eq. de Schrödinger, os coeficientes (c_n) que determinam a dependência espaço-temporal do estado de uma partícula.

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n \phi_n(x)\, e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}$$

podem ser obtidos a partir de um dado <u>estado inicial</u>, $\Psi(x,0)$.

$$\Psi(x,0) = \sum_n c_n \phi_n(x) \implies \int_D \phi_\ell^*(x)\, \Psi(x,0)\, dx = \sum_n c_n \underbrace{\int_D \phi_\ell^*(x)\, \phi_n(x)\, dx}_{\delta_{\ell n}}$$

$$\boxed{c_n = \int_D \phi_n^*(x)\, \Psi(x,0)\, dx}$$

e obedecem a seguinte relação

$$\int_D \underbrace{\Psi^*(x,0)}_{\sum_\ell c_\ell^* \phi_\ell^*}\ \underbrace{\Psi(x,0)}_{\sum_n c_n \phi_n}\, dx = \sum_{\ell,n} c_\ell^* c_n \underbrace{\int_D \phi_\ell^*(x)\, \phi_n(x)\, dx}_{\delta_{\ell n}}$$

$$\boxed{\int_D |\Psi(x,0)|^2\, dx = \sum_n |c_n|^2}$$

Interpretação probabilística de Born

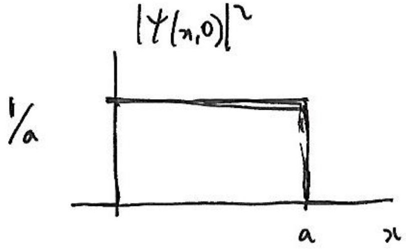
- intensidade de uma onda eletromagnética $\left(I \propto |\Psi|^2\right)$ $\propto$ densidade de fótons em uma região do espaço (Einstein) $\Longrightarrow$ $\int_R |\Psi|^2 dV$. (nº de fótons em uma dada região (R))
- quadrado do módulo da função de onda associada a uma partícula $\left(|\Psi|^2\right)$ $\propto$ densidade de probabilidade de presença da partícula (Born) $\Rightarrow$ $\int_R |\Psi|^2 dV$ (probabilidade de presença da partícula em uma dada região (R))

- a interpretação de Born implica $\int_{\text{todo}} |\Psi|^2 dV = 1$ (<u>condição de normalização</u>)

- os coeficientes (c_n) que caracterizam o estado de uma partícula como uma superposição linear de seus autoestados de energia são determinados pela distribuição inicial de probabilidade de presença da partícula.

Determinação dos coeficientes c_n, a partir de um dado estado inicial

a) desconhecimento total $\Rightarrow$ distribuição inicial uniforme em um poço infinito

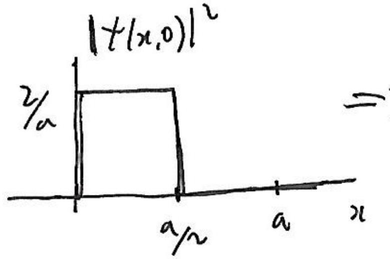


$\Rightarrow \boxed{\Psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{a}}} \Rightarrow c_n=\int_0^a \underbrace{\phi_n^*(x)}_{\sqrt{\frac{2}{a}}\,\sin\frac{n\pi}{a}x}\;\underbrace{\Psi(x,0)}_{1/\sqrt{a}}\,dx = \frac{\sqrt{2}}{a}\int_0^a \sin\frac{n\pi}{a}x\,dx$

$= \frac{\sqrt{2}}{n\pi}\cos\frac{n\pi}{a}x\Big|_a^0 = \frac{\sqrt{2}}{n\pi}\left(1-\cos n\pi\right) = \boxed{\frac{2\sqrt{2}}{\pi}\,\frac{1}{n}}\;(n=1,3,5,\ldots)$

$$P(0<x<a/2) = \int_0^{a/2}|\Psi(x,0)|^2\,dx = \frac{1}{a}\int_0^{a/2}dx = \frac{1}{2}$$

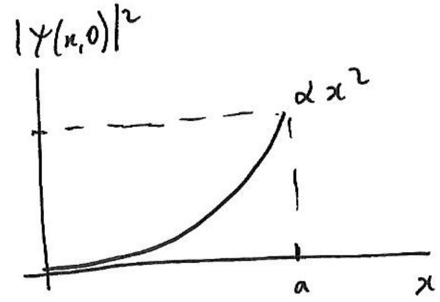
b) desconhecimento parcial em um poço infinito $\Rightarrow$



$\Rightarrow \boxed{\Psi(x,0)=\sqrt{\frac{2}{a}}}$

$$c_n = \int_0^{a/2}\phi_n^*(x)\,\Psi(x,0)\,dx = \frac{2}{a}\int_0^{a/2}\sin\frac{n\pi}{a}x\,dx = \frac{2}{n\pi}\left(1-\cos\frac{n\pi}{2}\right) = \frac{2}{\pi}\,\frac{1}{n}\times\begin{cases}1 & (n\text{-ímpar})\\ 2 & (n=2,4,6,\ldots)\\ 0 & (n=4,8,12,\ldots)\end{cases}$$

c) distribuição inicial da probab. de presença $\left(|\Psi(x,0)|^2\right)$ em um poço infinito



normalização : $\displaystyle\int_0^a |\Psi(x,0)|^2 dx = \alpha \underbrace{\int_0^a x^2 dx}_{a^3/3} = 1$

$\alpha = 3/a^3 \quad \Longrightarrow \quad \boxed{\Psi(x,0) = \sqrt{\dfrac{3}{a^3}}\, x}$

$$c_n = \int_0^a \underbrace{\phi_n^*(x)}_{\sqrt{2/a}\,\operatorname{sen}\frac{n\pi}{a}x} \underbrace{\Psi(x,0)}_{\sqrt{3/a^3}\,x} dx = \frac{\sqrt{6}}{a^2} \int_0^a x \underbrace{\operatorname{sen}\frac{n\pi}{a}x \, dx}_{dv}$$

$dv \Longrightarrow v = -\dfrac{a}{n\pi} \cos\dfrac{n\pi}{a}x$

$$= \frac{\sqrt{6}}{a^2}\left[-\frac{a}{n\pi}\, x \cos\frac{n\pi}{a}x \Big|_0^a + \frac{a}{n\pi} \cancelto{0}{\int_0^a \cos\frac{n\pi}{a}x \, dx} \right]$$

$$\boxed{c_n = \begin{cases} \sqrt{6}/a^2 & (n - \text{ímpar}) \\ -\sqrt{6}/a^2 & (n - \text{par}) \end{cases}}$$

Valores médios e incertezas na posição de uma partícula

- Segundo a interpretação de Born, o valor médio da componente x da posição de uma partícula é dado por

$$\langle x\rangle_t = \int_{-\infty}^{\infty} x \, |\Psi(x,t)|^2 \, dx \qquad (\text{real})$$

e a incerteza por

$$(\Delta x)_t = \sqrt{\langle x^2\rangle_t - \langle x\rangle_t^2} \qquad (\text{real})$$

- Se a densidade de probabilidade de presença não depende do tempo,

$$|\Psi(x,0)|^2 = |\Psi(x,t)|^2$$

o estado da partícula é dito estacionário.

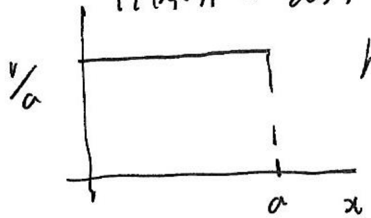
$$\langle x\rangle_t = \langle x\rangle_0 \Longrightarrow \frac{d\langle x\rangle}{dt} = 0$$ ~~(estado estacionário)~~

- os autoestados de energia são possíveis autoestados estacionários da partícula.

$$\Psi(x,t) = \phi_n(x)\, e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \Longrightarrow |\Psi(x,t)|^2 = |\phi_n(x)|^2$$ (não depende do tempo)

Valor médio da posição

$|\Psi(x,0)|^2 \to$ distrib. uniforme em um poço infinito de largura



$$\begin{cases} \langle x \rangle_0 = \int_0^a x\, |\Psi(x,0)|^2 dx = \frac{1}{a} \underbrace{\int_0^a x\, dx}_{a^2/2} = \boxed{\frac{a}{2}} \\ \langle x^2 \rangle_0 = \frac{1}{a} \int_0^a x^2\, dx = \frac{a^2}{3} \end{cases} \Longrightarrow (\Delta x)_0 = \sqrt{\langle x^2 \rangle_0 - \langle x \rangle_0^2} = \sqrt{\frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{4}} = \boxed{\frac{a}{\sqrt{12}}}$$

. Mostre que (nesse caso) $\langle x \rangle_t = \langle x \rangle_0$ (cte).

Conservação de energia

- segundo a condição de normalização, para partículas confinadas em um campo conservativo cujos autoestados de energia são $\phi_n(x) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}$, a relação

$$1 = \int |\Psi(x,t)|^2 = \int \underbrace{\Psi^*(x,t)}_{\sum_\ell c_\ell^* \phi_\ell^* e^{i\frac{E_\ell}{\hbar}t}} \underbrace{\Psi(x,t)}_{\sum_n c_n \phi_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}} dx = \sum_{\ell,n} c_\ell^* c_n e^{-i\frac{(E_n - E_\ell)t}{\hbar}} \underbrace{\int \phi_\ell^*(x)\,\phi_n(x)\,dx}_{\delta_{\ell m}}$$

$$= \sum_n |c_n|^2 = \int |\Psi(x,0)|^2 dx$$

indica que $\boxed{P(E_n) = |c_n|^2}$ é a probabilidade de ocorrência de um autoestado estacionário ϕ_n de energia E_n, ou a probabilidade de ocorrência do valor E_n para medida de energia da partícula e não depende do tempo ($|c_n|^2$ é constante)

- valores médios e incerteza na energia não dependem do tempo, para uma partícula em um campo conservativo.

- Diferentemente da Mecânica Clássica, a energia de uma partícula em um campo conservativo só tem um valor constante definido, se a partícula se encontra em um de seus autoestados estacionários de energia.

$$\Psi(x,t) = \phi_n(x)\, e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \Rightarrow P(E_l) = \Big| \underbrace{\int \phi_l^*(x)\, \phi_n(x)\, dx}_{\delta_{ln}} \Big|^2$$

$$P(E_l) = \begin{cases} 1 & E_l = E_n \\ 0 & E_l \neq E_n \end{cases}$$

- <u>O valor médio da partícula em um autoestado estacionário de energia é definido</u>, $\langle E \rangle = E_n$, <u>e a incerteza é nula</u>, $\Delta E = 0$.

- se o estado da partícula não for um de seus autoestados estacionários de energia,

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n \phi_n(x)\, e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$$

a energia não é definida. apenas o valor médio é constante ao longo do tempo.

$$\langle E\rangle = \sum_n P(E_n) E_n = \sum_n |c_n|^2 E_n \quad (\underline{ct}) \Rightarrow \boxed{\frac{d\langle E\rangle}{dt} = 0}$$

em um campo conservativo, a conservação de energia é válida p/ os valores médios da energia

e $\Delta E \neq 0$ $(\underline{ct})$

- seja $\Psi(x,0) = \frac{\sqrt{3}}{2}\phi_1(x) + \frac{1}{2}\phi_3(x)$ (partícula em um poço infinito)

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

$$E_3 = 9\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = 9E_1$$

$\boxed{P(E_1) = 3/4}$ $\boxed{P(E_3) = 1/4}$

$$\langle E\rangle = \frac{3}{4}E_1 + \frac{1}{4}9E_1 = \boxed{3E_1 = \langle E\rangle} = 3\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

$$\langle E^2\rangle = \frac{3}{4}E_1^2 + \frac{1}{4}81E_1^2 = 21E_1^2$$

$$\Rightarrow \Delta E = \sqrt{21-9}\,E_1 = \boxed{2\sqrt{3}\,E_1 = \Delta E}$$

$$\Delta E = \sqrt{3}\frac{\pi^2\hbar^2}{ma^2}$$

Valor médio do momentum

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x\,|\Psi|^2\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} x\,\Psi^*\Psi\,dx \qquad \Psi(\pm\infty)=0$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial\Psi}{\partial t} = \dfrac{-i}{\hbar}\left[\dfrac{-\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\Psi}{dx^2} + V(x)\Psi\right] \\[2ex] \dfrac{\partial\Psi^*}{\partial t} = \dfrac{i}{\hbar}\left[\dfrac{-\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\Psi^*}{dx^2} + V(x)\Psi^*\right] \end{cases}$$

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \int_{-\infty}^{\infty} x\left(\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right)\Psi\,dx + \int_{-\infty}^{\infty} x\,\Psi^*\left(\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right)dx$$

$$= \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} x\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\right)\left(\frac{d^2\Psi^*}{dx^2}\right)\Psi\,dx + \cancel{\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} x\,V(x)\Psi^*\Psi\,dx} - \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} x\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\right)\left(\frac{d^2\Psi}{dx^2}\right)\Psi^*\,dx - \cancel{\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} x\,V(x)\Psi^*\Psi\,dx}$$

$$= \frac{i}{\hbar}\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\right)\int_{-\infty}^{\infty} x\,\underbrace{\left(\frac{d^2\Psi^*}{dx^2}\Psi - \frac{d^2\Psi}{dx^2}\Psi^*\right)}_{\frac{d}{dx}\left(\Psi\frac{d\Psi^*}{dx}\right) - \frac{d}{dx}\left(\Psi^*\frac{d\Psi}{dx}\right)}dx = \frac{-i\hbar}{2m}\left[\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} x\,\frac{d}{dx}\left(\Psi\frac{d\Psi^*}{dx}\right)dx}_{-\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}\Psi\frac{d\Psi^*}{dx}dx}_{\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\frac{d\Psi}{dx}dx}} - \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} x\,\frac{d}{dx}\left(\Psi^*\frac{d\Psi}{dx}\right)dx}_{+\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\frac{d\Psi}{dx}dx}\right]$$

$$= 2\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\frac{d\Psi}{dx}dx$$

$$\boxed{m\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \int \Psi^*\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\Psi\right)dx = \langle p\rangle} \quad \text{(Ehrenfest)}$$

Valores médios da energia, momentum e posição

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n \phi_n(x)\, e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \Longrightarrow \underbrace{\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]}_{H}\Psi(x,t) = \sum_n c_n \underbrace{\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\phi_n(x)}_{E_n\phi_n(x)}\, e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\, H\, \Psi(x,t)\, dx = \sum_{\ell,n} c_\ell^* c_n E_n\, e^{-i\frac{(E_n-E_\ell)}{\hbar}t} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \phi_\ell^*(x)\,\phi_n(x)\,dx}_{\delta_{\ell n}} = \sum_n |c_n|^2 E_n = \langle E\rangle$$

$$\langle p\rangle = \int \Psi^* \overbrace{\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)}^{p}\Psi\, dx = \int \Psi^* p\, \Psi\, dx$$

$$\boxed{p = -i\hbar\frac{d}{dx}}$$ componente x do operador momentum linear

$$\langle E\rangle = \int \Psi^* H \Psi\, dx$$

$$\boxed{H = \frac{p^2}{2m} + V(x)}$$ operador energia ou hamiltoniano

$$\langle x\rangle = \int \Psi^* x \Psi\, dx$$

x → componente x do operador posição

$$\langle p^2\rangle = \int \Psi^* p^2 \Psi\, dx \Longrightarrow (\Delta p) = \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2}$$

$$\langle x^2\rangle = \int \Psi^* x^2 \Psi\, dx \Longrightarrow (\Delta x) = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2}$$