

Fundamentos da Mecânica Quântica

Vitor Oguri

Departamento de Física Nuclear e Altas Energias (DFNAE)
Instituto de Física Armando Dias Tavares (IFADT)
Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ)

Rio de Janeiro
05 de setembro de 2015



- teoria desenvolvida ao final do primeiro quarto do século XX, para resolver os problemas associados aos fenômenos decorrentes do comportamento de sistemas microscópicos (moleculares, atômicos e nucleares), cujas partículas constituintes interagem eletromagneticamente;
- representa o triunfo da visão atomística da matéria;
- a partir de uma **interpretação probabilística**, estabelece os fundamentos para a abordagem de processos que ocorrem em dimensões da ordem de 10^{-8} cm, e intervalos de tempo de 10^{-8} s;
- estabelece correlações (**relações de incerteza**) entre as medidas de algumas grandezas associadas a um sistema físico.



Estados quânticos

- o estado quântico de um sistema é caracterizado por uma função das coordenadas de suas partículas constituintes e do tempo;
- a partir de um dado estado, pode-se calcular as probabilidades de ocorrências dos possíveis valores ou medidas das grandezas ou componentes de grandezas associadas ao sistema.



Princípios Gerais da Mecânica Quântica

Estado quântico de uma partícula – Interpretação probabilística de Born

- o estado quântico de uma única partícula é caracterizado por uma função de onda $\Psi(x, y, z, t) = \Psi(\vec{r}, t)$, das coordenadas (x, y, z) e do tempo (t) , tal que a probabilidade de encontrar a partícula em um volume $d^3\vec{r} = dx dy dz$ em torno de uma posição $\vec{r}(x, y, z)$ é dada por

$$\Psi^*(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t) d^3\vec{r} = |\Psi|^2 d^3\vec{r}$$

- a função de onda satisfaz a condição de normalização,

$$\int |\Psi|^2 d^3\vec{r} = \int \rho(\vec{r}, t) d^3\vec{r} = 1$$

onde $\rho(\vec{r}, t) = \Psi^*(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t) = |\Psi|^2$ é a **densidade de probabilidade** de presença da partícula.



Grandezas, observáveis e operadores

- as grandezas escalares, como a energia (E), ou as componentes de grandezas vetoriais, como as coordenadas (x, y, z) da posição ou as componentes (p_x, p_y, p_z) do *momentum*, (**observáveis**) associadas a uma partícula, são representadas por operações lineares definidas sobre a função de onda $\Psi(x, y, z, t)$ que representa o estado da partícula em um dado instante.

posição	{	coordenadas	operador
		x	x
		y	y
		z	z

Grandezas, observáveis e operadores

	componente	operador
<i>momentum</i>	p_x	$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$
	p_y	$-i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$
	p_z	$-i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$

onde $\hbar \simeq 10^{-34}$ J.s é a constante de Planck reduzida, a qual determina um valor característico para a descrição quântica de um sistema.



Princípios Gerais da Mecânica Quântica

Energia de uma partícula de massa m em um campo conservativo \rightarrow operador hamiltoniano (H)

$$H = \begin{cases} \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(x, y, z) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \end{cases}$$

onde $V(\vec{r})$ é a energia potencial da partícula.

- o operador hamiltoniano, além da energia, representa as interações de uma partícula com outras partículas.



Resultados de medições

- os autovalores $\{a_n\}$ do operador que representa um observável A são os possíveis valores para as medidas do observável;
- o **valor médio** de um observável A , associado a uma partícula em um estado $\Psi(\vec{r}, t)$ é dado por

$$\langle A \rangle = \int \Psi^*(\vec{r}, t) [A\Psi(\vec{r}, t)] d^3\vec{r} = (\Psi, A\Psi)$$

- a dispersão em torno da média (**incerteza**) é dada por

$$\Delta A = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$$



Operadores hermitianos e observáveis

- os operadores lineares (A) que representam as grandezas ou os observáveis associados a um sistema são hermitianos ($A^\dagger = A$),
 - $(\Psi, A\Psi) = (A^\dagger\Psi, \Psi) = (A\Psi, \Psi)$ (real)
 - $A\psi_n = a_n\psi_n \Rightarrow a_n$ (autovalor real)
 - autovetores associados a distintos autovalores são ortogonais
 $a_n \neq a_m \Rightarrow (\phi_n, \psi_m) = 0$



Regras de comutação

$$[A, B] = AB - BA \quad (\text{comutador})$$

- $[x, y] = [x, z] = [y, z] = 0$
- $[p_x, p_y] = [p_x, p_z] = [p_y, p_z] = 0$
- $[x, p_x] = [y, p_y] = [z, p_z] = i\hbar$
- $[x, p_y] = [x, p_z] = [y, p_x] = [y, p_z] = [z, p_x] = [z, p_y] = 0$
- $[A, B]^\dagger = (AB)^\dagger - (BA)^\dagger = -(AB - BA) = -[A, B]$

⇓

$$[A, B] = iC \quad (C^\dagger = C)$$



Relações de incerteza

Correlações entre as incertezas associadas a observáveis que não comutam.

- $A' = A - \langle A \rangle \Rightarrow \langle A'^2 \rangle = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = (\Delta A)^2$
 ΔA – incerteza associada ao observável A

- $\Psi' = (A' + i\alpha B')\Psi$ $B' = B - \langle B \rangle$ e α (real)

$$\begin{aligned}(\Psi', \Psi') &= ((A' + i\alpha B')\Psi, \Psi') \geq 0 \\ &= (\Psi, (A' - i\alpha B')(A' + i\alpha B')) \geq 0 \\ &= (\Psi, A'^2 + \alpha^2 B'^2 + i\alpha \underbrace{(A'B' - B'A')}_{[A', B']} \Psi) \geq 0\end{aligned}$$

$$[A', B'] = [A, B] = iC$$

$$\begin{aligned}&= (\Psi, B'^2 \Psi) \alpha^2 - (\Psi, C \Psi) \alpha + (\Psi, A'^2 \Psi) \geq 0 \\ &= (\Delta B)^2 \alpha^2 - \langle C \rangle \alpha + (\Delta A)^2 \geq 0\end{aligned}$$

$$\langle C \rangle^2 - 4(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \leq 0 \Rightarrow \Delta A \Delta B \geq \frac{|\langle C \rangle|}{2}$$



Relações de incerteza

$$\bullet \left\{ \begin{array}{l} (xp_x)\Psi = x(p_x\Psi) = x\left(-i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right) = -i\hbar x\frac{\partial\Psi}{\partial x} \\ (p_x x)\Psi = p_x(x\Psi) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\Psi) = -i\hbar\left(\Psi + x\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right) \end{array} \right.$$

↓

$$(xp_x - p_x x)\Psi = [x, p_x]\Psi = i\hbar\Psi$$

↓

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$



A equação de Schrödinger

- a evolução temporal do estado de uma partícula satisfaz a equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = H\Psi(\vec{r}, t)$$

onde $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r})$ é o operador hamiltoniano, e a energia potencial $V(\vec{r})$ descreve as interações da partícula com outras partículas;

- a linearidade da equação de Schrödinger implica que se Ψ_1 e Ψ_2 representam dois possíveis estados de uma partícula, $c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ é também um possível estado da partícula (**princípio da superposição**).

A equação de Ehrenfest

- $\langle A \rangle = (\Psi, A\psi)$

-

$$\begin{aligned}
 \frac{d\langle A \rangle}{dt} &= \left(\underbrace{\frac{\partial \Psi}{\partial t}}_{-i\frac{i}{\hbar}H\Psi}, A\Psi \right) + \left(\psi, A \underbrace{\frac{\partial \Psi}{\partial t}}_{-i\frac{i}{\hbar}H\Psi} \right) + \left(\Psi, \frac{\partial A}{\partial t} \Psi \right) \\
 &= \frac{i}{\hbar} \left(\underbrace{H\Psi}_{(\Psi, HA\Psi)}, A\Psi \right) - \frac{i}{\hbar} (\Psi, A H \Psi) + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle \\
 &= \frac{i}{\hbar} (\Psi, \underbrace{HA - AH}_{[H,A]} \Psi) + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle \\
 &= \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle
 \end{aligned}$$

Campos conservativos

- além da evolução temporal de um estado, o operador hamiltoniano H determina os possíveis valores $\{E_n\}$ para a energia de uma partícula em um campo conservativo, e os respectivos possíveis autoestados $\{\psi_n(\vec{r})\}$ de energia.

$$H\psi_n\psi(\vec{r}) = E_n\psi_n(\vec{r})$$



Campos conservativos

- De acordo com a equação de Ehrenfest, em um campo conservativo:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle A \rangle = [A, H]$$

- o valor médio da energia independe do tempo

$$\frac{d}{dt} \langle E \rangle = 0$$

- o valor médio de todo observável A que não depende explicitamente do tempo e comuta com a energia, independe do tempo

$$[A, H] = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt} \langle A \rangle = 0$$



Estados estacionários

- se o estado inicial Ψ_0 de uma partícula é uma autoestado $\psi_n(\vec{r})$ do hamiltoniano (H) a ela associado, correspondente a um autovalor não degenerado de energia E_n , de acordo com a equação de Schrödinger, o estado em um instante posterior qualquer t é dado por

$$\Psi_n(\vec{r}, t) = \psi_n(\vec{r}) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$$

- $\Psi_n(\vec{r}, t)$ é dito um estado estacionário da partícula
- o valor médio da energia é igual ao próprio autovalor

$$\langle E \rangle = E_n$$

- a incerteza é nula ($\Delta E = 0$)
- a densidade de probabilidade de presença independe do tempo



Estados não estacionários

- todo estado arbitrário $\Psi(\vec{r}, t)$ de uma partícula em um campo conservativo pode ser expresso por uma superposição linear de seus autoestados de energia, $\psi_n(\vec{r})$

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n \psi_n(\vec{r}) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}$$

- $\Psi(\vec{r}, t)$ é dito um estado não estacionário da partícula
- $P(E_n) = |c_n|^2$ é a probabilidade de ocorrência do valor E_n para a medida da energia
- o valor médio da energia é dado por

$$\langle E \rangle = \sum_n |c_n|^2 E_n$$

- a incerteza é não-nula ($\Delta E \neq 0$);
- a densidade de probabilidade de presença depende do tempo

