

Princípios Gerais 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
25 de fevereiro de 2019



Princípios Gerais da Mecânica Quântica

Origens da Mecânica Quântica

- quantização da energia trocada entre a radiação e os osciladores (átomos) em equilíbrio térmico em uma cavidade (Planck – 1900)
- quantização da luz (fótons) – efeito fotoelétrico (Einstein – 1905)
- quantização das vibrações da rede cristalina – calor específico dos sólidos (Einstein – 1907)
- quantização da energia em sistemas atômicos – átomo de Bohr (1913)
- quantização de Wilson-Sommerfeld (1915 – 1916)
- caráter corpuscular da radiação (raios-X – Compton – 1922)
- dualidade da matéria (de Broglie – 1922)



- teoria desenvolvida ao final do primeiro quarto do século XX, para resolver os problemas associados aos fenômenos decorrentes do comportamento de sistemas moleculares, atômicos e nucleares, cujas partículas constituintes interagem eletromagneticamente
- representa o triunfo da visão atomística da matéria
- estabelece limitações (**relações de incerteza**) entre as medidas de algumas grandezas associadas a um sistema físico (**Princípio da Incerteza**)
- suas previsões probabilísticas baseiam-se no fato de que a ocorrência de uma condição particular (estado) de um sistema, em um dado instante, não exclui a ocorrência de qualquer outro estado concebível (**Princípio da Superposição+Interpretação probabilística**)



- na visão de Heisenberg, a medição de uma grandeza A na qual se obtém um valor a (medida) define um estado (Ψ_a) para um sistema, denominado autoestado de A associado ao valor a
- na visão de Dirac, o estado de um sistema resulta de uma preparação obtida por fendas, polarizadores, campos magnéticos, aceleradores, ...
- na visão de Schrödinger, o estado quântico de um sistema com N partículas é caracterizado por uma função das coordenadas de suas partículas constituintes e do tempo, chamada função de onda

$$\Psi(q, t) \quad q = (x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_N, y_N, z_N)$$

- a partir da função de onda, pode-se calcular as probabilidades de ocorrências dos possíveis valores ou medidas das grandezas, ou componentes de grandezas associadas ao sistema



O movimento da partícula na descrição de Schrödinger

- o estado de uma partícula livre de massa m , com momentum \vec{p} e energia $E = \frac{p^2}{2m}$ é dado por

$$\psi(\vec{r}, t) = Ae^{i(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)/\hbar}$$

- segundo a interpretação de Born, a probabilidade de se encontrar uma partícula caracterizada por uma função de onda $\Psi(\vec{r}, t)$ em um volume $dV = dx dy dz$ é dada por

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

onde $\Psi^*(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \rho(\vec{r}, t)$, denominada densidade de probabilidade de presença. satisfaz à condição de normalização

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\vec{r}, t) dV = 1$$



A equação de Schrödinger

- a evolução temporal do estado de uma partícula de massa m obedece à equação de Schrödinger

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

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

- se Ψ_1 e Ψ_2 são dois possíveis estados de uma partícula, a linearidade e homogeneidade da equação de Schrödinger implica que

$$c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2$$

é também um possível estado da partícula (**Princípio da Superposição**).



O movimento da partícula na descrição de Schrödinger

- uma vez que $\rho(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2$ é a distribuição de probabilidades de presença da partícula, a posição média $\langle \vec{r} \rangle$ e as incertezas na posição são dadas por

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle \vec{r} \rangle = \int \vec{r} \rho(\vec{r}, t) dV = \int \vec{r} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV \\ (\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \\ (\Delta y)^2 = \langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2 \\ (\Delta z)^2 = \langle z^2 \rangle - \langle z \rangle^2 \end{array} \right.$$



Estados Estacionários

- para campos conservativos, o operador hamiltoniano H representa a energia da partícula, e equação de Schrödinger pode ser reduzida a uma equação de autovalor que determina os possíveis valores $\{E\}$ para a energia, e os respectivos autoestados $\{\psi_E(\vec{r}, t)\}$ de energia

$$\left\{ \begin{array}{l} V(\vec{r}, t) = V(\vec{r}) \quad \Rightarrow \quad \Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \phi(t) \\ -\frac{1}{\psi(\vec{r})} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = i\hbar \frac{1}{\phi(t)} \frac{d\phi}{dt} = E \text{ (energia)} \\ \phi(t) = e^{-iE/\hbar t} \end{array} \right.$$



Estados Estacionários

- as energias permitidas e as (auto) funções correspondentes são soluções do problema de autovalor

$$H\psi_E(\vec{r}) = E\psi_E(\vec{r}) \quad (\text{equação de Schrödinger independente do tempo})$$

$$\text{onde } H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})$$

- os autoestados de energia

$$\Psi_E(\vec{r}, t) = \psi_E(\vec{r}) e^{-iE/\hbar t}$$

são também denominados estados estacionários, pois a densidade de probabilidade de presença associada a um autoestado de energia é independente do tempo

$$\rho(\vec{r}, t) = \Psi_E^*(\vec{r}, t)\Psi_E(\vec{r}, t) = \psi^*(\vec{r})\psi_E(\vec{r}) = \rho(\vec{r})$$



Estados Estacionários

- para potenciais do tipo poço, nos quais o movimento da partícula é praticamente confinado em uma região (estados ligados), a solução do problema de autovalor (equação de Schrödinger independente do tempo) resulta em um conjunto discreto de autovalores (espectro de energia – $\{E_n\}$) associado a um conjunto de autofunções $\{\psi_n(\vec{r})\}$
- para uma partícula confinada em uma região, as autofunções do hamiltoniano e, portanto, os autoestados de energia são ortogonais

$$H\psi_n = E_n\psi_n \quad \Rightarrow \quad \int \psi_l^* \psi_n dV = (\psi_l, \psi_n) = \delta_{ln}$$



Estados não estacionários

- devido a linearidade e homogeneidade da equação de Schrödinger, qualquer condição, estado $\Psi(\vec{r}, t)$, de uma partícula em um campo conservativo pode ser expresso pela superposição linear dos autoestados estacionários de energia, $\Psi_n(\vec{r}, t)$.

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

onde os coeficientes c_n , de acordo com a propriedade de ortogonalidade dos autoestados são dados por

$$c_n = \int \psi_n^* \Psi(\vec{r}, 0) dV = (\psi_n, \Psi_0)$$

Probabilidades e valores médios da energia

- uma vez determinado os autoestados de energia de uma partícula em um campo conservativo, a evolução da partícula a partir de um dado estado inicial $\Psi_0(\vec{r})$ é dada por

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n \underbrace{(\psi_n, \Psi_0)}_{c_n} \psi_n(\vec{r}) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$$

- quanto maior $|c_n|$, maior o peso do autoestado associado ao valor de energia E_n na expansão de um dado estado



Probabilidades e valores médios da energia

- de acordo com a interpretação de Born e a propriedade de ortogonalidade dos autoestados, os coeficientes c_n obedecem à relação $\sum_n |c_n|^2 = 1$, uma vez que

$$\int \Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) dV = \sum_{l,n} c_l^* c_n e^{i \frac{(E_l - E_n)}{\hbar} t} \underbrace{\int \psi_l^*(\vec{r}) \psi_n(\vec{r}) dV}_{\delta_{ln}} = 1$$

- desse modo, interpreta-se

$$\left\{ \begin{array}{l} P_{\Psi}(E_n) = |c_n|^2 \rightarrow \text{probab. de ocorrência do valor de energia } E \\ \langle E \rangle_{\Psi} = \sum_n E_n |c_n|^2 \rightarrow \text{valor médio da energia (não depende do tempo)} \\ (\Delta E)_{\Psi} = \sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2} \rightarrow \text{incerteza na energia} \end{array} \right.$$

Probabilidades e valores médios da energia

- se a partícula encontra-se em um autoestado de energia,

$$\begin{cases} \langle E \rangle_n = E_n \\ (\Delta E)_n = 0 \end{cases}$$

- o valor médio da energia pode ser calculado também por

$$\langle E \rangle_\psi = \int \psi^* (H\psi) dV = (\psi, H\psi)$$



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*, chamados (**observáveis**) associados 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

$$\text{momentum} \left\{ \begin{array}{ll} \text{componente} & \text{operador} \\ p_x & -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \\ p_y & -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \\ p_z & -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \end{array} \right.$$

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.



- os observáveis associados a um sistema físico são representados por operadores hermitianos;
- os autovalores $\{a_n\}$ do operador hermitiano A que representa um observável são os possíveis valores para as medidas do observável;

$$A\phi_n = a_n\phi_n \quad (n = 1, 2, \dots)$$

- o conjunto das autofunções $\{\phi_n\}$ associado aos autovalores $\{a_n\}$ de um operador A constituem um sistema ortogonal completo, tal que qualquer estado Ψ pode ser expresso como

$$\Psi = \sum_n c_n \phi_n$$

onde $c_n = (\phi_n, \Psi)$



Resultados de medições

- a probabilidade de ocorrência de um autovalor a_n para a medida de um observável A associado a uma partícula em um estado $\Psi(\vec{r}, t)$ é dada por

$$P_{\Psi}(a_n) = |c_n|^2$$

- o **valor médio** por

$$\langle A \rangle_{\Psi} = \sum_n a_n |c_n|^2$$

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

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



Resultados de medições

- o valor médio de um observável A pode ser determinado também por

$$\langle A \rangle_{\Psi} = (\Psi, A\Psi)$$

- se o espectro (conjunto de autovalores) de um observável é degenerado,

$$A\phi_n^{\alpha} = a_n\phi_n^{\alpha} \quad (\alpha = 1, \dots, g_n)$$

a probabilidade de ocorrência de um autovalor a_n para a medida de um observável A associado a uma partícula em um estado $\Psi(\vec{r}, t)$ é dada por

$$P_{\Psi}(a_n) = \sum_{\alpha=1}^{g_n} |(\phi_n^{\alpha}, \Psi)|^2$$



Equação de Ehrenfest

- a evolução temporal do valor médio de um observável A associado a uma partícula em um campo conservativo, satisfaz à equação de Ehrenfest

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

onde $[A, H] = AH - HA$ (comutador)

- o valor médio da energia independe do tempo

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



A definição de um estado quântico

- de acordo com a chamada interpretação de Copenhague, imediatamente após a ocorrência de um autovalor a_n para a medida de um observável A , $M(A)$, o estado Ψ_0 da partícula pode ser representado pela correspondente autofunção $\phi_n(\vec{r})$, ou autoestado de A associado ao autovalor a_n

$$M(A) = a_n \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \Psi_0 = \phi_n & \text{(autovalor não-degenerado)} \\ \Psi_0 = \sum_{\alpha=1}^{g_n} c_{\alpha} \phi_n^{\alpha} & \text{(autovalor } g_n \text{ degenerado)} \end{cases}$$



Observáveis compatíveis

- sejam três medições sucessivas de A , B e A

$$\left\{ \begin{array}{l} M(A) = a \Rightarrow \psi_1 \quad (A\psi_1 = a\psi_1) \\ M(B) = b \Rightarrow \psi_2 \quad (B\psi_2 = b\psi_2) \\ M(A) = a' \Rightarrow \psi' \end{array} \right.$$

- se $a' = a$, diz-se que os observáveis A e B são compatíveis, e $\psi' = \psi_{a,b}$ é um autoestado simultâneo de A e B

$$\left\{ \begin{array}{l} A\psi_{a,b} = a\psi_{a,b} \\ B\psi_{a,b} = b\psi_{a,b} \end{array} \right.$$

- observáveis compatíveis possuem autoestados em comum



- o estado de uma partícula após a medição de uma grandeza A não é perturbado pela medição de uma grandeza compatível B
- grandezas compatíveis podem ser medidas simultaneamente
- a partir da determinação simultânea de um número máximo de grandezas compatíveis e independentes, pode-se definir de modo unívoco o estado quântico de uma partícula
- a determinação desse número máximo de grandezas compatíveis e independentes é uma questão experimental

$$\text{(elétron)} \quad \left\{ \begin{array}{ll} p_x, p_y, p_z, S_z & \text{(livre)} \\ E, L^2, L_z, S_z & \text{(átomo)} \end{array} \right.$$



Regras de comutação e compatibilidade

- a compatibilidade ou a não-compatibilidade de dois observáveis A e B pode ser expressa pela regra de comutação entre os operadores que os representam
- se A e B são compatíveis e $\psi = \psi_{a,b}$ resulta de medições sucessivas de A e B , ou seja, $\psi_{a,b}$ é um autoestado simultâneo de A e B ,

$$\left\{ \begin{array}{l} A\psi_{a,b} = a\psi_{a,b} \\ B\psi_{a,b} = b\psi_{a,b} \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} A(B\psi_{a,b}) = ab\psi_{a,b} \\ B(A\psi_{a,b}) = ba\psi_{a,b} = ab\psi_{a,b} \end{array} \right.$$

\Downarrow

$$(AB - BA)\psi_{a,b} = 0 \quad \rightarrow \quad [A, B] = 0 \quad (\text{comutador nulo})$$

diz-se que A e B comutam

Regras de comutação e compatibilidade

- $\begin{cases} [A, B] = 0 & \Leftrightarrow A \text{ e } B \text{ compatíveis} \\ [A, B] \neq 0 & \Leftrightarrow A \text{ e } B \text{ não compatíveis} \end{cases}$
- x e p_x não são compatíveis (*momentum* e posição)

$$\begin{cases} x(p_x \Psi) = -i\hbar x \frac{\partial \Psi}{\partial x} \\ p_x(x\Psi) = -i\hbar \Psi - i\hbar x \frac{\partial \Psi}{\partial x} \end{cases} \Rightarrow \underbrace{x(p_x \Psi) - p_x(x\Psi)}_{(xp_x - p_x x)\Psi} = i\hbar \Psi$$

↓

$[x, p_x] = i\hbar$



Princípio da Incerteza e relações de incerteza

- o Princípio da Incerteza estabelece limitações para as incertezas associadas às grandezas não compatíveis, e fundamenta-se nas chamadas relações de incertezas, as quais derivam das regras de comutação entre os operadores que as representam
- relações de incertezas entre a posição e o *momentum*

$$\left\{ \begin{array}{l} x' = x - \langle x \rangle \\ p_{x'} = p_x - \langle p_x \rangle \\ p_{x'}^* = \underbrace{p_x^* - \langle p_x \rangle}_{-(p_x - \langle p_x \rangle)} \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \langle x'^2 \rangle = \underbrace{\int \psi^* (x - \langle x \rangle)^2 \psi dx}_{(\Delta x)^2} \\ \langle p_{x'}^2 \rangle = \underbrace{\int \psi^* (p_x - \langle p_x \rangle)^2 \psi dx}_{(\Delta p_x)^2} \\ [x', p_{x'}] = [x, p_x] = i\hbar \end{array} \right.$$



Princípio da Incerteza e relações de incerteza

$$\begin{cases} \psi' = (x' + i\alpha p_{x'})\psi & \alpha \text{ (real)} \\ \psi'^* = (x' - i\alpha p_{x'}^*)\psi^* = (x' + i\alpha p_x + i\alpha \langle p_x \rangle)\psi^* \end{cases}$$

$$\int |\psi'|^2 dx = \int \psi^* (x' + i\alpha \langle p_x \rangle) \psi' dx + i\alpha \underbrace{\int \psi' (p_x \psi^*) dx}_{-\int \psi^* (p_x \psi') dx} \geq 0$$

$$(\psi', \psi') = \int \psi^* [(x' - i\alpha \underbrace{(p_x - \langle p_x \rangle)}_{p_{x'}})] \psi' dx \geq 0$$

$$= \int \psi^* (x' - i\alpha p_{x'}) (x' + i\alpha p_{x'}) \psi dx \geq 0$$

$$= \underbrace{\langle x'^2 \rangle}_{(\Delta x)^2} + i\alpha \int \psi^* \underbrace{(x' p_{x'} - p_{x'} x')}_{[x, p_x] = i\hbar} \psi dx + \alpha^2 \underbrace{\langle p_{x'}^2 \rangle}_{(\Delta p_x)^2} \geq 0$$



Princípio da Incerteza e relações de incerteza

$$(\psi', \psi') = (\Delta p_x)^2 \alpha^2 + \hbar \alpha + (\Delta x)^2 \geq 0 \Rightarrow \hbar^2 - 4(\Delta x)^2 (\Delta p_x)^2 \leq 0$$

↓

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2} \end{array} \right.$$

