Revisão de Mecânica Quântica

Aula do MNPEF - Polo 41

Evy A. Salcedo Torres

24 de fevereiro de 2025

Equação de Schrödinger

Schrödinger ataca o problema desde uma nova perspectiva (usando mecânica de Hamilton e a Ótica), e obtém uma nova expressão dada por (ver explicação)

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi$$

nesta expressão (como na anterior) Ψ é a função de onda ou amplitude de probabilidade, $\hbar = h/2\pi$, $V(x,t)$ é a energia potencial à qual a partícula está sujeita.

Equação de Schrödinger - Partícula livre

Seja $V(x,t) = 0$

$$\Psi(x,t) = \phi(x)\psi(t)$$

substituindo na equação de Schrödinger obtemos

$$i\hbar\phi\frac{d\psi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi\frac{d^2\phi}{dx^2}$$
$$i\hbar\frac{1}{\psi}\frac{d\psi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\phi}\frac{d^2\phi}{dx^2}$$

seja

$$i\hbar\frac{1}{\psi}\frac{d\psi}{dt} = E$$

$$\psi(t) = C_1 e^{-iEt/\hbar}$$

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{E\hbar^2}{2m}\phi = 0$$

$$\phi(x) = A'e^{i\frac{\sqrt{2m\,E}\,x}{\hbar}} + B'e^{-i\frac{\sqrt{2m\,E}\,x}{\hbar}}$$

juntando

$$\Psi(x,t) = A\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\sqrt{2m\,E}\,x - Et\right)\right] + B\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(\sqrt{2m\,E}\,x - Et\right)\right]$$

Comparando com a equação de uma onda

$$\Psi(x,t) = A\exp\left(kx - \omega t\right) + B\exp\left(-kx - \omega t\right)$$

Equação de Schrödinger - Partícula livre

Comparando as equações anteriores

$$
\begin{aligned}
k &= \frac{\sqrt{2m\,E}}{\hbar} \\
\frac{2\pi}{\lambda} &= 2\pi\frac{\sqrt{2m\,E}}{h} \\
\lambda &= \frac{h}{\sqrt{2m\,E}}
\end{aligned}
$$

como a partícula é livre, $E = K = 1/2\,mv_x^2$, então

$$
\begin{aligned}
\lambda &= \frac{h}{\sqrt{2m\,\frac{1}{2}mv_x^2}} \\
&= \frac{h}{mv_x} \\
&= \frac{h}{p_x}
\end{aligned}
$$

continuando com a comparação

$$
\begin{aligned}
\omega &= \frac{E}{\hbar} \\
2\pi\nu &= \frac{2\pi E}{h} \\
\nu &= \frac{E}{h}
\end{aligned}
$$

Interpretação da função de onda

Max Born propõe interpretar o quadrado da função de onda como sendo uma probabilidade, especificamente

$$P(x)\,dx = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$$

representa a probabilidade de uma partícula entre x e $x + dx$, assim, a probabilidade da partícula estar entre x_1 e x_2 é dada por

$$P(x) = \int_{x_1}^{x_2} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)\,dx$$

além disso a função de onda deve ser normalizada uma vez que a sabemos com total confiança que a partícula estará dentro do intervalo $(-\infty,\ \infty)$, ou seja

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)\,dx = 1$$

Propriedades da função de onda

Dadas o fato de $P(x)\,dx = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$ a função Ψ dever verificar certas caraterísticas para que o resultado dos cálculos sejam fisicamente realista.

- $\Psi(x)$ deve ser finita $\forall x$
- $\Psi(x)$ deve ser mono valuada
- $\Psi(x)$ deve ser suave
- $\Psi(x)$, $\Psi'(x)$ e $\Psi''(x)$ devem existir e serem contínuas (pelo menos fora do pontos em que $V(x) \to \infty$)
- $\Psi'(x) \to 0$ se $V(x) \to \infty$

Equação de Schrödinger independente do tempo

Na solução da partícula livre aplicamos o método de separação de variáveis, se V não é função do tempo podemos aplicar o mesmo método de solução

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[\psi(x)\phi(t)\right] + V(x)\left[\psi(x)\phi(t)\right] = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left[\psi(x)\phi(t)\right]$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x) = i\hbar\frac{1}{\phi}\phi\frac{d\phi}{dt}$$

Igualando a E (uma constante), a equação que depende unicamente de t resulta em

$$i\hbar\frac{1}{\phi}\phi\frac{d\phi}{dt} = E$$

de onde

$$\phi(t) = e^{iEt/\hbar}$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

Enquanto que

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x) = E$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\,\psi = E\psi$$

resulta na chamada equação do Schrödinger independente do tempo, note que

$$\Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = \left[\psi e^{iEt/\hbar}\right]^* \left[\psi e^{iEt/\hbar}\right]$$
$$= \psi^*(x)\psi(x)$$

e

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x) = 1$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

Antes de continuar devemos advertir que o método de separação de variáveis só pode ser aplicado no caso em que o potencial, $V(x)$ não dependa explicitamente do tempo; em nesses termos que se obtém a densidade de probabilidade

$$\Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = \psi^*(x)\psi(x) = \psi^2(x)$$

que independe do tempo. A os estados que se obtém nessas condições são chamados de **estados estacionarios**

Postulados da Mecânica Quântica

A função de onda
O estado de um sistema é descrito tanto quanto possível pela função de onda Ψ.

A interpretação de Born
Para um sistema descrito pela função de onda, $\Psi(\mathbf{r})$, a probabilidade de encontrar a partícula no elemento de volume dV, a uma distância $\mathbf{r}$ é proporcional a $\Psi^2 dV$

Operadores em mecânica quântica
Para cada propriedade observável, H, de um sistema, existe um operador $\hat{H}$. No caso de observáveis que dependam da posição e o momento, os operadores correspondentes serão construído a partir dos operadores de posição e momento:

$$\hat{x} = x, \qquad \hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$$

Postulados da Mecânica Quântica

Valores próprios e funções próprias

Se o sistema é descrito por um função ψ que é uma função própria de $\hat{H}$ tal que

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

então o resultado da medição de H devera ser o valor próprio E

Superposição e valores esperados

Quando o valor de um observável H é medido para um sistema que é descrito a traves de uma combinação linear de funções próprias de $\hat{H}$ com coeficientes c_k

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n$$

cada medida da um dos valores próprios E_k de $\hat{H}$ terá probabilidade $\mid c_k \mid^2$

Medida Mecânica Quântica e valores esperados

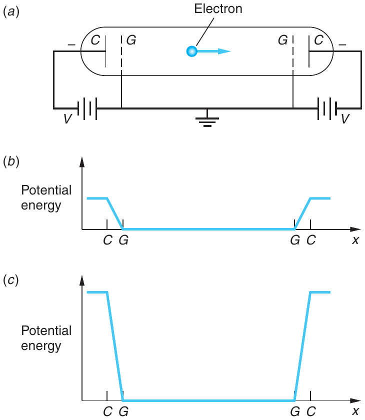
O valor esperado para a grandeza $f(x)$ é dado por

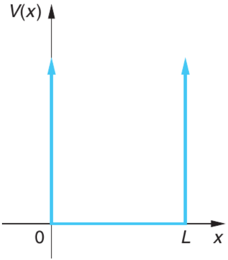
$$
\begin{aligned}
\langle f(x) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} f(x) P(x) dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} f(x) |\, \psi(x) \,|^2 \, dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) f(x) \psi(x) \, dx
\end{aligned}
$$

Alguns operadores comuns da Mecânica Quântica

Symbol	Physical quantity	Operator
$f(x)$	Any function of x—e.g., the position x, the potential energy $V(x)$, etc.	$f(x)$
p_x	x component of momentum	$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$
p_y	y component of momentum	$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}$
p_z	z component of momentum	$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}$
E	Hamiltonian (time independent)	$\frac{p_{op}^2}{2m} + V(x)$
E	Hamiltonian (time dependent)	$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$
E_k	kinetic energy	$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$
L_z	z component of angular momentum	$-i\hbar\frac{\partial}{\partial \phi}$

Exemplo - Poço infinito





$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < L \\ \infty & 0 \geq x \wedge x \geq L \end{cases}$$

Exemplo - Poço infinito

Fora da caixa, $V(x) = \infty \Rightarrow \phi(x) = 0$. Dentro da caixa $V(x) = 0$ então a equação de Schrödinger

$$-\frac{h^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

a solução dessa EDO

$$\phi(x) = C_1 \sin\left(\sqrt{\frac{2mE}{h^2}}x\right) + C_2 \cos\left(\sqrt{\frac{2mE}{h^2}}x\right)$$

aplicando condições de contorno

$$\psi_n(x) = C_1 \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

$$E_n = \frac{n^2h^2}{8m}$$

Normalizando a função de onda

$$\int_{\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_n \, dx = 1 \Rightarrow C_1 = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

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

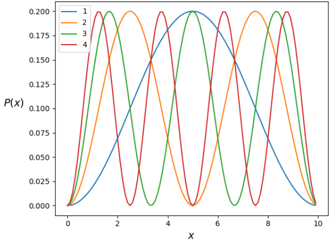
Exemplo - Poço infinito

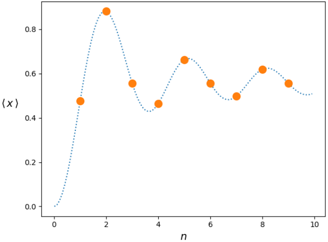
$$
\begin{aligned}
\langle x \rangle &= \int_0^L \psi_n^* x \psi_n \, dx \\
&= \frac{2}{L} \int_0^L x \sin^2\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \, dx \\
&= \frac{1}{L} \int_0^L x \, dx - \frac{1}{L} \int_0^L x \cos\left(\frac{2n\pi}{L} x\right) \, dx \\
&= \frac{1}{L} \int_0^L x \, dx - \frac{1}{4n\pi} x \sin\left(\frac{2n\pi}{L} x\right)\bigg|_0^L + \frac{1}{4n\pi} \int_0^L \sin\left(\frac{2n\pi}{L} x\right) \, dx \\
&= \frac{1}{2L} \, x^2\Big|_0^L - \frac{1}{4n\pi} x \sin\left(\frac{2n\pi}{L} x\right)\bigg|_0^L + \frac{L}{8n^2\pi^2} \int_0^{2n\pi} \sin u \, du \\
&= \frac{L}{2} - \frac{L}{4n\pi} \sin(2n\pi) + \frac{L}{8n^2\pi^2} \left[1 - \cos(2n\pi)\right] \\
&= L/2
\end{aligned}
$$

Exemplo - Poço infinito

Qual é a probabilidade de encontrar o elétron entre $x = 0$ e $x = L/3$?

$$
\begin{aligned}
\langle x \rangle &= \int_0^{L/3} \psi_n^* x \psi_n \, dx \\
&= \frac{2}{L} \int_0^{L/3} x \sin^2\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \, dx \\
&= \frac{1}{L} \int_0^{L/3} x \, dx - \frac{1}{L} \int_0^{L/3} x \cos\left(\frac{2n\pi}{L} x\right) \, dx \\
&= \frac{1}{L} \int_0^{L/3} x \, dx - \frac{1}{2n\pi} x \sin\left(\frac{2n\pi}{L} x\right)\Big|_0^{L/3} + \\
&\frac{1}{2n\pi} \int_0^{L/3} \sin\left(\frac{2n\pi}{L} x\right) \, dx \\
&= \frac{1}{2L} x^2\Big|_0^{L/3} - \frac{1}{2n\pi} x \sin\left(\frac{2n\pi}{L} x\right)\Big|_0^{L/3} + \\
&\frac{L}{4n^2\pi^2} \int_0^{2n\pi/3} \sin u \, du \\
&= \frac{L}{18} - \frac{L}{6n\pi} \sin\left(\frac{2}{3} n\pi\right) + \\
&\frac{L}{4n^2\pi^2} \left[1 - \cos\left(\frac{2}{3} n\pi\right)\right]
\end{aligned}
$$





Simulação no QuVis

Exemplo - Poço infinito

$$
\begin{aligned}
\langle p_x \rangle &= \frac{\hbar}{i} \int_0^L \psi_n^* \frac{\partial}{\partial x} \psi_n \, dx \\
&= \frac{2\hbar}{iL} \int_0^L \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \frac{\partial}{\partial x} \left[\sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \right] dx \\
&= \frac{2\hbar}{iL} \frac{n\pi}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \frac{\partial}{\partial x} \cos\left(\frac{n\pi}{L} x\right) dx \\
&= 0
\end{aligned}
$$

Exemplo - Poço infinito

$$\langle p_x^2 \rangle = \frac{\hbar}{i} \int_0^L \psi_n^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \psi_n \, dx$$

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \psi_n &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial}{\partial x} \right) \psi_n \\
&= -\hbar^2 \frac{2}{L} \left(\frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial}{\partial x} \right) \sin\left(\frac{2n\pi}{L} x \right) \\
&= -\hbar^2 \frac{2}{L} \frac{n\pi}{L} \left(\frac{\partial}{\partial x} \right) \cos\left(\frac{n\pi}{L} x \right) \\
&= \hbar^2 \frac{n^2\pi^2}{L^2} \frac{2}{L} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x \right) \\
&= \hbar^2 \frac{n^2\pi^2}{L^2} \psi_n
\end{aligned}$$

assim

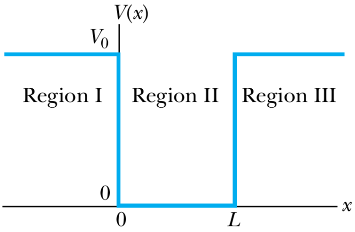
$$\begin{aligned}
\langle p_x^2 \rangle &= \hbar^2 \frac{n^2\pi^2}{L^2} \int_0^L \psi_n^* \psi_n \, dx \\
&= \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{L^2} \\
&= \frac{n^2 h^2}{4L^2}
\end{aligned}$$

Exemplo - Poço infinito

- Devemos ter claro o nosso resultado, para uma dada função de onda ψ_n, temos uma energia E_n associada. Isso significa que se nos preparamos o sistema de forma tal que $\Psi = \psi_n$ então o resultado da medida será E_n e isso acontecerá sempre que nos preparemos o sistema nesse estado.
- As funções de onda que a partícula pode assumir não se restringem a ψ_n, é possível preparar o sistema em estados que são uma combinação linear dos estados ψ_n.
- Se preparamos o sistema numa combinação de estados, por exemplo $\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_1 + \psi_2\right)$ não mas teremos certeza sobre o valor de energia que resultará numa medida, só sabemos que teremos uma probabilidade de 0,5 de obter E_1 e 0,5 de obter E_2
- Note que não obtivemos ψ_0, ou seja, o menor valor de energia que o sistema pode assumir é E_1, isso está relacionado ao fato de que se a partícula não pode ter zero energia (cinética) pois isso implicaria que estaria parada em algum lugar e com momento zero, isso seria uma violação ao principio de incerteza. Este tipo de comportamento (energia de ponto zero) acontece em todos os sistemas confinados.

Exemplo - Poço Finito

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & 0 \leq x \quad \text{região I} \\ 0 & 0 < x < 0 \quad \text{região II} \\ V_0 & 0 \geq x \quad \text{região I} \end{cases}$$



Para as regiões I e III a equação de Schrödinger assume a forma

$$-\frac{\hbar}{2m}\frac{1}{\psi}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E - V_0$$

Utilizando $\alpha^2 = 2m\left(V_0 - E\right)/\hbar$, podemos reescreve

$$d^2\psi/dx^2 = \alpha^2\psi$$

Levando em consideração o fato de que $\psi \to 0$ para $x \leq 0$ e $x \geq L$, propomos como solução

$$\begin{array}{lll} \psi_I(x) = Ae^{\alpha x} & 0 \leq x & \text{região I} \\ \psi_{II}(x) = Be^{-\alpha x} & x \geq L & \text{região III} \end{array}$$

Exemplo - Poço Finito

Dentro do poço de potencial, onde $V(x) = 0$, a equação da onda é

$$d^2\psi/dx^2 = -k^2\psi, \qquad k = \sqrt{(2mE)/\hbar^2}$$

como solução propomos

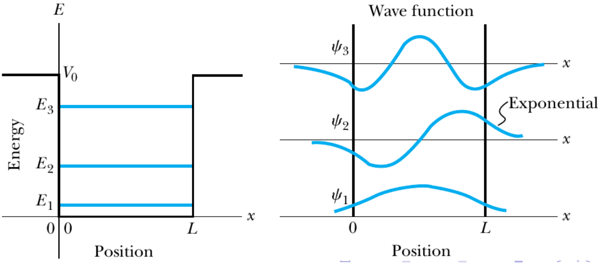
$$\psi_{II}(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx}, \qquad 0 < x < L$$

As condições de contorno que devem ser satisfeitas são

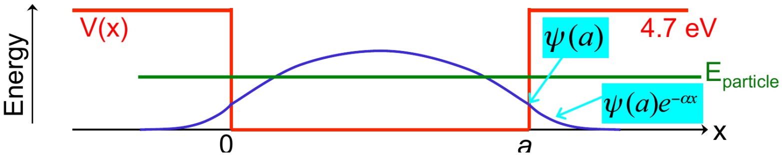
$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \quad \text{e} \quad \psi_{II}(L) = \psi_{II}(L)$$

O que resulta numa função de onda continua nas fronteiras.

Note que ψ não é zero fora da caixa



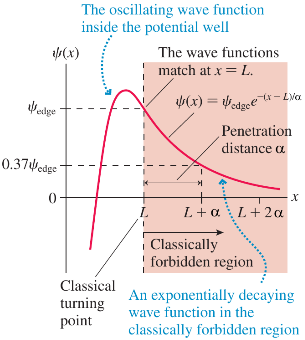
Exemplo - Poço Finito



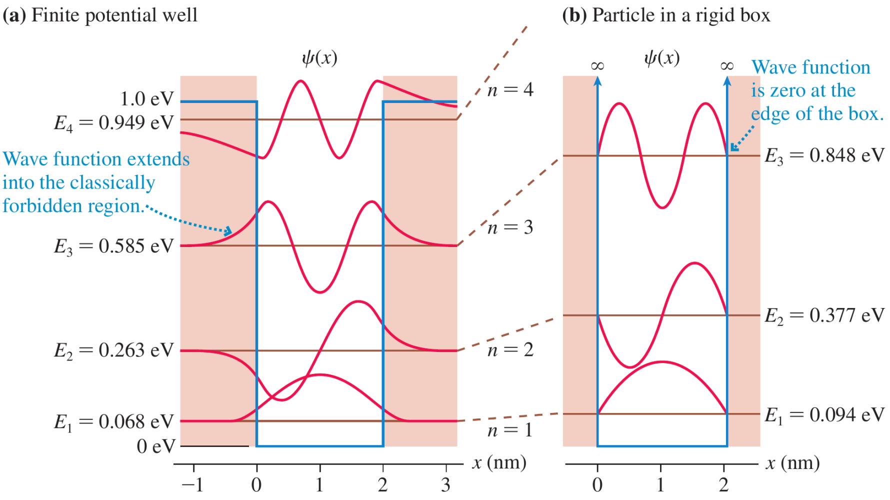
Observe que

$$\lambda = \frac{1}{\alpha} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m\,(V_0 - E)}}$$

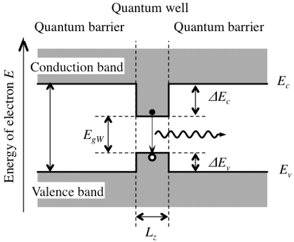
é uma medida da profundidade de penetração dentro da região proibida. Em essa distância $\psi(x)$ se reduz por um fator $1/e$.
Como exemplo consideremos um elétron com $4,7\,eV$, nesse caso a profundidade de penetração é só de $10^{-10}m$ (tamanho de um átomo)

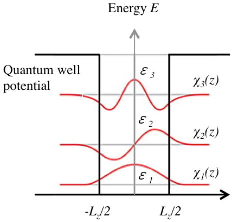


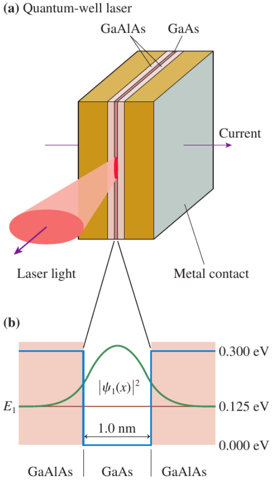
Exemplo - Comparação do Poço Infinito com o Finito



Exemplo - LASER de estado sólido







$$v_{rms} = \sqrt{\frac{3k_bT}{m}} \approx 1 \times 10^5 m/s$$

$$\lambda \approx \frac{h}{mv_{rms}} \approx 7\,nm$$

Efeitos quânticos acontecem para sistemas da ordem de 7 nm ou menos (na real até 100 nm ou menos)
Poços quânticos permitem construir “átomos” artificiais, isto é, ter controle nos nível de energia.

No poço acima, $GaAlAs$, $GaAs$, $GaAlAs$, $V_0 = 0,3eV$ e $L = 1,0nm$ resulta em um único nível de energia.

Exemplo - Núcleo atômico

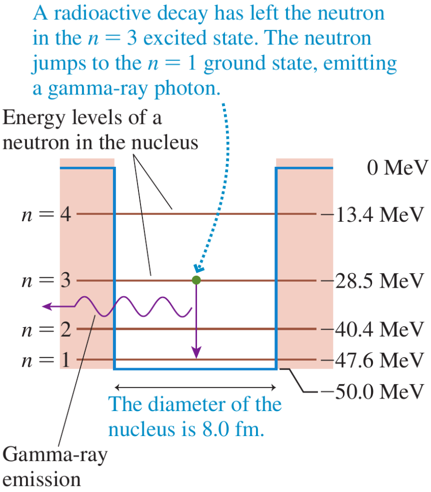
Modelemos o núcleo com $L = 8$ (próximo ao argon ou potássio) e $V_0 = 50MeV$. Consideremos um nêutron exitado em $n = 3$, da figura vemos que

$$E_{\text{fóton}} = E_3 - E_1$$
$$= 19,1\,MeV$$

de onde

$$\lambda = \frac{c}{f} = \frac{hc}{E_{\text{fóton}}} = 6,5 \times 10^{-5}\,nm$$

o que corresponde a fótons na região da radiação Gamma.



Três dos quatro níveis energéticos permitidos dentro de um poço de potencial nuclear

O oscilador harmônico Quântico

Suponhamos $V(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$, então

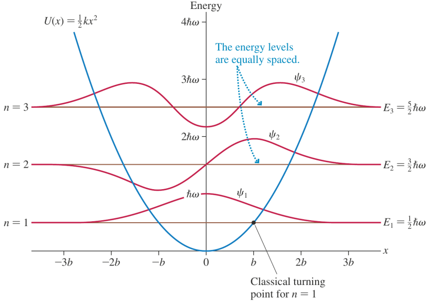
$$-\frac{h^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 x = E\psi$$

a qual pode ser resolvida e obtermos

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \qquad n = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots$$

de onde temos a energia de ponto zero dada por $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$, enquanto que as funções de onda são dadas por

$$\psi_n(x) = C_n e^{-m\omega x^2/2\hbar} H_n(x)$$



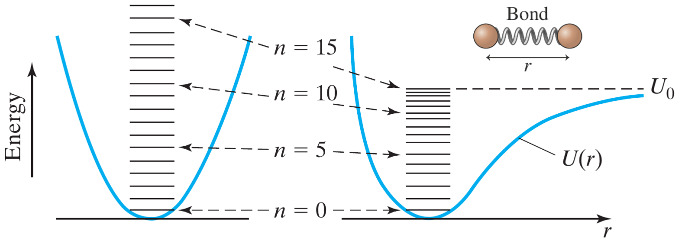
Pode ser mostrada a seguinte regra de seleção para as transições entre estados

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n\, x\, \psi_m\, dx = 0 \quad \text{a menos que}$$

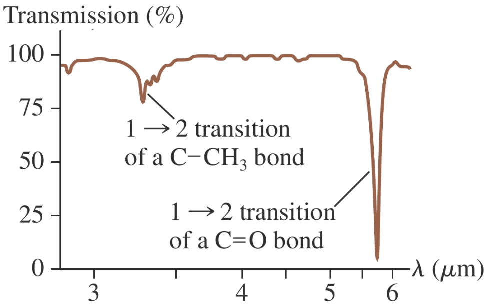
$$n = m \pm 1$$

ou $\Delta n = \pm 1$

O oscilador harmônico Quântico

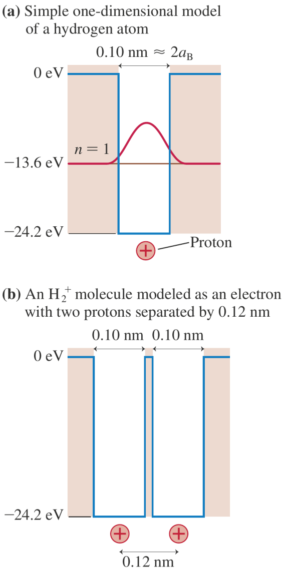


Espectro de absorção da acetona. Acontece na região infravermelha. Temos duas transições correspondente a transições dos estados $1 \rightarrow 2$, uma corresponde a vibração $C - CH_3$ em $\lambda = 3,3\,cm$, e outra $C = O$ em $\lambda = 5,8\,cm$

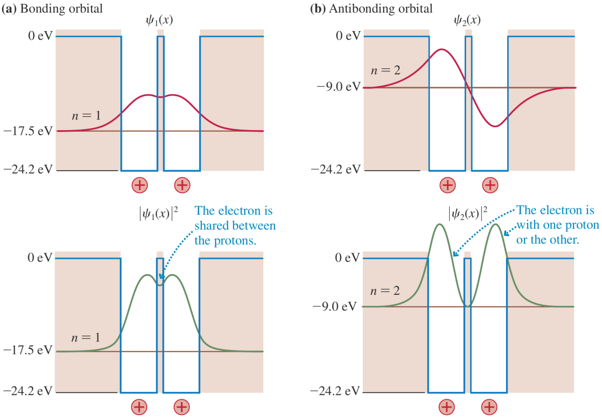


Exemplo - Ligação covalente

Uma aproximação ao átomo de hidrogênio é via um potencial quadrado com profundidade de $V_0 = -24,2eV$ e $L = 2a_B$. Essa escolha resulta em um primeiro estado exitado de $E_1 = E_{0B} = -13,6eV$



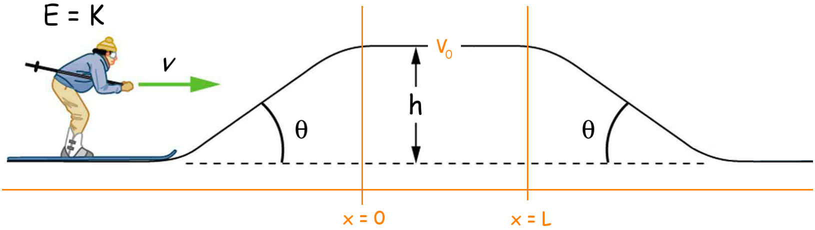
Exemplo - Ligação covalente



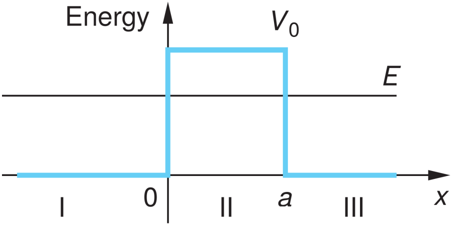
$$E_{mol} = E_{p-p} + E_{elec} = \begin{cases} 12,0eV - 17,5eV & = & -5,5eV & n = 1 \\ 12,0eV - 9,0eV & = & +3,0eV & n = 2 \end{cases}$$

Note que a energia para $n = 1$ é negativa (sistema ligado) enquanto que para $n = 2$ é positivo (não ligado)

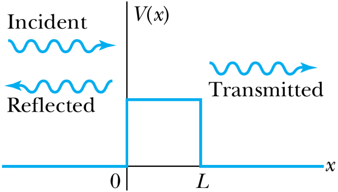
Barreira de Potencial



Considere uma partícula com energia E se aproximando de uma barreira de potencial com altura V_0, sendo que qualquer outro lugar o potencial é zero.



Barreira de Potencial, $E > V_0$



$$\begin{array}{llll} \text{I} & V = 0 & \dfrac{d^2\psi_1}{dx^2} = -\dfrac{2m_pE}{\hbar^2}\psi_1 \\ \text{II} & V = V_0 & \dfrac{d^2\psi_2}{dx^2} = -\dfrac{2m_pE}{\hbar^2}(E - V_0)\,\psi_2 \\ \text{III} & V = 0 & \dfrac{d^2\psi_3}{dx^2} = -\dfrac{2m_pE}{\hbar^2}\psi_3 \end{array}$$

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} & x < 0 \\ Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} & L < x < 0 \\ Ge^{-ik_1x} & x > L \end{cases}$$

onde

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_pE}{\hbar^2}}$$
$$k_2 = \sqrt{\frac{2m_p(E - V_0)}{\hbar^2}}$$

O coeficiente de reflexão e Transmissão são dados por

$$R = \frac{|\,\psi_1(\text{refletida})\,|^2}{|\,\psi_1(\text{incidente})\,|^2} = \frac{B \cdot B}{A \cdot A}$$
$$T = \frac{|\,\psi_1(\text{transmitida})\,|^2}{|\,\psi_1(\text{incidente})\,|^2} = \frac{G \cdot G}{A \cdot A}$$

$$T_{E>V} = \left[1 + \frac{V_0^2 \sin^2(k_2\,L)}{4E\,(V_0 - E)}\right]^{-1}$$

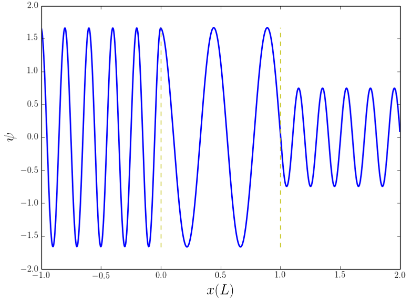
Barreira de Potencial, $E > V_0$

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1x} - \dfrac{\beta_L^*}{\alpha_L^*} Ae^{-ik_1x} & x < 0 \\ A\left[\left(1 - \dfrac{\beta_L^*}{\alpha_L^*}\right)\cos k_2x + i\dfrac{k_1}{k_2}\left(1 + \dfrac{\beta_L^*}{\alpha_L^*}\right)\sin k_2x\right] & 0 < x < L \\ \dfrac{A}{\alpha_L^*} e^{ik_1(x-L)} & x > L \end{cases}$$

com

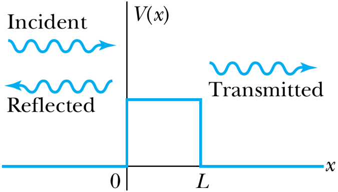
$$\alpha_L = \cos k_2L + i\frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1k_2}\sin k_2L$$

$$\beta_L = -i\frac{k_1^2 - k_2^2}{2k_1k_2}\sin k_2L$$



$V_0 = 0,3eV$, $K = 5V_0/4$ e $L = 10\,nm$

Barreira de Potencial, $E < V_0$



$$
\begin{array}{lll}
\text{I} & V = 0 & \dfrac{d^2\psi_1}{dx^2} = -\dfrac{2m_p E}{\hbar^2}\psi_1 \\
\text{II} & V = V_0 & \dfrac{d^2\psi_2}{dx^2} = -\dfrac{2m_p E}{\hbar^2}\left(E - V_0\right)\psi_2 \\
\text{III} & V = 0 & \dfrac{d^2\psi_3}{dx^2} = -\dfrac{2m_p E}{\hbar^2}\psi_3
\end{array}
$$

$$
\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1 x} + Be^{-ik_1 x} & x < 0 \\ Ce^{ik_2 x} + De^{-ik_2 x} & L < x < 0 \\ Ge^{ik_2 x} + He^{-ik_1 x} & x > L \end{cases}
$$

Os coeficientes de Transmissão é dados por

$$
T_{E<V} = \left[1 + \frac{V_0^2 \sinh^2\left(k_2\, L\right)}{4E\left(V_0 - E\right)}\right]^{-1}
$$

onde

$$
k_1 = \sqrt{\frac{2m_p E}{\hbar^2}}
$$

$$
k_2 = \sqrt{\frac{2m_p\left(V_0 - E\right)}{\hbar^2}}
$$

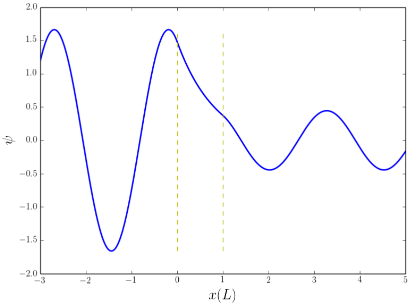
Barreira de Potencial, $E > V_0$

$$\psi_{E<V}(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1 x} - \dfrac{\beta_L^*}{\alpha_L^*} Ae^{-ik_1 x} & x < 0 \\ A\left[\left(1 - \dfrac{\beta_L^*}{\alpha_L^*}\right)\cosh k_2 x + i\dfrac{k_1}{k_2}\left(1 + \dfrac{\beta_L^*}{\alpha_L^*}\right)\sinh k_2 x\right] & 0 < x < L \\ \dfrac{A}{\alpha_L^*} e^{ik_1(x-L)} & x > L \end{cases}$$

com

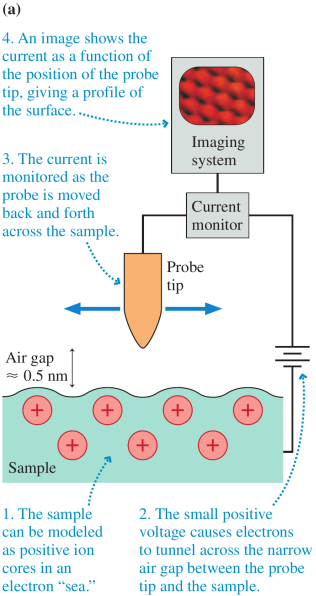
$$\alpha_L = \cosh k_2 L + i\frac{k_1^2 - k_2^2}{2k_1 k_2}\sinh k_2 L$$

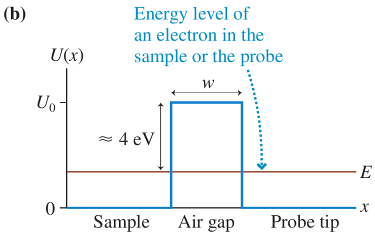
$$\beta_L = -i\frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1 k_2}\sinh k_2 L$$



$V_0 = 0,3eV$, $K = 8V_0/10$ e $L = 10\,nm$

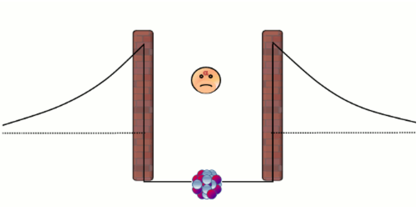
Aplicação - Microscópio de Tunelamento





Em essência consiste de um efeito fotoelétrico no qual a função trabalho é $\Phi \approx 4eV$. O fóton que é emitido pela ponta na direção da superfície tem energia menor do que $4eV$, mas como a largura da barreira (de ar) é fina, os elétrons podem tunelar em direção à ponta.

Aplicação - Decaimento alfa



Uma das aplicações mais impressionantes é a dada por Gamow para explicar o decaimento α dos átomos. O processo consiste no decaimento de núcleos pesados em núcleos menos pesados via a emissão de partículas α, átomos de He^4. Usando uma notação compacta podemos escrever

$$ {}^{Z}_{N}X^{A} \longrightarrow {}^{(Z-2)}_{(N-2)}X^{(A-4)} + {}^{2}_{2}He^{4} $$

onde Z, N, e A são, respectivamente, o número de prótons, nêutrons e o total de nucleões na especie nuclear denotada por X (o núcleo pai) ou Y (o núcleo filho). Tipicamente o valor das grandezas envolvidas no decaimento α estão dadas por

$$ R \sim 2-4\,F, E_\alpha \sim 2-8\,MeV, $$
$$ Z \sim 50-100 $$

Átomo de Hidrogênio

Como sabemos o átomo de hidrogênio consiste de um eletron sujeito ao potencial V gerado pelo próton do núcleo, dado por

$$V = -\frac{q^2}{r} \qquad q^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$$

dessa forma a equação de Schrödinger para o elétron fica escrita como

$$\left[-\frac{\hbar}{2}\left(\frac{1}{m_e}+\frac{1}{m_p}\right)\Delta_r - \frac{\hbar}{2}\frac{1}{m_e+m_p}\Delta_\xi - \frac{q^2}{r}\right]\Phi\left(r,\,\xi,\,t\right) = i\hbar\frac{\partial\Phi\left(r,\,\xi,\,t\right)}{\partial t}$$

onde r é a distância entre o elétron e o próton e ξ é a posição do centro de massas e μ é a massa reduzida. Utilizando separação de variáveis

$$\Phi\left(r,\,\xi,\,t\right) = \Psi(r,\,t)\mathcal{X}(\xi,\,t)$$

de onde

$$\begin{cases} \left(-\frac{\hbar}{2\mu}\Delta_r - \frac{q^2}{r}\right)\Psi\left(r,\,t\right) & = i\hbar\frac{\partial\Psi\left(r,\,t\right)}{\partial t} \\ \frac{\hbar}{2M}\Delta_\xi\,\mathcal{X}\left(\xi,\,t\right) & = i\hbar\frac{\partial\mathcal{X}\left(\xi,\,t\right)}{\partial t} \end{cases}$$

Átomo de Hidrogênio

Agora vamos separar a parte temporal da espacial da equação para o elétron (já que V não depende do tempo) utilizando

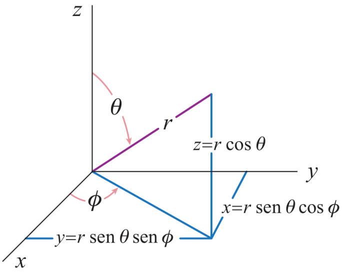
$$\Psi = \psi(x) e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

de onde

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{q^2}{r}\right)\psi = 0$$

Dada a simetria do problema é adequado trabalhar no sistema de coordenadas esféricas:

$$x = r\cos\theta\sin\phi$$
$$y = r\cos\theta\cos\phi$$
$$z = r\sin\theta$$



O que resulta em

$$\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right]\psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{q^2}{r}\right)\psi = 0$$

Átomo de Hidrogênio - Sol. Angular

Propomos uma primeira separação de variáveis

$$\psi\,(r,\,\theta,\,\phi) = R(r)Y(\theta,\,\phi)$$

que resulta em uma equação só com a parte radial

$$\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr} + \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left(E + \frac{q^2}{r}\right) = \lambda R$$

e outra só com a parte angular (θ ângulo polar e ϕ ângulo azimutal)

$$\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{d^2Y}{d\phi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{dY}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{dY}{d\theta}\right) = -\lambda Y$$

Para esta equação propomos uma nova separação de variáveis

$$Y(\theta,\,\phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

que resulta em

$$\frac{1}{\Theta}\left[\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{dY}{d\theta}\right) + \lambda\Theta\sin^2\theta\right] = -\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}$$

que nos leva a duas outras EDOs, uma para parte polar

$$\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{dY}{d\theta}\right) + \lambda\Theta\sin^2\theta = m^2\Theta$$

e para parte azimutal

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = -m^2\Phi$$

que tem por solução

$$\Phi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(im\phi\right)$$

onde

$$m \in \mathbb{Z} = 0,\,\pm1,\,\pm2,\,\ldots$$

é conhecida como número quântico magnético.

Átomo de Hidrogênio - Sol. Angular

Para solucionar a EDO paras a parte polar devemos aplicar a substitução de variáveis $w = \cos\theta$ o que explicita a equação como sendo a EDO associada de Legendre

$$\frac{d}{dw}\left((1-w^2)\frac{dP}{dw}\right) + \left[\lambda^2 - \frac{m^2}{1-w^2}\right]P = 0$$

que é a equação diferencial da função associada de Legendre, a qual, utilizando a relação de Rodriguez

$$P_l^m(w) = (-1)^m(1-w^2)^{\frac{m}{2}}\frac{\mathrm{d}^m P_l}{\mathrm{d}w^m}$$

nos leva à equação de Legendre, que tem por solução

$$P_l(w) = \left(a_0\sum_{k=0}^{\infty}\frac{a_{2k}}{a_0}w^{2k} + a_1\sum_{k=1}^{\infty}\frac{a_{2k+1}}{a_1}w^{2k+1}\right)$$

onde a relação de recorrência

$$\frac{a_{k+2}}{a_k} = \frac{(k+m)(k+m+1)-\lambda^2}{(k+1)(k+2)}$$

nos leva a concluir que a série não converge o que força a estabelecer um corte exigindo que $(k+m)(k+m+1)-\lambda^2 = 0$, e se definimos $l \equiv k+m$, resulta em

$$\lambda = l(l+1)$$

Com esto, P_l resulta em um polinômio de ordem l já que $k = l - m$, isso exige que como $k \geq 0$, então $m \leq l$. Como na relação de Rodriguez tratamos com derivadas então m deve ser positivos, então

$$|\,m\,| \leq l \Rightarrow -l \leq m \leq l$$

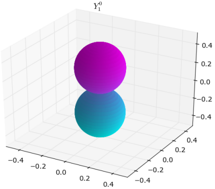
de forma que m pode assumir os valore $-l$, $-l+1$, $\ldots$, -1, 0, 1, $\ldots$, $l-1$, l

Átomo de Hidrogênio - Sol. Angular

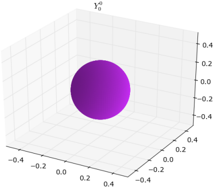
Reunindo os resultado anteriores e calculando a condição de normalização obtemos

$$Y_{lm}\,(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{2(l+\mid m\mid)!}{(l-\mid m\mid)!(2l+1)}}\;P_l^m(\cos\theta)\exp\,(im\phi)$$

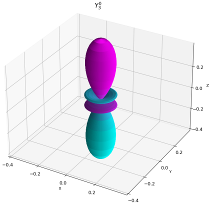
Estas funções são chamadas de harmônicos esféricos; são funções ortonormalizadas de forma que podem expressar estados diferentes da função de onda



$$Y_{1,0}(\theta,\phi) = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}\cos\theta$$



$$Y_{0,0}(\theta,\phi) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$



$$Y_{3,0}(\theta,\phi) = \frac{\sqrt{7}\left(5\cos^2(\theta) - 3\right)\cos(\theta)}{4\sqrt{\pi}}$$

Átomo de Hidrogênio - Sol. Radial

A EDP de Schrödinger para o átomo de hidrogênio em coordenadas esféricas é

$$\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right]R(r)Y(\theta,\,\phi) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{q^2}{r}\right)R(r)Y(\theta,\,\phi)=0$$

$$Y(\theta,\,\phi)\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\right]R(r)+L^2R(r)Y(\theta,\,\phi)+Y(\theta,\,\phi)\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{q^2}{r}\right)R(r)=0$$

$$Y(\theta,\,\phi)\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\right]R(r)-\left[\frac{l(l+1)}{r^2}\right]Y(\theta,\,\phi)R(r)+Y(\theta,\,\phi)\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{q^2}{r}\right)R(r)=0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\right]R(r)+\left[\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}-\frac{q^2}{r}\right]R(r)=E\,R(r$$

se supomos que, $u(r)\equiv r\,R$, e substituirmos na EDP, chegamos

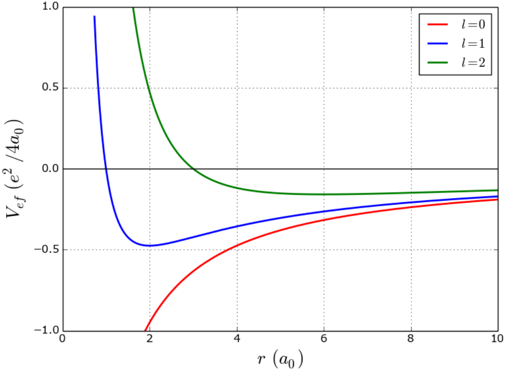
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dr^2}+\left[\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}-\frac{q^2}{r}\right]u=E\,u$$

que é nossa EDO radial

Átomo de Hidrogênio - Sol. Radial

Admitamos que

$$V_{\text{ef}} \equiv \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{q^2}{r}$$



onde

$$\frac{\hbar^2}{2m} = 6,104263784201592\times^{-39}\,J\,m^2$$

$$\frac{q^2}{r} = 2,307077352370616\times 10^{-28}\,J\,m$$

Analisando o comportamento assintótico como sol. a EDO radial obtemos

$$u_{r\to\infty} = A_2 e^{\lambda r} + B_2 e^{-\lambda r}$$

onde

$$\lambda = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Átomo de Hidrogênio - Sol. Radial

Como solução geral para a EDO radial propomos uma solução por séries finita (N termos)

$$u(r) = r^{l+1} e^{-\lambda r} \sum_{k=0}^{N} A_k r^k$$

e para facilitar os cálculos propõe-se a mudança de variável

$$u(r) = r^{l+1} f(r) e^{-\lambda r}$$

que altera a EDO para

$$\frac{d^2 f}{dr^2} + 2\left[\frac{(l+1)}{r} - \lambda\right]\frac{df}{dr} + \frac{2}{r}\left[-\lambda(l+1) + \frac{q^2 m}{\hbar^2}\right] f = 0$$

onde usamos que $E = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\lambda^2$. A série solução resulta na relação de recorrência

$$\frac{A_k}{A_{k-1}} = 2\left[\frac{\lambda(k+l) - \dfrac{q^2 m}{\hbar^2}}{k(k+2l+1)}\right]$$

Como a série deve ser zero desde o termo $N+1$

$$\lambda(N+1+l) - \frac{q^2 m}{\hbar^2} = 0$$

$$\lambda = \frac{q^2 m}{\hbar^2 (N+1+l)}$$

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = -\frac{q^2 m}{\hbar^2 (k+l)}$$

$$E = -\frac{q^4 m}{2\hbar^2 (N+1+l)}$$

Se $n = N = l + 1$,e então

$$E_n = -\frac{q^4 m^2}{2n^2\hbar^4} = -\left(\frac{q^2}{2a_0}\right)\frac{1}{n^2}$$

onde n é o número quântico principal e N o número quântico radial. Como N é um número inteiro e l é o número quântico do momento angular

$$l \leq n - 1$$

Átomo de Hidrogênio - Sol. Radial

Substituindo os resultados obtidos na EDO original

$$\frac{d^2 f}{dr^2} + 2\left[\frac{(l+1)}{r} - \lambda\right]\frac{df}{dr} + \frac{2}{r}\left[-\lambda\,(l+1) + n\lambda\right] f = 0$$

mudando de variável $\rho = 2\lambda\, r$, resulta em

$$\rho\frac{d^2 g}{d\rho^2} + \left[(2l+1) + 1 - \rho\right]\frac{dg}{d\rho} + \left[(n+l) - (2l+l)\right] g = 0$$

Que é a EDO de Laguere com solução dada por

$$L_q^p(x) = \sum_{k=0}^{q-p} \frac{(-1)^k\,(q!)^2\,x^k}{(p-q-k)!\,(p+k)!k!}$$

sendo assim, podemos retornar a nossas variáveis originais e aplicada as condições de normalização, o qual resulta

$$R_{nl} = -\left(\frac{2}{na_0}\right)^{3/2}\sqrt{\frac{2n\left[(n+l)\right]^3}{(n-l-1)!}}\left(\frac{2r}{na_0}\right)^l \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right) L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)$$

Átomo de Hidrogênio - Sol. Radial

$$R_{1,0} = 2a_0^{-3/2} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$R_{2,0} = \frac{\sqrt{2}}{4a_0^{3/2}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

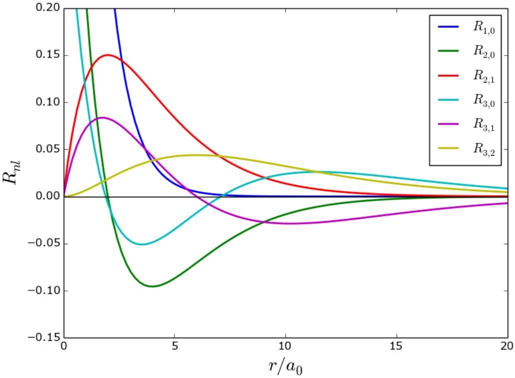
$$R_{2,1} = \frac{\sqrt{6}r}{12a_0^{5/2}} e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$R_{3,0} = \frac{2\sqrt{3}}{27a_0^{3/2}} \left(\frac{2r^2}{9a_0^2} - \frac{2r}{a_0} + 3\right) e^{-\frac{r}{3a_0}}$$

$$R_{3,1} = \frac{\sqrt{6}r}{81a_0^{3/2}} \left(-\frac{2r}{3a_0^2} + 4\right) e^{-\frac{r}{3a_0}}$$

$$R_{3,2} = \frac{2\sqrt{30}}{1215} \frac{r^2}{a_0^{7/2}} e^{-\frac{r}{3a_0}}$$

$$R_{4,0} = a_0^{-3/2} \left(-\frac{r^3}{768a_0^3} + \frac{r^2}{32a_0^2} - \frac{3r}{16a} + \frac{1}{4}\right) e^{-\frac{r}{4a_0}}$$



Átomo de Hidrogênio - Resumo

Finalmente, a função de onda total é dada por

$$\psi_{nlm_l}(r,\theta,\phi) = R_{nl}Y_{lm_l}(\theta,\phi)$$

- A energia de qualquer nível é dada por

$$E_n = -\left(\frac{q^2}{2a_0}\right)\frac{1}{n^2}, \qquad a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\,\hbar^2}{m\,e^2} = \frac{\hbar^2}{q^2 m}$$

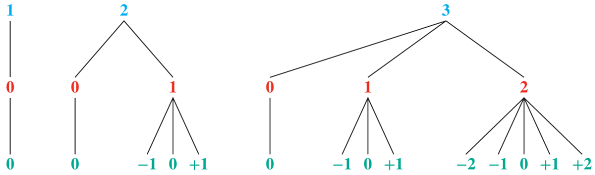
- Os níveis de energia são **degenerados** em relação a l, e cada um desse nível subníveis ou subcamadas, como também chamados, historicamente recebem a seguinte notação

l	0	1	2	3	4	5	6	...
notação	s	p	d	f	g	h	i	...

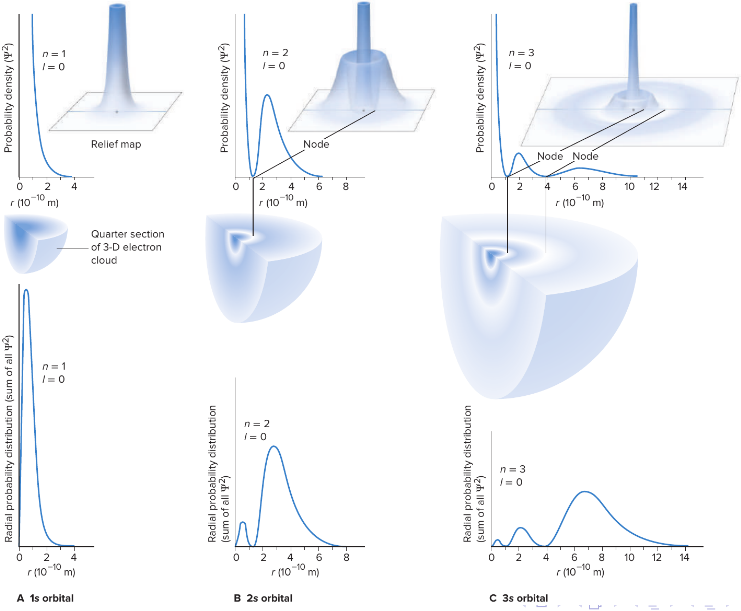
Átomo de Hidrogênio - Resumo

Table 7.2 | The Hierarchy of Quantum Numbers for Atomic Orbitals

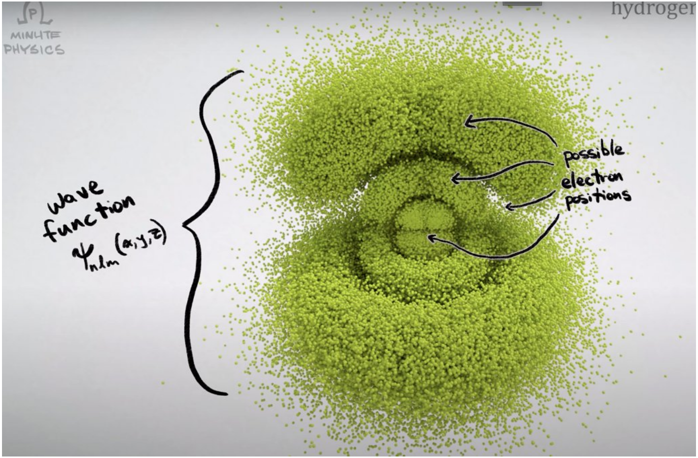
Name, Symbol (Property)	Allowed Values	Quantum Numbers
Principal, n (size, energy)	Positive integer (1, 2, 3, . . .)	
Angular momentum, l (shape)	0 to $n-1$	
Magnetic, m_l (orientation)	$-l, \ldots, 0, \ldots, +l$	



Átomo de Hidrogênio



Átomo de Hidrogênio



Simulação do átomo de hidrogênio em base a teoria de De Broglie - Bohm

Momento angular

Classicamente o momento angular está definido como

$$
\begin{aligned}
\mathbf{L} &= \mathbf{r} \times \mathbf{p} \\
&= \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ x & y & z \\ p_x & py & pz \end{vmatrix} \\
&= \left(yp_z - zp_y\right)\mathbf{i} + \left(zp_x - xp_z\right)\mathbf{j} + \left(xp_y - yp_x\right)\mathbf{k} \\
&= L_x\,\mathbf{i} + L_y\,\mathbf{j} + L_z\,\mathbf{k}
\end{aligned}
$$

utilizando o fato de que em quântica $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ podemos esperar que par quântica

$$
\begin{aligned}
L_x &= -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \\
L_y &= -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \\
L_z &= -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)
\end{aligned}
$$

passando para coordenadas esféricas

$$
\begin{aligned}
L_x &= i\hbar\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cos\phi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \\
L_y &= i\hbar\left(-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \sin\phi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \\
L_z &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}
\end{aligned}
$$

de forma que podemos escrever (utilizando algumas identidades trigonométricas

$$
L^2 = -\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)
$$

equação que é igual à EDP da parte angular do átomo de hidrogênio, dessa analise podemos escrever

$$
\begin{aligned}
L^2 Y &= -\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)Y \\
L^2 Y &= -\hbar^2\lambda^2 Y \\
L^2 Y &= l\left(l+1\right)\hbar Y
\end{aligned}
$$

Teoria da medida

A relação de dispersão em torno do valor medido é definido como

$$\left(\Delta\hat{A}\right)^2 = \langle\hat{A}^2\rangle - \langle\hat{A}\rangle^2$$

Se escolhemos um sistema no qual $\langle\hat{A}\rangle = 0$, então

$$\left(\Delta\hat{A}\right)^2 = \langle\hat{A}^2\rangle = \int \psi^* \hat{A}^2 \psi dx = \langle\psi|\hat{A}^2|\psi\rangle$$

o qual será verdade para operador $\hat{B}$. Usando a relação de Cauchy-Schwartz:

$$\langle\psi|\hat{A}\hat{A}|\psi\rangle\langle\psi|\hat{B}\hat{B}|\psi\rangle \geqslant |\langle\psi|\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle|^2$$

do qual

$$(\Delta\hat{A})^2(\Delta\hat{B})^2 \geqslant |\langle\psi|\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle|^2$$

Agora, podemos reduzir o termo à direita

$$\begin{aligned} |\langle\psi|\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle| &\geqslant |Im\left[\langle\psi|\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle\right] \\ &\geqslant \left|\frac{1}{2i}\left[\langle\psi|\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle - \langle\psi|\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle^*\right]\right| \end{aligned}$$

já que o módulo de um número complexo é maior que sua parte imaginária. Além disso,

$$f = Re(f) + iIm(f) \Rightarrow Im(f) = \frac{1}{2i}(f - f^*)$$

Como $\hat{A}$ e $\hat{B}$ são observáveis então

$$\langle\psi|\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle^* = \langle\psi|(\hat{A}\hat{B})^\dagger|\psi\rangle = \langle\psi|(\hat{B}\hat{A})|\psi\rangle$$

finalmente, utilizando este resultado podemos reescrever a inequação como

$$\begin{aligned} (\Delta\hat{A})^2(\Delta\hat{B})^2 &\geqslant \left|\frac{1}{2i}\left[\langle\psi|\hat{A}\hat{B}\middle|\psi\rangle - \langle\psi\middle|\hat{B}\hat{A}\middle|\psi\rangle\right]\right| \\ &\geqslant \left|\frac{1}{2i}\left[\langle\hat{A}\hat{B}\rangle - \langle\hat{B}\hat{A}\rangle\right]\right| \\ &\geqslant \left|\frac{1}{2i}\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle\right| \end{aligned}$$

de forma que a relação de dispersão para qualquer par de operadores hermitiano está relacionado com seu comutador via

$$(\Delta\hat{A})^2(\Delta\hat{B})^2 \geqslant \left|\frac{1}{2i}\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle\right|$$

ou seja, se dois operadores comutam então podem ser medidos simultaneamente com precisão absoluta, caso não comutem a precisão da medida tem uma cota superior

Momento angular

As componentes do momento angular não comutam entre sim

$$[x_i,\, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

$$\begin{aligned}[L_x,\, L_y] &= [(yp_z - zp_y)\,,(zp_x - xp_z)] \\ &= [yp_z,\, zp_x] - [yp_z,\, xp_z] - [zp_y,\, zp_x] + [zp_y,\, xp_z]\end{aligned}$$

como

$$\begin{aligned}[yp_z,\, xp_z] &= [y,\, x]\, p_z = 0 \\ [zp_y,\, zp_x] &= z\,[p_y,\, p_x] = 0 \\ [yp_z,\, zp_x] &= yp_z\, zp_x - zp_x\, yp_z \\ &= yp_z\, p_x z - zy\, p_x p_z \\ &= yp_x\, p_z z - yz\, p_x p_z \\ &= yp_x\, p_z z - yp_x\, zp_z \\ &= yp_x\,(p_z z - zp_z) \\ &= yp_x\,[p_z,\, z] \\ &= -i\hbar y p_x\end{aligned}$$

então

$$\begin{aligned}[L_x,\, L_y] &= i\hbar\,(xp_y - yp_x) \\ &= iL_z\end{aligned}$$

da mesma forma

$$[L_y,\, L_z] = iL_x$$

$$[L_z,\, L_x] = iL_y$$

Por outro lado, é possível verificar

$$\begin{aligned}\left[L^2,\, L_z\right] &= \left[L_x^2,\, L_z\right] + \left[L_y^2,\, L_z\right] \\ &\quad + \left[L_z^2,\, L_z\right]\end{aligned}$$

de forma que os harmônicos esféricos que são autofunções de L^2 também são autofunções de L_z. Por definição

$$L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$L_z^2 = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$$

$$L_z^2\Phi = -\hbar^2\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2}$$