

# Quantização

---

**Matheus Pereira,**

*Instituto de Física,  
Universidade de São Paulo,  
Cidade Universitária, São Paulo, Brasil*  
<https://matheuspereira4.github.io/>

*E-mail:* [matheus.coutinho9@usp.br](mailto:matheus.coutinho9@usp.br)

ABSTRACT: Trabalho em Progresso

---

<sup>1</sup>Corresponding author.

---

## Sumário

<b>1</b>	<b>Motivação</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Experimento de Stern-Gerlach</b>	<b>2</b>
<b>3</b>	<b>Mecânica Quântica e Álgebra Linear</b>	<b>4</b>
<b>4</b>	<b>Sistema de Spin <math>1/2</math></b>	<b>7</b>
<b>5</b>	<b>Experimento da dupla fenda</b>	<b>8</b>
<b>6</b>	<b>Quantização Canônica e Autofunções de Momento</b>	<b>9</b>
<b>7</b>	<b>Equação de Schrodinger</b>	<b>13</b>
7.1	Exemplo: Partícula confinada	15
7.2	Evolução Temporal	18
<b>8</b>	<b>Partícula Livre</b>	<b>19</b>
<b>9</b>	<b>Oscilador Harmônico</b>	<b>21</b>
<b>10</b>	<b>Momento Angular</b>	<b>22</b>
<b>11</b>	<b>Átomo de Hidrogênio</b>	<b>23</b>

---

## 1 Motivação

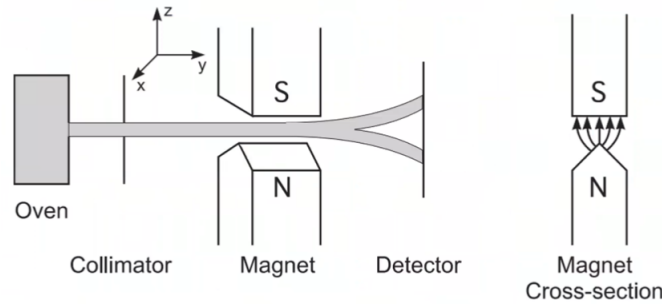
A forma de se resolver problemas associados a dinâmica e interação entre corpos, desenvolvida por Newton, nos permite, uma vez conhecidas as interações as quais o sistema está submetido e o seu estado inicial, prever a sua dinâmica. Identificamos as interações através das forças que agem sobre o sistema, ou o potencial, e a relacionamos com a alteração no estado de movimento do sistema, isto é

$$m \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = \mathbf{F} = -\nabla V \quad (1.1)$$

Pretendo nessa seção dar uma motivação para as profundas mudanças na forma de se pensar um problema de física nas escalas em que o protocolo clássico falha. A mecânica de Newton possui uma vastidão de aplicações e nos permite ter uma excelente compreensão dos fenômenos cotidianos, mas ela não tem sucesso em descrever a física de objetos muito velozes ou muito pequenos (escalas subatômicas), me concentrarei em desenvolver as bases da física de objetos microscópicos, a física Quântica. A mecânica quântica possui uma formulação consideravelmente mais complicada, esse texto tem por objetivo clarificar os modelos matemáticos, fundamentando-os com os resultados experimentais.

## 2 Experimento de Stern-Gerlach

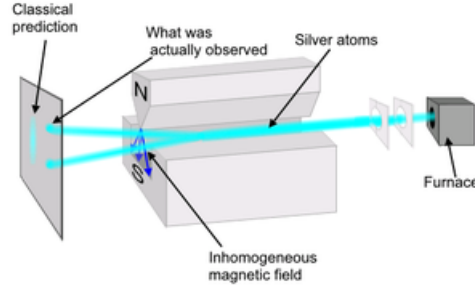
As principais ferramentas matemáticas usadas na mecânica quântica serão desenvolvidas com base no Experimento de Stern-Gerlach. Conforme a figura abaixo, o experimento consiste no lançamento de átomos neutros em um campo magnético não-uniforme.



**Figura 1.** Caption

Como os átomos são neutros, espera-se um desvio leve em suas trajetórias, que é resultado da interação do momento de dipolo magnético do átomo com o campo não uniforme. O momento de dipolo magnético do elétron está diretamente relacionado ao momento angular. E a posição do elétron no detector está associado ao alinhamento do momento angular com o campo magnético.

Do ponto de vista clássico, o átomo poderia alcançar qualquer posição no detector, mas o que realmente se observa é que parte dos átomos é detectado na posição  $+z$  e outra parte na posição  $-z$ , nenhuma alcançar uma posição intermediária, conforme se vê na figura abaixo



**Figura 2.** Caption

Esse resultado chama a atenção para o fato de que as grandezas físicas, no caso aqui o momento angular, podem ser discretas. Outra referência para essa possibilidade é a explicação para o efeito fotoelétrico proposta por Einstein e que lhe rendeu o prêmio Nobel de física de 1921, onde ele argumentou que a energia de um fóton, a partícula de luz, só pode ser múltipla de uma constante fundamental e da frequência de oscilação da onda associada a esse fóton

$$E = \hbar\omega \quad (2.1)$$

Atendemo-nos agora ao experimento de Stern-Gerlach, que demonstrou que o momento angular só pode ter componente  $+z$  ou  $-z$ , isto é  $L = \pm 1$

### 3 Mecânica Quântica e Álgebra Linear

Os ingredientes básicos necessários para a formulação de um modelo que nos permita fazer presições em mecânica quântica são os seguinte enunciados

- O estado de um sistema é inteiramente caracterizado por um vetor  $|\Psi\rangle$  no espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$
- Os observáveis físicos são representados por um operadores Hermitianos agindo no espaço de estados
- Os valores possíveis de se obter na medição de um observável são os autovalores associados aos operadores correspondentes
- A probabilidade de se fazer uma medição de um observável  $A$  e se obter o valor  $a_k$ , dado que o sistema encontra-se no estado  $|\Psi\rangle$  é  $|\langle a_k|\Psi\rangle|^2$

Dado um sistema física no estado  $|\Psi\rangle$ , podemos representá-lo numa base formada pelos autoestados de um observável qualquer, fazemos isso usando a relação de completeza da base dos autoestados

$$\sum_k |k\rangle \langle k| = \mathbb{1}$$

Inserindo a relação de completeza no estado  $|\Psi\rangle$  obtemos  $\mathbb{1}|\Psi\rangle = |\Psi\rangle$

$$|\Psi\rangle = \sum_k |k\rangle \langle k|\Psi\rangle = \langle k|\Psi\rangle |k\rangle$$

Definimos  $c_k = \langle k|\Psi\rangle$

$$|\Psi\rangle = \sum_k c_k |k\rangle \tag{3.1}$$

Essa equação nos diz que o estado  $|\Psi\rangle$  é uma superposição de vários estados possíveis  $(|1\rangle, |2\rangle, \dots, |k\rangle)$ , ao fazer uma medição obteremos um autovalor associado a um desses estados, sendo que a probabilidade de se obter um valor associado a o estado  $|k\rangle$  é  $|c_k|^2 = |\langle k|\Psi\rangle|^2$

Pode ocorrer de um observável não ter um espectro discreto, isto é, existem um contínuo de valores possíveis de se obter ao medir esse observável, nesses casos a somatória deve ser substituída por uma integração. Um exemplo de observável de espectro contínuo é a posição  $X$ , então se quisermos escrever o estado do sistema como uma superposição de autoestados de posição nós usamos a seguinte relação de completeza

$$\int d\mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}| = \mathbb{1}$$

E a inserimos no estado  $\mathbb{1}|\Psi\rangle = |\Psi\rangle$

$$|\Psi\rangle = \int d\mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}|\Psi\rangle = \int d\mathbf{x} \langle \mathbf{x}|\Psi\rangle |\mathbf{x}\rangle$$

Agora o coeficiente  $\langle \mathbf{x}|\Psi\rangle$  não pode ser escrito simplesmente como uma constante para cada índice  $\mathbf{x}$ ,  $c_{\mathbf{x}}$ , mas sim como uma função de  $\mathbf{x}$ , já que  $\mathbf{x}$  é uma variável contínua,  $\langle \mathbf{x}|\Psi\rangle = \Psi(\mathbf{x})$ . A função  $\Psi(\mathbf{x})$  é frequentemente chamada de função de onda do sistema

$$|\Psi\rangle = \int d\mathbf{x} \Psi(\mathbf{x}) |\mathbf{x}\rangle$$

De forma análoga a equação (3), a equação (4) nos diz que o estado  $|\Psi\rangle$  é uma superposição de um contínuo de estados  $|\mathbf{x}\rangle$  possíveis, e que ao fazer uma medição da posição do sistema obtemos um valor associado ao um desses estados, com a probabilidade de se obter um valor  $\mathbf{x}'$  associado ao estado  $|\mathbf{x}'\rangle$  com probabilidade

$$\text{Prob}(\mathbf{x} = \mathbf{x}') = |\langle \mathbf{x}'|\Psi\rangle|^2 = |\Psi(\mathbf{x}')|^2$$

Multiplicando a equação (3) por  $\langle \mathbf{x}|$ , obtemos a projeção do estado  $|\Psi\rangle$  na base de posição

$$\langle \mathbf{x}|\Psi\rangle = \sum_k c_k \langle \mathbf{x}|k\rangle$$

Denominamos o termo  $\langle \mathbf{x}|k\rangle$  como a autofunção do estado  $|k\rangle$  na base de posição, e representa a densidade de probabilidade de um sistema no estado  $|k\rangle$  ter posição  $\mathbf{x}$ ,  $\langle \mathbf{x}|k\rangle = u_k(\mathbf{x})$

$$\Psi(\mathbf{x}) = \sum_k c_k u_k(\mathbf{x}) \quad (3.2)$$

Um exemplo extremamente importante é o caso em que os estados  $|n\rangle$  representa autoestados de momento

$$\mathbf{p}|\mathbf{p}'\rangle = p'|\mathbf{p}'\rangle$$

Como o momento é em geral contínuo, representamos o estado do sistema como uma integral sobre os autoestados de momento

$$|\Psi\rangle = \int d\mathbf{p} |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}|\Psi\rangle$$

$\langle \mathbf{p}|\Psi\rangle = \phi(p)$  representa a densidade de probabilidade de um sistema no estado  $|\Psi\rangle$  ter momento  $\mathbf{p}$ , é uma quantidade análoga a função de onda mas agora no espaço de momento

$$|\Psi\rangle = \int d\mathbf{p} \phi(p) |\mathbf{p}\rangle$$

Agora projetamos na posição

$$\langle \mathbf{x} | \Psi \rangle = \int d\mathbf{p} \phi(\mathbf{p}) \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle$$

De forma análoga, denominamos o termo  $\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle$  como a autofunção do estado  $|\mathbf{p}\rangle$  na base de posição, e representa a densidade de probabilidade de um sistema no estado  $|\mathbf{p}\rangle$  ter posição  $\mathbf{x}$ ,  $\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = \Psi_p(\mathbf{x})$ .

Por fim, obtemos uma expressão análoga a equação (4) para o caso em que a base  $|n\rangle$  é uma base contínua de autoestados de momento

$$\Psi(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{p} \phi(\mathbf{p}) \Psi_p(\mathbf{x})$$

## 4 Sistema de Spin $1/2$



## 5 Experimento da dupla fenda

## 6 Quantização Canônica e Autofunções de Momento

Como já comentado, uma das radicais mudanças da mecânica clássica para a Quântica é que na Quântica os observáveis são descritos por operadores hermitianos atuando no espaço de estados. Na mecânica clássica os observáveis são quantidades que expressam alguma característica do estado de movimento do sistema, como o momento, posição e momento angular, ou alguma interação com o sistema, como o potencial, a força, ou a energia fornecida ao sistema. Essas quantidades de naturezas distintas se relacionam através das equações dinâmicas.

Na mecânica quântica é fundamental entender como os operadores agem nos estados, para assim determinar quais os valores possíveis de serem medidos e as probabilidades a eles associadas. Determinando a forma do operador somos capazes de conhecer os seus autoestados através da resolução de uma equação diferencial ou através de uma equação matricial, dependendo se o operador possui um espectro contínuo ou discreto.

Quando se fala de torna um sistema qualquer em um sistema quântico uma forma tradicional de se fazer isso é impondo as relações de comutação, esse método é chamado de quantização canônica.

$$[\mathbf{x}, \mathbf{p}] = i\hbar$$

Tentarei demonstrar a importância dessa relação, a partir dela será possível obter uma expressão para o operador  $\mathbf{p}$  e com isso determinar as autofunções de momento na base de posição  $\Psi_p(\mathbf{x})$

Partindo da equação de autovalores de  $\mathbf{p}$

$$\mathbf{p} |\mathbf{p}\rangle = p |\mathbf{p}\rangle$$

Multiplicamos a equação pela identidade duas vezes

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{x}'' |\mathbf{x}''\rangle \langle \mathbf{x}''| \mathbf{p} \int d\mathbf{x}' |\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}'| \mathbf{p} \rangle &= p \int d\mathbf{x}'' |\mathbf{x}''\rangle \langle \mathbf{x}''| \int d\mathbf{x}' |\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}'| \mathbf{p} \rangle \\ \int d\mathbf{x}'' \int d\mathbf{x}' |\mathbf{x}''\rangle \langle \mathbf{x}''| \mathbf{p} |\mathbf{x}'\rangle \Psi_p(\mathbf{x}') &= p \int d\mathbf{x}'' \int d\mathbf{x}' |\mathbf{x}''\rangle \langle \mathbf{x}''| \mathbf{x}' \rangle \Psi_p(\mathbf{x}') \\ \int d\mathbf{x}'' \int d\mathbf{x}' |\mathbf{x}''\rangle \langle \mathbf{x}''| \mathbf{p} |\mathbf{x}'\rangle \Psi_p(\mathbf{x}') &= p \int d\mathbf{x}' \Psi_p(\mathbf{x}') |\mathbf{x}'\rangle \end{aligned}$$

O termo  $\langle \mathbf{x}''| \mathbf{p} |\mathbf{x}'\rangle$  pode ser determinado através da relação de comutação

$$\langle \mathbf{x}''| [\mathbf{x}, \mathbf{p}] |\mathbf{x}'\rangle = \langle \mathbf{x}''| \mathbf{x} \mathbf{p} |\mathbf{x}'\rangle - \langle \mathbf{x}''| \mathbf{p} \mathbf{x} |\mathbf{x}'\rangle = i\hbar \delta(\mathbf{x}'' - \mathbf{x}')$$

$$\mathbf{x}'' \langle \mathbf{x}''| \mathbf{p} |\mathbf{x}'\rangle - \mathbf{x}' \langle \mathbf{x}''| \mathbf{p} |\mathbf{x}'\rangle = i\hbar \delta(\mathbf{x}'' - \mathbf{x}')$$

$$\langle \mathbf{x}'' | \mathbf{p} | \mathbf{x}' \rangle = i\hbar \frac{\delta(\mathbf{x}'' - \mathbf{x}')}{\mathbf{x}'' - \mathbf{x}'} = -i\hbar \frac{d}{d\mathbf{x}} \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x})$$

Agora podemos substituir o termo  $\langle \mathbf{x}'' | \mathbf{p} | \mathbf{x}' \rangle$  na expressão anterior

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{x}'' d\mathbf{x}' |\mathbf{x}''\rangle (-i\hbar) \frac{d}{d\mathbf{x}} \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \Psi_p(\mathbf{x}') &= p \int d\mathbf{x}' \Psi_p(\mathbf{x}') |\mathbf{x}'\rangle \\ \int d\mathbf{x}' (-i\hbar) \frac{d}{d\mathbf{x}'} \Psi_p(\mathbf{x}') |\mathbf{x}'\rangle &= \int d\mathbf{x}' p \Psi_p(\mathbf{x}') |\mathbf{x}'\rangle \end{aligned}$$

Obtemos enfim uma equação diferencial para  $\Psi_p(\mathbf{x})$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \Psi_p(\mathbf{x}) = p \Psi_p(\mathbf{x}) \quad (6.1)$$

É importante comentar que essa também é uma equação de autovalores e autovetores, mas, como o momento é uma variável contínua, o operador de momento não é uma matriz e sim um operador diferencial.

$$\mathbf{p} \Psi_p(\mathbf{x}) = p \Psi_p(\mathbf{x})$$

$$\mathbf{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

De qualquer forma  $\mathbf{p}$  isso continua sendo um operador agindo em um espaço vetorial, só que em um espaço de funções.

Vemos que identificar o operador de momento como uma derivação e fornecer a relação de comutação  $[\mathbf{x}, \mathbf{p}] = i\hbar$  são equivalentes, pois uma vez que o momento é identificado a relação de comutação pode ser derivada

$$\begin{aligned} [\mathbf{x}_i, \mathbf{p}_j] \Psi(\mathbf{x}) &= -i\hbar \left( \mathbf{x}_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_j} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_j} \mathbf{x}_i \right) \Psi(\mathbf{x}) \\ [\mathbf{x}_i, \mathbf{p}_j] \Psi(\mathbf{x}) &= -i\hbar \left( \mathbf{x}_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_j} \Psi(\mathbf{x}) - \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_j} \mathbf{x}_i \Psi(\mathbf{x}) \right) \\ [\mathbf{x}_i, \mathbf{p}_j] \Psi(\mathbf{x}) &= -i\hbar \left( \mathbf{x}_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_j} \Psi(\mathbf{x}) - \frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial \mathbf{x}_j} \Psi(\mathbf{x}) - \mathbf{x}_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_j} \Psi(\mathbf{x}) \right) \\ [\mathbf{x}_i, \mathbf{p}_j] \Psi(\mathbf{x}) &= -i\hbar \left( -\frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial \mathbf{x}_j} \Psi(\mathbf{x}) \right) \\ [\mathbf{x}_i, \mathbf{p}_j] \Psi(\mathbf{x}) &= i\hbar \Psi(\mathbf{x}) \delta_{ij} \end{aligned}$$

$$[\mathbf{x}_i, \mathbf{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}$$

Agora a solução da equação (5) é trivial

$$\Psi_p(\mathbf{x}) = N e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} = N \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x} \right]$$

A constante  $N$  pode ser determinada facilmente usando a condição de normalização

$$\Psi_p(\mathbf{x}) = \frac{e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

ou

$$\Psi_p(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x} \right]$$

Podemos representar o sistema com momento definido como uma superposição de autoestados de posição

$$|\mathbf{p}\rangle = \int d\mathbf{x}' |\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}' | \mathbf{p} \rangle$$

$$|\mathbf{p}\rangle = \int d\mathbf{x}' \Psi_p(\mathbf{x}') |\mathbf{x}'\rangle$$

Como já dito, o coeficiente da expansão do estado  $|\mathbf{p}\rangle$  em termos de autoestados de posição está associada à densidade de probabilidade.

Se queremos saber a probabilidade de uma partícula com momento  $\mathbf{x}$  ser encontrada em uma região  $\mathbf{x}, \mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}$  fazemos

$$\text{Prob}(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}) = \int_{\mathbf{x}}^{\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x}} |\Psi_p(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x}$$

$$\text{Prob}(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mathbf{x}}^{\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x}} \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x} \right] \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x} \right] d\mathbf{x}$$

$$\text{Prob}(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mathbf{x}}^{\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x}} d\mathbf{x}$$

$$\text{Prob}(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}) = \frac{1}{2\pi\hbar} \Delta\mathbf{x}$$

A probabilidade é constante! o que chama a atenção para o fato de que quando eu sei o momento da partícula a minha informação sobre a sua posição é mínima, pois a probabilidade é igual para qualquer região de mesmo tamanho, ou seja, a posição da partícula é totalmente indefinida.

Substituindo  $\Psi_p(\mathbf{x})$  em

$$\Psi(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{p} \phi(\mathbf{p}) \Psi_p(\mathbf{x})$$

Temos

$$\Psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int d\mathbf{p} \phi(\mathbf{p}) e^{-i\mathbf{x}\cdot\mathbf{p}/\hbar}$$

Essa expressão se assemelha muito com a transformada de Fourier da função  $\Psi(\mathbf{x})$  que é dada por

$$\Psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int d\mathbf{k} \phi(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{x}\cdot\mathbf{k}}$$

Portanto

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int d\mathbf{k} \phi(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{x}\cdot\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int d\mathbf{p} \phi(\mathbf{p}) e^{-i\mathbf{x}\cdot\mathbf{p}/\hbar}$$

A última expressão nos fornece uma relação entre o momento e o vetor de onda  $\mathbf{k}$

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$$

## 7 Equação de Schrodinger

Na mecânica clássica um sistema pode ser caracterizado por uma lagrangiana que nos permite chegar nas equações de movimento, ou podemos identificar as forças que atuam no sistema para chegar nas equações de movimento. Na mecânica quântica nós temos a equação de Schrodinger, que nada mais é do que uma equação de autovetores e autovalores para o operador Hamiltoniano, e é útil para determinar os autoestados de energia

$$\hat{H} |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle \quad (7.1)$$

Observação: a notação  $\hat{H}$  é utilizado por alguns livros para dizer que o hamiltoniano é um operador, normalmente essa notação vai sendo relaxada, nesse caso escrevi para enfatizar que essa é uma equação de autovetores e autovalores do operador hamiltoniano.

Lembrando da seção 3, sabemos que uma expressão dessa natureza nos permite encontrar quais são os possíveis valores de energia que podem ser medidos. Denotamos os autoestados de energia por  $|n\rangle$ , esses autoestados são soluções da equação (7.1), e temos que para cada  $|n\rangle$  um autovalor de energia associado  $E_n$ ,

$$\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (7.2)$$

Em geral, o estado do sistema não é caracterizado por um único autoestado de energia, mas de forma genérica por uma superposição de autoestados de energia

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \quad (7.3)$$

A probabilidade de se obter um valor  $E_n$  é dada por

$$\text{Prob}(E = E_n) = |\langle n|\psi\rangle|^2 = |c_n|^2 \quad (7.4)$$

Resta-nos agora determinar a forma do operador Hamiltoniano, para tanto usamos a expressão do operador de momento

$$\mathbf{p} = i\hbar \nabla$$

Usando agora a expressão clássica da energia

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{x})$$

Podemos substituir agora o operador de momento e assim obtemos uma expressão para o operador hamiltoniano

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x) \quad (7.5)$$

Agora aplicamos ele no estado  $|\Psi\rangle$  projetado na base de posição, ou seja, na função de onda, já que o hamiltoniano é um operador diferencial é mais conveniente trabalhar com a função de onda  $\Psi(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \Psi \rangle$ .

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V(x)\Psi = E\Psi \quad (7.6)$$

Fomos capazes de determinar a equação de Schrodinger apenas por impormos lá início as relações de comutação canônicas, são elas que nos levam a identificar o momento com um operador de derivação e que nos possibilitaram determinar a forma do operador hamiltoniano. Frequentemente na literatura quantiza-se um sistema impondo as relações de comutação, aqui fica evidente que elas realmente são a base para a formulação quântica de um sistema físico

Resolver um problema em mecânica quântica é resolver a equação de Schrodinger, determinando assim os autoestados de energia, que projetados na base de posição são escritos como funções  $u_n(x) = \langle x | n \rangle$ . A solução geral será uma superposição dos autoestados de energia

$$\Psi(\mathbf{x}) = \sum_n c_n u_n(\mathbf{x}) \quad (7.7)$$

Se o estado encontra-se em um determinado estado de energia, por exemplo  $|m\rangle$ , temos  $|\Psi\rangle = |m\rangle$ , e com isso podemos calcular a probabilidade do sistema ser encontrado em uma certa região  $x, x + \Delta x$ , pois o estado pode ser escrito na base de posição e os coeficientes serão as amplitudes de probabilidade

$$|\Psi\rangle = |m\rangle = \int d\mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x} | m \rangle = \int d\mathbf{x} u_m(\mathbf{x}) |x\rangle$$

A probabilidade será dada por

$$\text{Prob} = |u_m(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x}$$

A região considerado pode ter largura finita também, como  $[a, b]$ , nesse caso a probabilidade é

$$\text{Prob} = \int_a^b |u_m(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x}$$

### 7.1 Exemplo: Partícula confinada

Este é um exemplo muito tradicional, o sistema que consideramos é uma partícula quântica que se move livremente em uma região  $[0, L]$ , isto é, a partícula está sujeita a um potencial de forma

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{if } 0 \leq x \leq L \\ \infty, & \text{otherwise} \end{cases}$$

Equação de Schrodinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(x)\psi = E\psi$$

A equação é igual para o caso de uma partícula livre ( $V(x) = 0$ ), com a diferença de que aqui tem condições de contorno  $\psi(0) = \psi(L) = 0$

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

Definimos

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{7.8}$$

E assim obtemos a equação do oscilador harmônico,

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0$$

cuja solução é

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

Impondo que  $\psi(0) = 0$ , temos que

$$A + B = 0$$

$$\psi(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx})$$

Podemos definir uma nova constante  $C = 2iA$

$$\psi(x) = C \sin(kx)$$

Impondo que  $\psi(L) = 0$ , temos



$$\sin(kL) = 0 \Rightarrow kL = n\pi$$

Com  $n \in \mathbb{Z}$ . Qualquer múltiplo inteiro  $n$  de  $\pi$  faz  $\sin(kL) = 0$ , portanto a solução fica

$$\psi_n(x) = \langle x|n\rangle = C \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

Nos chama a atenção de que não existe uma única solução, mas sim uma soma das soluções possíveis para cada  $n$

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \sum_n c_n \psi_n \\ \psi(x) &= \sum_n c_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \\ |\psi\rangle &= \sum_n c_n |n\rangle\end{aligned}\tag{7.9}$$

Notemos que isso nos indica que o estado dessa partícula não é um autoestado de energia, ou seja, sua energia não é definida, só o que podemos dizer é que existe uma probabilidade  $|c_n|^2$  associada a cada valor de energia possível de se medir. Os autovalores de energia  $E_1, E_2, E_3, \dots, E_n$  associados a cada autoestado de energia  $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots, \psi_n$  são dados pela equação (7.8)

$$\begin{aligned}E &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \\ E_n &= \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m}\end{aligned}\tag{7.10}$$

A energia é quantizada! O sistema não pode possuir qualquer valor de energia, essa é uma propriedade puramente quântica.

O estado da partícula também não é um autoestado de momento, pois os autoestados de momento tem a forma de ondas planas, e cada autoestado possível também está associado a um possível valor de momento, já que  $p = \hbar k$

$$p_n = \frac{n\pi\hbar}{L}\tag{7.11}$$

Da equação (7.9) temos que a amplitude de probabilidade associada a cada autoestado de energia  $|n\rangle$  é  $c_n$

$$c_n = \langle n|\psi\rangle$$

Multiplicando pela identidade  $\mathbb{1}$

$$\begin{aligned}c_n &= \int dx \langle n|x \rangle \langle x|\psi \rangle \\c_n &= \int dx \psi_n^*(x) \psi(x) \\c_n &= \sqrt{\frac{2}{L}} \int dx \psi(x) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\end{aligned}$$

A probabilidade de uma partícula no estado  $|\psi\rangle$  tenha energia  $E_n$  é dada por  $|c_n|^2$ .

Se eu quiser saber qual é a probabilidade da partícula ter um momento  $p_n$ , basta escrever o estado da base de momento

$$|\psi\rangle = \sum_p a_p |p\rangle$$

A probabilidade de uma partícula no estado  $|\psi\rangle$  tenha energia  $p_n$  é dada por  $|a_n|^2$ .

$$\begin{aligned}a_p &= \langle p|\psi \rangle \\a_p &= \int dx \langle p|x \rangle \langle x|\psi \rangle \\\langle x|p \rangle = \psi_p(\mathbf{x}) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}px\right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left[-i\frac{n\pi x}{L}\right]\end{aligned}$$

A probabilidade portanto é dado por  $|\langle p|\psi \rangle|^2$ , sendo

$$\langle p|\psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \psi(x) \exp\left[i\frac{n\pi x}{L}\right]$$

Através da equação de Schrodinger fomos capazes de determinar os autoestados de energia, mas para determinarmos a probabilidade da partícula ter determinada energia ou determinado momento é preciso saber qual é o estado  $\psi(x)$  do sistema. Frequentemente é fornecido o estado inicial e com isso mais p conhecimento da evolução temporal do sistema é possível determinar todas as probabilidades que se queira, mas para tanto tenho que tratar do problema de evolução temporal na mecânica quântica. Antes de falarmos de dinâmica, tem ainda uma informação que podemos extrair dos autoestados de energia já encontrados.

Um autoestado de energia  $E_n$  foi encontrado como

$$\psi_n(x) = \langle x|n \rangle = C \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

Notemos que um produto escalar sempre está associado a uma amplitude de probabilidade, para vermos isso basta considerar que o sistema está no autoestado de energia  $|n\rangle$  e escrever esse estado na base de posição

$$|n\rangle = \int dx \langle x|n\rangle |x\rangle = \int dx \psi_n(x) |x\rangle$$

A função  $\psi_n(x) dx$  está associada a amplitude de probabilidade de uma partícula que possui energia  $E_n$  ser encontrada em uma região  $dx$ . Assim como  $\psi_n^*(x)$  está associado a amplitude de probabilidade de uma partícula em uma posição  $x$  possuir energia  $E_n$ , pois podemos escrever o problema de forma inversa, a partícula possui posição definida e escrevemos seu estado na base de energia

$$|x\rangle = \sum_n \langle n|x\rangle |n\rangle = \sum_n \psi_n^* |n\rangle$$

★ Probabilidade de uma partícula em um poço de potencial de largura  $L$  com energia  $E_2$  ser encontrada em uma região  $[a, b]$

★ Probabilidade de uma partícula em um poço de potencial de largura  $L$  situada em  $x = L/4$  possuir uma energia  $E_3$

## 7.2 Evolução Temporal

## 8 Partícula Livre

Na mecânica clássica o problema da partícula livre é sem dúvida o mais simples de todos, sua equação de movimento é  $\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}_0(t) + \mathbf{v}t$ , onde a velocidade  $\mathbf{v}$  é constante. Na mecânica quântica esse cenário muda, talvez o problema mais simples da mecânica quântica seja o da partícula confinada por um poço de potencial, o problema da partícula livre deve ser tratado com muito cuidado devido às suas peculiaridades, mas esse sistema possui um conteúdo físico muito grande.

A equação de movimento é a equação de Schrodinger com o potencial  $V(x)$  nulo

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

Ao resolver essa equação encontraremos os autoestados de energia, conforme fizemos na seção anterior. Sua solução é

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

com  $k$  definido na equação (7.8). Se lembrarmos que  $p = \hbar k$ , vemos que a solução é a soma de duas autofunções de momento, uma representando uma onda plana que se propaga para a direita e outra para a esquerda. Para efeitos práticos, podemos considerar como solução uma onda se movendo em uma única direção, então  $\psi(x) = Ae^{ikx} = Ae^{ipx/\hbar}$ .

O problema dessa solução é que ela não é normalizável

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx 1 = \infty$$

Portanto esse estado não representa nenhum sistema físico. Quando calculamos a probabilidade de uma partícula com momento bem definido estar localizada em uma região  $[x, x + \Delta x]$  encontramos que a probabilidade era constante, mas isso é estranho, pois nesse caso não temos informação nenhuma sobre a posição da partícula e isso não pode ocorrer.

Para contornarmos esse problema temos que aceitar que a partícula não pode ter momento bem definido, pelo menos não totalmente definido, ela tem que estar em uma superposição de autoestados de momento. Com base no princípio da incerteza, quanto mais eu faço superposições de autoestados de momento mais informação eu ganho a respeito da posição da partícula. Felizmente a equação de Schrodinger é linear, e nos permite escrever a solução mais geral como uma superposição de ondas planas, a forma mais geral é

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp A(p) e^{ipx/\hbar}$$

Pensando de um ponto de vista físico, os autoestados de momento são ondas planas e ao somar ondas planas elas interferem, e se interferem ao ponto de formar um pacote de onda, que se assemelha a uma partícula pontual bem localizada.

## 9 Oscilador Harmônico

O hamiltoniano de um oscilador harmônico é dado por

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2$$

Definimos novas variáveis

$$x = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X$$

$$p = \sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}} P$$

Agora podemos reescrever o hamiltoniano

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

Por fim definimos os operadores de criação e aniquilação

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(x + ip)$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(x - ip)$$

É fácil ver  $[a, a^\dagger] = 1$

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega (aa^\dagger + a^\dagger a)$$

$$H = \hbar\omega \left( aa^\dagger - \frac{1}{2} \right)$$

Conseguimos uma forma para o operador Hamiltoniano que será extremamente útil no que se segue

$$H = \hbar\omega \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \tag{9.1}$$

## 10 Momento Angular

## 11 Átomo de Hidrogênio

O hamiltoniano de um elétron em um átomo de hidrogênio é dado por

$$H = \frac{p^2}{2m} - \alpha \frac{e}{r}$$

Escrevemos a função de onda separando a parte radial e a angular

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_l^m(\theta, \phi)$$