UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA E FÍSICA

FELIPE POTENTINE DA SILVA

OS PRINCÍPIOS DA MECÂNICA QUÂNTICA E SUA APLICAÇÃO AO OSCILADOR HARMÔNICO

ALEGRE-ES
2016

FELIPE POTENTINE DA SILVA

OS PRINCÍPIOS DA MECÂNICA QUÂNTICA E SUA APLICAÇÃO AO OSCILADOR HARMÔNICO

Trabalho de conclusão de curso submetido ao curso de graduação de Licenciatura em Física da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial à obtenção do título de Licenciado em Física.
Orientador: Prof. Dr. Ronald Oliveira Francisco.

ALEGRE-ES

2016

FELIPE POTENTINE DA SILVA

OS PRINCÍPIOS DA MECÂNICA QUÂNTICA E SUA APLICAÇÃO AO OSCILADOR HARMÔNICO

Trabalho de conclusão de curso submetido ao curso de graduação de Licenciatura em Física da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial à obtenção do título de Licenciado em Física.

COMISSÃO EXAMINADORA

Dr. Ronald Oliveira Francisco
Universidade Federal do Espírito Santo
Orientador

Convidado 1
Universidade Federal do Espírito Santo

Convidado 2
Universidade Federal do Espírito Santo

ALEGRE-ES
2016

Resumo

A física quântica é o ramo da física destinado ao estudo dos sistemas subatômicos, ela consegue explicar os resultados de experimentos referentes a fenômenos que ocorrem em pequenas escalas de distâncias, os quais a física clássica é incapaz de descrever corretamente. Neste trabalho serão revisadas as principais idéias da mecânica quântica e sua aplicação ao sistema do oscilador harmônico. Mostraremos que os seus níveis de energia são discretos em vez de contínuos e que há um estado de menor energia possível que é não nula diferente do que seria previsto classicamente.

Abstract

Quantum physics is the branch of physics for the study of subatomic systems, it can explain the results of experiments concerning phenomena that occur in small scales of distances, which classical physics is unable to describe correctly. In this work we will review the main ideas of quantum mechanics and their application to the harmonic oscillator system. We will show that their energy levels are discrete instead of continuous and that there is a state of least possible energy that is nonzero instead from what would be classically predicted.

Lista de símbolos

Δ	Letra grega Delta
δ	Letra grega Delta
Ψ	Letra grega Psi
ψ	Letra grega Psi
α	Letra grega Alpha
β	Letra grega Beta
λ	Letra grega Lambda
ξ	Letra grega Ksi
π	Letra grega Pi
ϕ	Letra grega Fi
Φ	Letra grega Fi
ω	Letra grega Omega
$\sum$	Somatório
$\int$	Integral

Sumário

1 Introdução **7**

2 Ideias Fundamentais da Mecânica Quântica **9**

3 Formalismo Matemático **13**

3.1 Notação de Dirac 13

3.2 O Espaço de Hilbert 15

3.3 Observáveis 18

3.4 Autofunções de um Operador Hermiteano 20

3.5 Interpretação Estatística Generalizada e o Princípio de Incerteza 21

4 Mecânica Quântica **25**

4.1 Estados Estácionários 25

4.2 Partícula Livre 28

4.3 Poço Quadrado Infinito 32

5 Oscilador Harmônico Quântico **37**

5.1 Método Algébrico 38

6 Conclusão **45**

7 Referências **46**

1 Introdução

No início do séc. XX, os cientistas estavam eufóricos com o rumo que a física estava tomando. A física quântica podia explicar a estrutura do átomo e o decaimento alfa das substâncias radioativas, os mistérios do decaimento beta já haviam sido aparentemente resolvidos após Enrico Fermi postular a existência do neutrino (HALLIDAY D.,RESNICK R.,). A confiança que os cientistas possuíam era tanta que chegaram mencionar que graças a essas descobertas, os dois maiores problemas que eles possuíam na época poderiam ser facilmente resolvidos. Problemas estes que seriam o efeito fotoelétrico e a radiação de corpo negro. Porém, para que isso fosse possível seria necessário os fundamentos teóricos da física quântica, que nos proporciona uma nova forma de "enxergar" o mundo subatômico.

O estudo da radiação térmica emitida por corpos opacos forneceu os primeiros indícios da natureza quântica da radiação. Quando a radiação eletromagnética incide em um corpo opaco, parte é refletida e parte é absorvida. De acordo com os experimentos que eram realizados pelos cientistas daquela época, quanto maior a energia térmica de um corpo maior era a frequência da radiação emitida por ele, de acordo com a teoria que eles possuíam, se aumentássemos cada vez mais a energia térmica de um corpo, chegaria um momento que não poderíamos mais enxergá-lo a olho nu pois a radiação que ele estaria emitindo seria de uma frequência acima do espectro que o olho humano é capaz de detectar, porém havia uma discrepância entre a previsão teória e os resultados experimentais a partir da frequência próxima do violeta para a função densidade de energia em termos da frequência a uma temperatura T, os cientistas não eram capaz de explicar o porque esse fenômeno ocorria, tal fenômeno foi conhecido com catástrofe do ultravioleta. (TIPLER P., LLEWLLYN R, Fundamentos de Física)

Em 1900, o físico Max Planck após fazer algumas hipóteses, conseguiu formular uma função que estava de acordo com os resultados experimentais encontrando primeiro uma função empírica e em seguida modificando os cálculos clássicos de modo que obteria tal função. Max Planck descobriu que poderia obter a função empírica para calcular a energia média, supondo que a energia das cargas oscilantes eram uma variável discreta e proporcional a frequência da radiação emitida, dessa forma criando uma quantização da energia. Em 1905, ano em que Einstein utilizou das

mesmas ideias para poder explicar o efeito fotoelétrico juntamente com seus trabalhos da relatividadde, foi que a quantização foi realmente apreciada, sugerindo que a quantização não era apenas uma propriedade da radiação do corpo negro mas sim uma característica fundamental da radiação eletromagnética. (TIPLER P., LLEWLLYN R, Fundamentos de Física).

Através do modelo atômico de Bohr, foi possível observar que as partículas de sistemas microscópicos se movem de maneira ondulatória, como se certos aspectos de seu comportamento fossem governados pelo comportamento de uma onda de de Broglie associada, as experiências consideradas se relacionam a casos mais simples que podiam ser analisados por processos elementares, porém, era desejado ter a capacidade de tratar casos mais complicados que ocorrem na natureza. No final de 1925, as ideias de de Broglie foram ampliadas e transformadas em uma teoria completa por Erwin Schrödinger, tornando possível estudar-se tais casos (EISBERG R., RESNICK R., Física Quântica).

Esse trabalho tem como objetivo apresentar a teoria da quantização do oscilador harmônico na forma de uma revisão baseda principalmente nos livros *Mecânica Quântica, Griffthis. D* e *Quantum Mechanics, C. Cohen*, por se tratar de um modelo teórico cuja a importância e aplicação ocorre em vários ramos da física moderna, como cinética de moléculas estáveis, vibrações em estruturas cristalinas, oscilações torcionais de moléculas, oscilações em cavidades ópticas.

Escolhemos esses livros pelo fato de já estarmos familiarizados a utilizá-lo. Será feita uma breve introdução à mecânica quântica e em seguida apresentaremos o formalismo matemático que será utilizado no desenvolvimento. Faremos uma revisão sobre mecânica quântica onde também abordaremos alguns exemplos de sua aplicação, por último, desenvolveremos a solução para o oscilador harmônico quântico e discutiremos sobre os resultados encontrados quando em comparação com os resultados clássicos.

2 Ideias Fundamentais da Mecânica Quântica

Em 1924, Louis de Broglie propôs em sua tese de doutorado o dualismo onda-partícula como sendo uma propriedade da matéria e não apenas um fenômeno eletromagnético, essa era uma ideia altamente especulativa, pois na época não havia nenhum indício do caracter ondulatório de nenhum outro tipo de partícula. Sua ideia consistia em generalizar o dualismo onda-partícula proposto por Einstein, alegando que era algo que se estendia por toda a natureza. A hipótese de de Broglie é um postulado fundamental a respeito da simetria da natureza, expressando matemáticamente sua hipótese através de equações para a frequência e comprimento de ondas de matéria (conhecida por *relação de de Broglie*), da seguinte forma:

$$f = \frac{E}{h} \tag{2.0.1}$$

e

$$\lambda = \frac{h}{p}. \tag{2.0.2}$$

onde E representa a energia total da parícula, p o momento e λ chamado de *comprimento de onda de de Broglie* da partícula.

Usando uma abordagem indireta, baseada na mecânica relativística, de Broglie demonstrou que tais equações também se aplicam a partículas com massa de repouso diferente de zero e observou que essas equações levavam a interpretação física da quantização do momento angular do elétron postulada por Bohr, que dizia que a quantização equivalia a formação de uma onda estacionária.

$$mvr = n\hbar = \frac{n\hbar}{2\pi}, \text{ para } n \text{ inteiro} \tag{2.0.3}$$

$$2\pi r = \frac{nh}{mv} = \frac{nh}{p} = n\lambda = \text{circunferência da órbita.} \tag{2.0.4}$$

Parecia ser bastante promissora a ideia de explicar os estados discretos de energia da matéria em termos de ondas estacionárias, que passou a ser conhecida como ondas de matéria.

Assim como outros tipos de ondas, é necessário que algo oscile para que seja gerada uma onda, e no caso das ondas de matéria o que faz ela ter o carácter ondu-

latório é a *probabilidade de se observar a partícula* oscilar. Vamos primeiro tratar do caso clássico.

As ondas clássicas são soluções da equação de onda clássica:

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 y}{\partial t^2}. \tag{2.0.5}$$

Uma classe importante da solução da equação de onda são as ondas harmônicas que se propagam no eixo x que representaremos por estar no sentido positivo:

$$y(x,t) = y_0 \cos(kx - \omega t) = y_0 \cos 2\pi(\frac{x}{\lambda} - \frac{t}{T}) = y_0 \cos \frac{2\pi}{\lambda}(x - vt), \tag{2.0.6}$$

onde y_0 é a amplitude da onda, T o período, ω a frequência angular e $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ são o múmero de onda. A velocidade da onda é dada por $v = f\lambda$ onde λ representa o comprimento de onda.

Um dos fenômenos mais comuns de ocorrer em um sistema ondulatório, é o *pulso*. Um pulso pode ser caracterizado por um grupo de funções harmônicas de diferentes frequências e comprimentos de onda, esse grupo é conhecido como *pacote de ondas*.

Vamos considerar um pacote de onda constituido por apenas duas ondas de mesma amplitude e frequências próximas. Vamos representar os números de onda das duas ondas como sendo k_1 e k_2 respectivamente, as frequências angulares por ω_1 e ω_2 e as velocidades como sendo v_1 e v_2. A soma dessas duas ondas é o fator que representa esse pacote e é dada por:

$$y(x,t) = y_0 \cos(k_1 x - \omega_1 t) + y_0 \cos(k_2 x - \omega_2 t). \tag{2.0.7}$$

Aplicando as transformações trigonométricas chegamos em:

$$y(x,t) = 2y_0 \cos(\frac{k_2 - k_1}{2}x - \frac{\omega_2 - \omega_1}{2}t) \cos(\frac{k_1 + k_2}{2}x - \frac{\omega_1 + \omega_2}{2}t). \tag{2.0.8}$$

Como os números de onda e as frequências são muito próximos, os termos $\frac{k_1+k_2}{2}$ e $\frac{\omega_1+\omega_2}{2}$ podem ser substituidos por um k médio e um ω médio

$$y(x,t) = 2y_0 \cos(\frac{1}{2}\Delta k x - \frac{1}{2}\Delta\omega t) \cos(\bar{k})x - \bar{\omega}t). \tag{2.0.9}$$

O primeiro termo da equação em cosseno é responsável pela envoltória da soma

das duas ondas, a velocidade da onda no interior da envoltória é dada pelo termo $\frac{\bar{\omega}}{\bar{k}}$, e a velocidade de fase é associada ao segundo termo em cosseno da equação.

Agora que estamos embasados nesses fundamentos matemáticos, vamos analisar esse mesmo caso só que para os pacotes de ondas de matéria. Para o caso das ondas de matéria a grandeza análoga ao deslocamento $y(x,t)$ das ondas mecânicas é representada pelo símbolo $\Psi(x,t)$, que corresponde ao devenvolvimento das ondas eletromagnéticas, é justamente essa grandeza que está associada à probabilidade de se encontrar a partícula.

Vamos considerar, por exemplo, uma onda associada a um elétron com uma única frequência e um único comprimento de onda assim como no exemplo da onda clássica, nesse caso teremos:

$$\Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}. \tag{2.0.10}$$

Podemos encontar a velocidade de fase desta onda através das relações de de Broglie para o comprimento de onda e frequência.

$$v_p = f\lambda = \frac{E}{h}\frac{h}{p} = \frac{E}{p}. \tag{2.0.11}$$

Para o caso de uma partícula não-relativística que esteja se movendo no espaço vazio, longe de outras partículas, a única energia que ela possui é a energia cinética:

$$E = \frac{p^2}{2m}. \tag{2.0.12}$$

Dessa forma a sua velocidade de fase é dada por:

$$v_p = \frac{E}{p} = \frac{p}{2m} = \frac{v}{2}. \tag{2.0.13}$$

Essa resultado nos diz que a velocidade de fase é a metade da velocidade do elétron, portanto a velocidade de onda de matéria associada a uma partícula não é igual a velocidade da própria partícula. Para representarmos adequadamente uma partícula, uma onda de matéria deve ser localizada, portanto $\Psi(x,t)$ deve ser um pacote constituido por ondas com diferentes números de onda e frequências. É o pacote de onda $\Psi(x,t)$ que esperamos que se mova com uma velocidade igual a da partícula, cha-

mado de velocidade de grupo.

Para analisarmos melhor essa relação de função de onda e a localização, vamos considerar o famoso experimento de duas fendas. Nesse experimento a figura que aparece na tela depende da interferência entre as ondas que passam pelas fendas. Nos locais onde as ondas que passam pelas duas fendas se interferem destrutivamente não se observa nenhum ponto, já nos locais onde as ondas interferem construtivamente, se observa vários pontos. A figura de interferência depende apenas do número de fótons que chegam aos detectores. Em caso de energias mais baixas, ε^2, que é o quadrado da amplitude do campo elétrico, será proporcional à probabilidade de detectarmos o fóton em uma certa região, onde ε^2 é proporcional a energia por unidade de volume de uma onda luminosa. Na teoria ondulatória dos elétrons, a onda de de Broglie de um único elétron é descrita por uma função de onda Ψ. O quadrado do módulo de Ψ em qualquer ponto está relacionado à probabilidade de que a partícula seja encontrada no ponto, análogo a ε^2 das ondas luminosas, a grandeza $|\Psi|^2 = \Psi^*\Psi$ é proporcional à probabilidade de que um elétron seja encontrado em uma certa região do espaço. Tomando o caso unidimensional, $|\Psi|^2 dx$ é a probabilidade de encontrarmos o elétron no intervalo dx.

Os elétrons e outras partículas com massa de repouso diferente de zero tem seus movimentos descritos pela equação de onda da Mecânica Quântica (M.Q.), a equação de Schrödinger. Como a equação de onda clássica, a equação de Schrödinger relaciona as derivadas da função de onda em relação ao tempo e ao espaço dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}. \tag{2.0.14}$$

Após termos feito esse apanhado geral, podemos prosseguir com o conteúdo do trabalho demonstrando os macanismos matemáticos que serão utilizados na parte de desenvolvimento.

3 Formalismo Matemático

Nessa seção vamos descrever o formalismo matemático que sera utilizado no desenvolvimento deste trabalho, falaremos sobre a notação vetorial de Dirac, o espaço de Hilbert, observáveis, operadores hermiteanos e a interpretação estatística generalizada e princípio de incerteza.

3.1 Notação de Dirac

Comumente caracterizamos um vetor de duas dimenções utilizando os eixos x e y do plano carteziano, porém nós poderíamos caracterizar um vetor por outros eixos sem modificá-lo, apenas mudando sua notação. Em vez de representarmos por (xi, yj), podemos reescrevê-lo como sendo (xi', yj') usando uma base diferente. O estado de um sistema na M.Q. adota as mesmas características, ele é representado por um vetor , $|s(t)\rangle$ contido no espaço de Hilbert, o qual será definido posteriormente. A função de onda $\Psi(x,t)$ pode ser representada como sendo o coeficiente de uma expansão de $|s\rangle$ na base das posições,

$$\Psi(x,t) = \langle x|s(t)\rangle. \tag{3.1.1}$$

O vetor $|x\rangle$ apresenta a autofunção de $\hat{x}$ com autovalor x. A função de onda no espaço dos momentos $\Phi(p,t)$ é a expansão de $|s\rangle$ na base das autofunções dos momentos dada por

$$\Phi(p,t) = \langle p|s(t)\rangle. \tag{3.1.2}$$

O vetor $|p\rangle$ representa a autofunção de $\hat{p}$ com autovalor p.

Também podemos expressar esse vetor na base dos autoestados de energia, no qual o coeficiente da expansão $c_n(t)$ do vetor $|s\rangle$ na base dos autoestados da energia $|n\rangle$ é representado por

$$c_n(t) = \langle n|s(t)\rangle, \tag{3.1.3}$$

onde o termo n representa o n-êsimo nível de energia.

As funções Ψ, Φ e o conjunto dos coeficientes $\{c_n\}$, contêm exatamente as mesmas informações, elas são apenas três formas de descrever o mesmo vetor. Portanto,

$$\Psi(x,t) = \int \Psi(x,t)\delta(x-y)dy = \int \Phi(p,t)\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipx/\hbar}dp = \sum c_n e^{-iE_n t/\hbar}\psi_n(x). \quad (3.1.4)$$

Os operadores atuam em um vetor e o ”transformam”em outro através de transformações lineares,

$$|\beta\rangle = \hat{Q}|\alpha\rangle. \quad (3.1.5)$$

Assim como os vetores são representados com relação a uma base discreta determinada $\{|e_n\rangle\}$ para seus componentes

$|\alpha\rangle = \sum_n a_n|e_n\rangle$, com $a_n = \langle e_n|\alpha\rangle$; $|\beta\rangle = \sum_n b_n|e_n\rangle$, com $b_n = \langle e_n|\beta\rangle$,

os operadores são representados por elementos de matrizes,

$$\langle e_m|\hat{Q}|e_n\rangle \equiv Q_{mn}. \quad (3.1.6)$$

Através dessa notação podemos reescrever a eq.3.1.5 da seguinte forma:

$$\sum_n b_n|e_n\rangle = \sum_n a_n\hat{Q}|e_n\rangle \quad (3.1.7)$$

ou, considerando o produto interno com $|e_m\rangle$,

$$\sum_n b_n\langle e_m|e_n\rangle = \sum_n a_n\langle e_m|\hat{Q}|e_n\rangle, \quad (3.1.8)$$

portanto,

$$b_m = \sum_n Q_{mn}a_n. \quad (3.1.9)$$

Assim, os elementos das matrizes indicam a forma com que os componentes se transformam.

Dirac propôs dividir a notação *bracket* para o produto interno, $\langle\alpha|\beta\rangle$, em duas partes, onde $\langle\alpha|$ representa um **bra** e $|\beta\rangle$ representa o **ket**. O ket representa um vetor, e

quando o bra atua em um ket, produz um número complexo, $\langle\alpha|\beta\rangle = a + bi$. Podemos representar o bra e o ket da seguinte forma:

ket $\rightarrow \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_N \end{bmatrix}$

bra $\rightarrow [a_1^* a_2^* \cdots a_n^*]$,

de tal maneira que se houver um produto de α com β

$$\langle\alpha|\beta\rangle = [a_1^* a_2^* ... a_n^*] \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_N \end{bmatrix} = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + \cdots + a_n^* b_n.$$

O conjunto de todos os bra constituem um outro espaço vetorial, o chamado **espaço dual**.

Agora que temos essa forma de descrevermos os vetores, podemos prosseguir falando sobre o espaço de Hilbert.

3.2 O Espaço de Hilbert

O espaço de Hilbert é um espaço vetorial dotado de produto interno com noções de distância e ângulos. Esse espaço obedece uma relação de completude, que garante a existência dos limites quando esperados. O espaço de Hilbert nos proporciona que utilizemos algumas ideias intuitivas aplicadas em espaços funcionais. Um exemplo disso é a generalização dos conceitos de série de Fourier em termos de polinômios ortogonais. O formalismo matemático do espaço de Hilbert é de extrema utilidade em M.Q. ao trabalharmos com função de onda e operadores. Podemos representar o estado de um sistema por uma certa função de onda e utilizar a algebra linear para caracterizar matematicamente essas funções de onda como sendo vetores abstratos, e os operadores agindo sobre eles como uma transformação linear. Por exemplo, poderíamos representar um vetor de N dimensões $|\alpha\rangle$ da seguinte forma:

$$|\alpha\rangle = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_N \end{bmatrix}.$$

O produto interno de dois vetores $\langle\alpha|\beta\rangle$ funciona da seguinte forma:

$$\langle\alpha|\beta\rangle = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + a_3^* b_3 + ... + a_N^* b_N. \tag{3.2.1}$$

As transformações lineares, T, são representadas por matrizes de sua respectiva base, agindo em vetores através de multiplicação de matrizes:

$$|\beta\rangle = T|\alpha\rangle = |\alpha\rangle = \begin{bmatrix} t_{11} & t_{12} & \cdots & t_{1N} \\ t_{21} & t_{22} & \cdots & t_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ t_{N1} & t_{N2} & \cdots & t_{NN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_N \end{bmatrix}. \tag{3.2.2}$$

Na M.Q. os vetores que acabamos de encontrar são quase sempre funções contidas em espaços de dimensões infinitas, o que pode trazer complicações. Isso acontece pelo fato de que o produto interno de um espaço de dimenção finita sempre existe e o produto interno de dimenção infinita poderá não existir, pois sua soma poderá divergir, tornando suspeito qualquer argumento físico que envolva produto interno.

Vamos supor que todas as funções de x constitui um espaço vetorial. Para representarmos um estado físico possível para uma função de onda Ψ, teremos que normalizá-la:

$$\int |\Psi|^2 dx = 1. \tag{3.2.3}$$

O conjunto de todas as **funções quadrado-integráveis** $f(x)$ em um intervalo específico tal que[1],

$$\int_a^b |f(x)|^2 dx < \infty, \tag{3.2.4}$$

constitui um espaço vetorial muito menor do que possuiamos anteriormente, esse conjunto de funções pertencem ao espaço de Hilbert e é justamente o espaço onde

[1] Obs: Os limites da nossa integral podem ir de $-\infty$ à $+\infty$.

nossa função de onda está contida.

Definimos o produto interno de duas funções $f(x)$ e $g(x)$ como sendo

$$\langle f|g\rangle \equiv \int_a^b f(x)^* g(x) dx. \tag{3.2.5}$$

Se os quadrados integráveis das funções $f(x)$ e $g(x)$ existem, então o produto interno de ambas existe e converge para um número. Essa propriedade é consequência da **desigualdade integral de Schwarz**,

$$|\int_a^b f(x)^* g(x) dx| \leq \sqrt{\int_a^b |f(x)|^2 dx \int_a^b |g(x)|^2 dx}. \tag{3.2.6}$$

Esse produto interno possui algumas propriedades:

1 $\rightarrow$ O produto interno de $g(x)$ por $f(x)$ é dado por:

$$\langle g|f\rangle = \langle f|g\rangle^* \tag{3.2.7}$$

2$\rightarrow$ O produto interno de $f(x)$ por ele mesmo resulta em um número real não negativo e somente será zero se $f(x) = 0$.

$$\langle f|f\rangle = \int_a^b |f(x)|^2 dx \tag{3.2.8}$$

3$\rightarrow$ O conjunto de funções f_n será ortonormal se tais funções forem normalizáveis e mutuamente ortonormais, significando que:

$$\langle f_m|f_n\rangle = \begin{cases} 0, & \text{se } m \neq n, \\ 1, & \text{se } m = n \end{cases}$$

Isso nos remete a um delta de Kronecker.

$$\langle f_m|f_n\rangle = \delta_{mn} \tag{3.2.9}$$

4$\rightarrow$ O conjunto de funções $f_n(x)$ é dito completo se qualquer outra função contida

no espaço de Hilbert puder ser expressa como uma combinação linear

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n f_n(x). \tag{3.2.10}$$

Se tal conjunto de funções forem ontonormais, os coeficientes poderão ser encontrados

$$c_n = \langle f_n | f \rangle. \tag{3.2.11}$$

Utilizaremos tais expressões para encontrarmos uma forma de calcular os estados estacionários de um poço de potencial quadrado infinito.

3.3 Observáveis

Na física um observável é um operador que representa uma grandeza mensurável do sistema. Podemos determinar tal estado através de uma sequência de operações físicas. Em sistemas governados pela mecânica clássica, os valores observáveis são demonstrados por funções de valores reais no conjunto de todos os possíveis estados do sistema. Na formulação matemática da mecânica quântica, estados são dados por vetores não nulos em um espaço de Hilbert V e observáveis são dados pelo operador autoadjunto em V. Para o caso de um sistema de partículas, o espaço V consiste de funções de onda ou vetores de estado quântico.

O valor esperado de um observável $Q(x, p)$ pode ser expressado na forma de Brackets, dada por

$$\langle Q \rangle = \int \Psi^* \hat{Q} \Psi dx = \langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle, \tag{3.3.1}$$

onde $\hat{Q}$ é um operador no qual trocamos os valores de x e p por seus respectivos operadores,

$$\hat{x} \to x$$
$$\hat{p} \to -i\hbar \tfrac{d}{dx}.$$

Sabemos que o valor esperado nos fornece uma medida e essa medida possui valor real, dessa forma, podemos generalizar como sendo igual ao seu compléxo conjugado.

$$\langle Q \rangle = \langle Q \rangle^* \tag{3.3.2}$$

Ao utilizarmos essa propriedade usando a representação da eq.(3.3.1) teremos,

$$\langle \Psi | \hat{Q}\Psi \rangle = \langle \hat{Q}\Psi | \Psi \rangle \tag{3.3.3}$$

pois o complexo conjugado de um produto interno reverte a ordem. Esse argumento é válido para qualquer função de onda Ψ, então podemos substituir o Ψ por um $f(x)$.

$$\langle f(x) | \hat{Q} f(x) \rangle = \langle \hat{Q} f(x) | f(x) \rangle. \tag{3.3.4}$$

Isso é válido para todo $f(x)$, chamamos tais operadores de **operadores hermirteanos**. Podemos verificar essa afirmação utilizando um exemplo com o operador de momento,

$$\langle f | \hat{p} g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f^* \frac{\hbar}{i} \frac{dg}{dx} dx = \frac{\hbar}{i} f^* g \Big|_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{df}{dx} \right)^* g dx = \langle \hat{p} f | g \rangle. \tag{3.3.5}$$

Normalmente quando você mede um observável Q em um conjunto de sistemas identicamente preparados, todos no mesmo estado Ψ, você não obterá sempre o mesmo resultado, essa é uma indeterminâcia da M.Q. .

Porém, ainda é possível encontrar um caso em que você sempre irá obter os mesmos valores de estado, um estado determinado. Esse caso é chamado de estado estacionário, por exemplo, se colocarmos uma partícula no estado Ψ_n sempre obteremos uma energia E_n, se analizarmos a variância desse observável, será zero, pois é um estado determinado

$$\sigma^2 = \langle (\hat{Q} - \langle Q \rangle)^2 \rangle = \langle \Psi | (\hat{Q} - q)^2 \Psi \rangle = \langle (\hat{Q} - q)\Psi | (\hat{Q} - q)\Psi \rangle = 0. \tag{3.3.6}$$

Portanto, chegamos em uma equação cujo produto interno com ela própria resulta em um valor nulo, para que isso aconteça devemos ter

$$(\hat{Q} - q)\Psi = 0 \Rightarrow \hat{Q}\Psi = q\Psi. \tag{3.3.7}$$

Dessa forma chegamos na equação de autovalores para o operador $\hat{Q}$, sendo que Ψ é a autofunção associada a $\hat{Q}$ e q é o autovalor associado a $\hat{Q}$.

3.4 Autofunções de um Operador Hermiteano

As autofunções de um operador hermiteano são os estados determinados dos observáveis. Elas podem ser classificados em dois casos, um em que os autovalores descrevem um espéctro discreto e outro cujo os autovalores descrevem um espéctro contínuo. No caso do espectro discreto, os autovalores são separados uns dos outros por intervalos, constituindo estados físicos realizáveis. Já no caso do espéctro contínuo, os autovalores preenchem um intervalo de forma contínua, e suas autofunções não são normalizáveis e não representam um estado físico de uma partícula, só será possível descrever um estado físico se utilizarmos uma combinação linear dessas autofunções, e essa combinação é normalizavel, podendo representar um estado físico de uma partícula, como é o exemplo de um pacote de onda.

Matematicamente, as autofunções normalizáveis de um operador hermiteano possuem duas propriedades importantes:

Teorema 1 $\rightarrow$ Seus autovalores são reais.

Vamos supor que temos um operador $\hat{Q}$ agindo em uma função f, sabemos que:

$$\hat{Q}f = qf \tag{3.4.1}$$

Temos que o autovalor $\hat{Q}$ é hermiteano, por isso a seguinte propriedade deve ser satisfeita

$$\langle f|\hat{Q}f\rangle = \langle \hat{Q}f|f\rangle \tag{3.4.2}$$

$$\int f^*(\hat{Q}f)dx = \int (\hat{Q}f)^* f dx \tag{3.4.3}$$

$$q\int f^* f dx = q^* \int f^* f dx. \tag{3.4.4}$$

Os dois termos iguais se cancelam, restando apenas

$$q = q^*, \tag{3.4.5}$$

provando que q possui valores reais.

Teorema 2 $\rightarrow$ Autofunções pertencentes a autovalores distintos são ortogonais.

Vamos supor que temos um operador $\hat{Q}$ que está agindo sobre as autofunções $f(x)$ e $g(x)$

$$\hat{Q} \rightarrow f, g.$$

Existirá um autovalor respectivo associado a cada uma dessas autofunções

$$\hat{Q}f = qf \text{ e } \hat{Q}g = q'g$$

Como o operador $\hat{Q}$ é hermiteano, ele possui a seguinte propriedade:

$$\langle f|\hat{Q}g\rangle = \langle \hat{Q}f|g\rangle \tag{3.4.6}$$

$$\langle f|q'g\rangle = \langle qf|g\rangle \tag{3.4.7}$$

$$q'\langle f|g\rangle = q\langle f|g\rangle, \tag{3.4.8}$$

como $q \neq q'$ então o única forma para que essa igualdade ocorra é se $\langle f|g\rangle = 0$. Se isso ocorre, então as funções $f(x)$ e $g(x)$ são ortonormais.

3.5 Interpretação Estatística Generalizada e o Princípio de Incerteza

Interpretação Estatística Generalizada

Se medirmos um observável $Q(x,p)$ de uma partícula no estado $\Psi(x,t)$, certamente obteremos um dos autovalores do operador hermiteano $\hat{Q}(x, -i\hbar\frac{d}{dx})$. Se o espectro de $\hat{Q}$ é discreto, a probabilidade de se obter um determinado autovalor q_n associado à autofunção normalizada $f_n(x)$ será

$$|c_n|^2, \text{ onde } c_n = \langle f_n|\Psi\rangle.$$

Se o espectro for contínuo, com autovalores reais $q(z)$ associados a autofunções ortonormalizadas de Dirac $f_z(x)$, a probabilidade de se obter um resultado em um intervalo dz é de:

$|c(z)|^2 dz$, onde $c(z) = \langle f_z|\Psi\rangle$.

Quando realizamos a medida, a autofunção colapsa para o autoestado correspondente. Os coeficientes de tais autofunções ortonormais são representadas por.

$$c_n = \langle f_n|\Psi\rangle = \int f_n^* \Psi(x,t)dx. \tag{3.5.1}$$

Qualitativamente, o c_n nos indica o quanto da autofunção f_n está contida em Ψ, e dado uma medida, a probabilidade de encontrar um autovalor q_n associado a autofunção seria de $|c_n|^2$, pois indica justamente a densidade de probabilidade de a encontrarmos. Desse forma, possuímos vários valores possíveis para o q_n, a probabilidade total deverá ser igual a '1', sendo assim:

$$\sum_n |c_n|^2 = 1. \tag{3.5.2}$$

Para demonstrarmos, temos que considerar a condição de normalização de função de onda,

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,t)^* \Psi(x,t)dx = 1. \tag{3.5.3}$$

Como a função de onda Ψ está contida no espaço de Hilbert, então podemos expressá-la por uma combinação linear de suas autofunções,

$$\Psi = \langle \sum_{n'} c_{n'} f_{n'} | \sum_n c_n f_n \rangle, \tag{3.5.4}$$

reescrevendo essa equação e isolando os somatórios, temos que:

$$\Psi = \sum_{n'} \sum_n c_{n'}^* c_n \langle f_{n'}|f_n\rangle. \tag{3.5.5}$$

$\langle f_{n'}|f_n\rangle$ no caso discreto são ortogonais, isso resultaria em um delta de Kronecker

$$\sum_{n'} \sum_n c_{n'}^* c_n \delta_{n'n} = \sum_n |c_n|^2 = 1. \tag{3.5.6}$$

Da mesma forma, o valor esperado de Q deveria ser a soma do produto de todos os resultados possíveis do autovalor com a probabilidade de se obter aquele respectivo

autovalor.

$$\langle Q \rangle = \sum_n |c_n|^2. \tag{3.5.7}$$

Podemos demonstrar essa propriedade de uma forma simples.

$$\langle Q \rangle = \langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle = \langle \sum_{n'} (c_{n'} f_{n'}) | \hat{Q} \sum_{n'} (c_{n'} f_{n'}) \rangle, \tag{3.5.8}$$

Como já vimos anteriormente, $\hat{Q} f_n = q_n f_n$, então:

$$\langle Q \rangle = \sum_{n'} \sum_n c^*_{n'} c_n q_n \langle f_{n'} | f_n \rangle = \sum_{n'} \sum_n c^*_{n'} c_n q_n \delta_{n'n} = \sum_{n'} \sum_n q_n |c_n|^2. \tag{3.5.9}$$

Princípio da incerteza generalizado

Vimos nesse capítulo que, para qualquer observável A, temos

$$\sigma_A^2 = \langle (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi | (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi \rangle = \langle f | f \rangle \tag{3.5.10}$$

em que, $f \equiv (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi$. Da mesma forma seria para qualquer outro observável B.

$$\sigma_B^2 = \langle g | g \rangle \text{ em que, } g \equiv (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi.$$

Usando a desigualdade de Schwarz, temos:

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 = \langle f | f \rangle \langle g | g \rangle \geq |\langle f | g \rangle|^2 \tag{3.5.11}$$

para qualquer número complexo z,

$$|z|^2 = [Re(z)]^2 + [Im(z)]^2 \geq [Im(z)]^2 = [\frac{1}{2i}(z - z^*]^2 \tag{3.5.12}$$

Seja $z = \langle f | g \rangle$,

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq [\frac{1}{2i}(\langle f | g \rangle - \langle g | f \rangle)]^2 \tag{3.5.13}$$

Mas,

$$\begin{aligned}
\langle f|g\rangle &= \langle(\hat{A}-\langle A\rangle)\Psi|(\hat{B}-\langle B\rangle)\Psi\rangle \\
&= \langle\Psi|(\hat{A}-\langle A\rangle)\rangle(\hat{B}-\langle B\rangle)\Psi \\
&= \langle\Psi|(\hat{A}\hat{B}-\hat{A}\langle B\rangle-\hat{B}\langle A\rangle+\langle A\rangle\langle B\rangle)\Psi \\
&= \langle\Psi|\hat{A}\hat{B}\Psi\rangle-\langle B\rangle\langle\Psi|\hat{A}\Psi\rangle-\langle A\rangle\langle\Psi|\hat{B}\Psi\rangle+\langle A\rangle\langle B\rangle\langle\Psi|\Psi\rangle \\
&= \langle\hat{A}\hat{B}\rangle-\langle B\rangle\langle A\rangle-\langle A\rangle\langle B\rangle+\langle A\rangle\langle B\rangle \\
&= \langle\hat{A}\hat{B}\rangle-\langle A\rangle\langle B\rangle
\end{aligned} \tag{3.5.14}$$

Similarmente temos:

$$\langle g|f\rangle = \langle\hat{B}\hat{A}\rangle-\langle A\rangle\langle B\rangle \tag{3.5.15}$$

assim,

$$\langle f|g\rangle-\langle g|f\rangle = \langle\hat{A}\hat{B}\rangle-\langle\hat{B}\hat{A}\rangle = \langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle \tag{3.5.16}$$

em que

$$[\hat{A},\hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A} \tag{3.5.17}$$

é o comutador de dois operadores, podemos concluir então que,

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 \geq \big[\frac{1}{2i}\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle\big]^2. \tag{3.5.18}$$

Esse é o princípio de incerteza. Como o comutador de dois operadores hermiteanos carrega seu próprio fator i, o resultado é um valor real maior que zero, esse resultado será muito importante, por exemplo, quando $\hat{A}$ e $\hat{B}$ são respectivamente $\hat{x}$ e $\hat{p}$ obtemos o bem conhecido princípio de incerteza de Heisenberg.

$$\Delta x\Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \tag{3.5.19}$$

4 Mecânica Quântica

4.1 Estados Estácionários

A mecânica quântica aborda os mesmos problemas clássicos, porém com uma interpretação diferente, cada partícula está associada a uma função de onda a qual obtem-se ao resolver a equação de Schrödinger:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi, \tag{4.1.1}$$

onde tomaremos V sendo independente do tempo. Para a resolução da equação de Schrödinger utilizaremos o método de separação de variáveis e buscaremos soluções de produtos simples da forma

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t), \tag{4.1.2}$$

em que ψ é uma função que só depende de x e φ é uma função que só depende de t. A princípio, dessa forma estaremos restringindo a solução a um pequeno grupo de soluções, porém são soluções realmente significantes e seremos capazes de gerar uma solução geral ao juntarmos as soluções separáveis. Sendo assim, derivando $\Psi(x,t)$ em relação a t e em relação a x obteremos

$$\frac{d\Psi}{dt} = \psi\frac{d\varphi}{dt}, \frac{d^2\Psi}{dx^2} = \frac{d^2\psi}{dx^2}\varphi. \tag{4.1.3}$$

Substituiremos este resultado em (4.1.1).

$$i\hbar\psi\frac{d\varphi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}\varphi + V\psi\varphi. \tag{4.1.4}$$

Se dividirmos os dois membros da equação por $\psi\varphi$ poderemos notar que o lado esquerdo da equação só depende de t e o lado direito só depende de x se ambos forem constantes, chamaremos essa constante de constante de separação E. Sendo assim

$$i\hbar\frac{1}{\varphi}\frac{d\varphi}{dt} = E \tag{4.1.5}$$

e

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V = E. \tag{4.1.6}$$

Dessa forma conseguimos transformar um equação parcial em duas equações ordinárias, basta agora resolvermos as equações.

A solução eq.(4.1.5) é dada por

$$\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar}. \tag{4.1.7}$$

A eq.(4.1.6) é chamada de **equação de Schrödinger independente do tempo**, a solução para ela não é tão trivial quanto a da eq.(4.1.5), a ela estão associada **3** características importantes para a M.Q.

1 Os **estados estacionários**.

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}. \tag{4.1.8}$$

Embora a função de onda dependa de t, a sua densidade de probabilidade não dependerá

$$|\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*\Psi = \psi^* e^{iEt/\hbar}\psi e^{-iEt/\hbar} = |\psi(x)|^2. \tag{4.1.9}$$

2. A **hamiltoniana** do sistema.

$$H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + V(x) \tag{4.1.10}$$

O operador hamiltoniano correspondente obtido ao substituir $\hat{p} \to (\hbar/i)\ (d/dx)$, é:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x). \tag{4.1.11}$$

Dessa forma podemos escrever eq.(4.1.6) como sendo:

$$\hat{H}\psi = E\psi, \tag{4.1.12}$$

sendo assim, o valor *esperado* para a energia total será

$$\langle H \rangle = \int \psi^* \hat{H} \psi dx = E \int |\psi|^2 dx = E \int |\Psi|^2 dx = E. \tag{4.1.13}$$

Esse resultado demonstra que a normalização de Ψ implica na normalização de ψ e que,

$$\hat{H}^2 \psi = \hat{H}(\hat{H}\psi) = \hat{H}(E\psi) = E^2 \psi, \tag{4.1.14}$$

portanto,

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = \int \psi^* \hat{H}^2 \psi dx = E^2 \int |\psi|^2 dx = E^2 \tag{4.1.15}$$

3. Através de uma **combinação linear** podemos escrever a sua solução geral. A eq.(4.1.6) apresenta uma compilação de infinitas soluções dada por $\psi_1(x), \psi_2(x), \psi_3(x), ...$, cada uma está associada a um valor de constante de separação e dessa forma temos uma função de onda diferente para cada energia permitida.

$$\Psi_1(x,t) = \psi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar}, \Psi_2(x,t) = \psi_2(x) e^{-iE_2 t/\hbar}, \Psi_3(x,t) = \psi_3(x) e^{-iE_3 t/\hbar}, \cdots, \tag{4.1.16}$$

Assim, a combinação linear da equação de Schrödinger dependente do tempo também forma uma solução. Podemos escrever essa solução mais geral na forma

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}, \tag{4.1.17}$$

onde o c_n está relacionadas às condições iniciais do sistema. Podemos reescrever a equação que acabamos de encontrar atrelando cada termo à sua dependência do tempo característica

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \varphi(t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x,t). \tag{4.1.18}$$

As próprias soluções separáveis, são estados estacionários, na forma de que todas as probabilidades e valores esperados são independentes do tempo, porém essa propriedade não é compartilhada pela sua solução geral, pois as energias são diferentes para estados estacionários diferentes e os termos das exponenciais não se cancelam

ao calcular $|\Psi|^2$.

A seguir iremos mostrar dois exemplos da aplicação da equação que vimos nesse capítulo, um deles é quando a partícula está confinada a uma região de potencial que cresce abruptamente e ela não consegue ”escapar”, o potencial do tipo poço quadrado infinito. O outro é quando ela não está sujeito a forças, uma partícula livre.

4.2 Partícula Livre

Como exemplo de aplicação do nosso formalismo, tratemos o caso da partícula livre. No caso clássico a partícula livre representa um movimento com velocidade constante e potencial que pode ser tomado como sendo zero. Na M.Q. esse problema é um pouco mais complicado, temos que a eq. de Schrödinger independente do tempo é:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \tag{4.2.1}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi, \text{ onde } k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar},$$

cuja a solução é dada pela combinação linear das exponenciais

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \tag{4.2.2}$$

Como vimos na parte de estados estacionários, tinhamos que as soluções poderiam ser separáveis $\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t)$ em que $\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar}$, segue que:

$$\begin{aligned}
\Psi(x,t) &= \psi(x)\varphi(t) \\
\Psi(x,t) &= (Ae^{ikx} + Be^{-ikx})e^{-iEt/\hbar} \\
\Psi(x,t) &= (Ae^{ikx} + Be^{-ikx})e^{-i\frac{k^2\hbar}{2m}t} \\
\Psi(x,t) &= Ae^{ik(x-\frac{\hbar k}{2m}t)} + Be^{-ik(x+\frac{\hbar k}{2m}t)}.
\end{aligned} \tag{4.2.3}$$

Através da solução que acabamos de encontrar, qualquer função de x e t que dependa dessas variáveis na combinação especial $(x \pm vt)$, representa uma onda de perfil fixo movendo-se na direção $\mp x$ com velocidade ν. Se fixássemos um ponto

em uma onda, seja ele no maxímo ou no mínimo, corresponderia a um valor fixo do argumento

$$x \pm vt = \text{constante, ou } x = \mp v + \text{constante .}$$

Uma vez que cada ponto da onda se move na mesma velocidade, sua forma não muda conforme se propaga. Assim, o primeiro termo da equação $Ae^{ik(x-\frac{\hbar k}{2m}t)}$ representa uma onda se movendo para a direita, e o segundo termo da equação $Be^{-ik(x+\frac{\hbar k}{2m}t)}$ representa uma onda se movendo para a esquerda. Como ambos diferem apenas pelo sinal que acompanha a constante k, podemos representá-los como sendo

$$\Psi_k(x,t) = Ae^{i(kx-\frac{\hbar k^2}{2m}t)}, \tag{4.2.4}$$

onde o k é:

$$k \equiv \pm\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \text{ com}$$

$$\begin{cases} k > 0, & \Rightarrow \text{movendo-se no sentido positivo do eixo } x. \\ k < 0, & \Rightarrow \text{movendo-se no sentido negativo do eixo } x. \end{cases}$$

Esses estados estacionários são ondas que se propagam com comprimento $\lambda = 2\pi/|k|$ e carregam consigo um momento, de acordo com a fórmula de de Broglie

$$p = \hbar k. \tag{4.2.5}$$

Podemos encontrar a velocidade dessa onda da seguinte forma:

$$v_{quant.} = \frac{\hbar|k|}{2m} = \sqrt{\frac{E}{2m}}. \tag{4.2.6}$$

Essa equação gera uma contradição com equação que representa a velocidade clássica da partícula de energia E. $E = (1/2)mv^2$, com V nulo,

$$v_{clas.} = \sqrt{\frac{2E}{m}} = 2v_{quant.}. \tag{4.2.7}$$

Esse paradoxo pode ser explicado pelo fato de que $\Psi(x,t)$ não representa um estado físico de uma partícula por não ser normalizável. A condição de normalização

é:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi dx = 1. \tag{4.2.8}$$

Subistituindo a eq.(4.2.4) em Ψ, temos:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} Ae^{-i(kx-\frac{\hbar k^2}{2m}t)} Ae^{i(kx-\frac{\hbar k^2}{2m}t)} dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} 1dx = \infty. \tag{4.2.9}$$

As soluções separáveis, no caso de uma partícula livre, não representam os estados fisicamente realizáveis, pois uma partícula livre não pode existir em um estado estacionário em outras palavras, não há partícula livre com energia definida. Isso não significa que as soluções não tenham utilidades para a física. A solução geral para a equação de Schrödinger dependente do tempo para a partícula livre ainda é uma combinação linear de soluções separáveis , vamos definir a eq.(4.2.9), em termos de uma integral sobre a variável contínua k em vez de uma soma sobre o índice n.

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i(kx-\frac{\hbar k^2}{2m}t)} dk \tag{4.2.10}$$

Onde $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\phi(k)$ e o análogo de c_n. Agora essa solução pode ser normalizável, porém ela necessariamente carrega um intervalo k com vários valores de velocidades e energia, o que é chamado de **pacote de onda**.

Agora que possuímos essa nova forma de escrever $\Psi(x,t)$, vamos voltar a falar sobre o paradoxo das velocidades que nos deparamos nessa seção. O problema desaparece quando descobrimos que Ψ_k não é um estado fisicamente realizável, contudo, é interessante descobrir como a informação sobre a velocidade está contida na função de onda da patícula livre. A ideia principal para esse problema é: um pacote de onda é uma sobreposição de funções senoidais cuja amplitude é modulada por ϕ, ele consiste de ondulações contidas em um ”pacote”. O que corresponde a velocidade da partícula não é a velocidade individual de cada onda (velocidade de fase), mas sim, a velocidade do ”pacote”(velocidade de grupo). Precisamos mostrar que a velocidade de grupo de uma partícula livre na M.Q. é duas vezes maior que a velocidade de fase, isso seria capaz de representar a velocidade clássica da partícula. Portanto, devemos encontrar a velocidade de grupo de um pacote de onda com a seguinte forma

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i(kx-\omega t)} dk, \tag{4.2.11}$$

com $\omega = (\hbar k^2/2m)$.

Vamos supôr que $\phi(k)$ esteja situado sobre um determinado k_0, uma vez que o integrando é desprezível exeto quando próximo de k_0, podemos então expandir a função $\omega(k)$, usando série de Taylor, sobre esse ponto e manter somente os termos principais

$$\omega(k) \cong \omega_0 + \omega_0^{'}(k - k_0) \tag{4.2.12}$$

onde $\omega_0^{'}$ é a derivada de ω em relação a k no ponto k_0. Vamos centralizar a integral em k_0 mudando as variáveis de k por $s \equiv k - k_0$.

$$\Psi(x,t) \cong \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k_0 + s) e^{i[(k_0+s)x-(\omega_0+\omega_0^{'}s)t]} ds. \tag{4.2.13}$$

Em $t = 0$ temos:

$$\Psi(x,0) \cong \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k_0 + s) e^{i(k_0+s)x} ds. \tag{4.2.14}$$

Agora, vamos trabalhar como o expoente $i[(k_0+s)x-(\omega_0+\omega_0^{'}s)t]$, vamos espandi-lo na forma

$$ik_0x + isx - i\omega_o t - i\omega_0^{'}st = -i(\omega_0 + k_0\omega_0^{'})t + i(k_0 + s)x - i(k_0 + s)\omega_0^{'}t =$$
$$-i(\omega_0 + k_0\omega_0^{'})t + i(k_o + s)(x - \omega_0^{'}t) = -i(\omega_0 + k_0\omega_o^{'})t + i(k_0 + s)(x - \omega_0^{'}t).$$

Substituindo na intergral, temos:

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i(\omega_0+k_0\omega_0^{'})t} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k_0 + s) e^{i(k_0+s)(x-\omega_0^{'}t)} ds. \tag{4.2.15}$$

Exceto pela mudança de x para $(x - \omega_0^{'}t)$, a integral é a mesma em $\psi(x,0)$

$$\Psi(x,t) \cong e^{-i(\omega_0+k_0\omega_0^{'})t} \Psi(x - \omega_0^{'}t, 0). \tag{4.2.16}$$

Temos que $\Psi(x - \omega_0^{'}t, 0)$ é uma onda que se propaga com velocidade $\omega_0^{'}$

$$\omega_0^{'} = \frac{d\omega}{dk}. \tag{4.2.17}$$

Avaliado em $k = k_0$, temos que $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$, então:

$$\frac{2\hbar k_0}{2m} = \frac{p}{m}. \tag{4.2.18}$$

Essa velocidade representa a velocidade de grupo, e não a velocidade de fase que é

$$v_{fase} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{p}{2m} \tag{4.2.19}$$

Coincidindo com a velocidade clássica da partícula.

$$v_{clas} = v_{grup} = 2v_{fase} \tag{4.2.20}$$

4.3 Poço Quadrado Infinito

Continuando com as aplicações do formalismo, suponhamos que o nosso potencial $V(x)$ seja

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{se} \leq x \leq a, \\ \infty, & \text{outros pontos,} \end{cases}$$

e interagindo com esse potencial exista uma partícula que poderá se mover livremente na região entre $x = 0$ e $x = a$, onde há uma força infinita que a impede de ser encontrada nas outras regiões. Seria como se quando se aproximasse das "paredes" ela fosse empurrada de volta com uma colisão perfeitamente elástica. Analisando esse sistema podemos concluir que a nossa partícula possui a função de onda fora do poço, $\psi = 0$, onde a probabilidade de encontrar a partícula é nula, e dentro do poço em que $V = 0$. Utilizando a equação de Schrödinger independente do tempo, temos

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi, \tag{4.3.1}$$

ou,

$$\frac{1}{\psi}\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2 E, \tag{4.3.2}$$

onde $k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.

A equação que acabamos de encontrar é a equação do oscilador harmônico simples, onde sua solução geral é dada por

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx, \tag{4.3.3}$$

A e B são constantes arbritárias fixadas a partir das condições de contorno do problema, no nosso caso $\psi(0) = \psi(a) = 0$. Sendo assim,

$$\psi(0) = A \sin 0 + B \cos 0 = B, \tag{4.3.4}$$

portanto $B = 0$ e

$$\psi(a) = A \sin ka = 0. \tag{4.3.5}$$

Nesse caso devemos encontrar os valores em que $\sin ka = 0$, pois se substituirmos $A = 0$, ficaremos com o caso trivial e a nossa solução seria $\psi(x) = 0$. Temos

$$ka = 0, \pm\pi, \pm 2\pi, \pm 3\pi, ... \tag{4.3.6}$$

Mesmo assim devemos tomar mais algumas restrições. Se $k = 0$ voltaremos a ter $\psi(x) = 0$ e as soluções negativas não nos trará nada de novo que possamos usar pois, $\sin -x = -\sin x$, dessa forma as soluções distintas para k são

$$k_n = \tfrac{n\pi}{a}, \text{ com } n = 1, 2, 3, \ldots.$$

Podemos encontrar os possíveis valores de E.

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \tag{4.3.7}$$

Concluimos também que as condições de contorno em $x = a$ não determinam a constante A somente a constante k. Em comparação com o caso clássico, a partícula quântica no poço quadrado infinito não pode possuir qualquer valor de energia, só poderá possuir um desses valores especiais permitidos. Portanto, a equação de Schrödinger independente do tempo produziu infinitas soluções. Para encontrarmos o valor de A precisamos normalizar ψ.

$$\int_a^b |A|^2 \sin^2(kx)dx = |A|^2 \frac{a}{2} = 1, \tag{4.3.8}$$

temos $|A|^2 = \frac{2}{a}$.

Dessa forma encontramos a magnitude de A. A fase de A não traz nenhum significado físico por isso ficará mais simples usarmos o valor positivo $A = \sqrt{2/a}$.

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(\frac{n\pi}{a}x), \tag{4.3.9}$$

com $n = 1, 2, \ldots$.

As funções $\psi_n(x)$ possuem algumas propriedades importantes:

1. Todas as soluções são alternadamente par e ímpar em relação ao centro do poço: ψ_1 é par,ψ_2 é ímpar, ψ_3 é par $\ldots$.

2. A medida em que a energia vai aumentando o número de nós (cruzamento no eixo x) também aumenta, os extremos não contam.

3. Eles são mutuamente ortogonais.

$$\int \psi_m(x)^* \psi_n(x)dx = 0, \tag{4.3.10}$$

isso é válido sempre que $m \neq n$. Verificação:

$$\begin{aligned}
\int \psi_m(x)^* \psi_n(x)dx &= \frac{2}{a}\int_0^a \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx \\
&= \frac{1}{a}\int_0^a \left[\cos\left(\frac{m-n}{a}\pi x\right) - \cos\left(\frac{m+n}{a}\pi x\right)\right]dx \\
&= \left\{\frac{1}{(m-n)\pi}\sin\left(\frac{m-n}{a}\pi x\right) - \frac{1}{(m+n)\pi}\sin\left(\frac{m+n}{a}\pi x\right)\right\}\Bigg|_0^a \\
&= \frac{1}{\pi}\left\{\left(\frac{\sin[(m-n)\pi]}{m-n}\right) - \left(\frac{\sin[(m+n)\pi]}{m+n}\right)\right\} = 0.
\end{aligned} \tag{4.3.11}$$

No caso em que $m = n$, a normalização nos diz que a integral é 1. Podemos combinar ortogonalidade e normalização em uma só afirmação usando o delta de Kronecker δ_{mn}.

$$\int \psi_m(x)^* \psi_n(x) dx = \delta_{mn}. \tag{4.3.12}$$

4. Elas são **completas** no sentido de que qualquer outra função de $f(x)$, pode ser expressa como uma combinação linear delas

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin(\frac{n\pi}{a} x), \tag{4.3.13}$$

onde os c_n são as condições iniciais do sistema.

Essa equação nada mais é do que a **série de Fourier** para $f(x)$. Os coeficientes c_n podem ser avaliados por um método que chamamos de **truque de Fourier**, que explora muito bem a ortogonalidade da $\{\psi_n\}$, vamos multiplicar ambos os lados da equação 4.3.13 por ψ_m e integrar.

$$\int \psi_m(x)^* f(x) dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \int \psi_m(x)^* \psi_n(x) dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \delta_{mn} = c_m. \tag{4.3.14}$$

Assim

$$c_n = \int \psi_n(x)^* f(x) dx. \tag{4.3.15}$$

Como já mencionado no capítulo **Formalismo Matemático**, temos que

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1. \tag{4.3.16}$$

Podemos demonstrar que isso também decorre da normalização de ψ, vamos tomar $\Psi(x, 0)$ como sendo uma função de onda no estado inicial.

$$1 = \int |\Psi(x,0)|^2 dx = \int (\sum_{m=1}^{\infty} c_m \psi_m(x))^* (\sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x)) dx =$$
$$\sum_{n=1} \sum_{m=1} c_m^* c_n \int \psi_m(x)^* \psi_n(x) dx = \sum_{n=1} \sum_{m=1} c_m^* c_n \delta_{mn} = \sum_{n=1} |c_n|^2 1 = \sum_{n=1} |c_n|^2.$$

Esse resultado seria o mesmo para um t arbitrário, mas utilizamos essa notação para demonstrarmos a peculiaridade asseguir.

Vamos utilizar do mesmo método para encontrar o valor esperado para a energia da partícula.

$$\langle H \rangle = \int \Psi^* H \Psi dx = \int (\sum c_m \psi m)^* H (\sum c_n \psi_n) dx = \sum \sum c_m^* c_n E_n \int \psi_m^* \psi_n dx = \sum |c_n|^2 E_n.$$

A probabilidade de se obter uma energia determinada independente do tempo, é o $|c_n|^2$ que permanece constante, essa é uma manifestação da conservação da energia na M.Q..

5 Oscilador Harmônico Quântico

No caso clássico, um exemplo de oscilador harmônico pode ser descrito por uma massa m atrelado a uma mola de constante elástica k, possui aplicação em vários ramos da física clássica como pêndulo, fluidos, circuitos eletromagnéticos, etc. O movimento realizado pela massa m é descrito pela **lei de Hooke** (desprezando forças externas).

$$F = -kx = m\frac{d^2x}{dt^2}. \tag{5.0.1}$$

A energia do oscilador harmônico clássico pode assumir qualquer valor real não negativo.

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}m\omega x^2, \tag{5.0.2}$$

onde

$$x = x(t) = x_m \cos(\omega t + \varphi), \tag{5.0.3}$$

$\omega \equiv \sqrt{\frac{k}{m}}$ é sua frequência angular de oscilação e x_m é a distância inicial da massa com relação a posição de equilíbrio. Como a massa realiza um movimento oscilatório em torno de um ponto e não há forças dissipativas, sua energia mecânica está se conservando.

$$E = \frac{1}{2}m\omega^2 x_m^2. \tag{5.0.4}$$

Mas é claro, não existe oscilador harmônico perfeito, se a mola sofrer uma deformidade extrema a lei de Hooke falhará, mas praticamente todo potencial é aproximadamente parabólico em torno de um mínimo local.

Quânticamente o sistema do oscilador harmônico tem aplicações como cinética de moléculas estáveis, vibrações em estruturas cristalinas, oscilações torcionais de moléculas, oscilações em cavidades ópticas, etc. O nosso problema quântico é tentar resolver a equação de Schrödinger para o potencial de um oscilador harmônico.

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \tag{5.0.5}$$

Mais uma vez utilizaremos da equação de Schrödinger independente do tempo

para que possamos resolver esse problema, substituindo $V(x)$ temos

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi=E\psi. \tag{5.0.6}$$

A seguir vamos resolver essa equação e determinar seus valores de energia utilizando o método algébrico.

5.1 Método Algébrico

Vamos começar reescrevendo a eq.(5.0.6) utilizando o hamiltoniano na forma

$$\frac{1}{2m}[\hat{p}^2+(m\omega\hat{x})^2]\psi=E\psi. \tag{5.1.1}$$

Fatoraremos o hamiltoniano da forma:

$$u^2+v^2=(iu+v)(-iu+v). \tag{5.1.2}$$

Porém $\hat{p}$ e $\hat{x}$ são operadores e não comutam, ou seja $\hat{x}\hat{p}\neq\hat{p}\hat{x}$. Definimos

$$\hat{a}^\dagger\equiv\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(-i\hat{p}+m\omega\hat{x}) \tag{5.1.3}$$

$$\hat{a}\equiv\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(i\hat{p}+m\omega\hat{x}). \tag{5.1.4}$$

Sendo assim, o produto de $\hat{a}\hat{a}^\dagger$ é,

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger=\frac{1}{2\hbar m\omega}(i\hat{p}+m\omega\hat{x})(-ip+m\omega x)=\frac{1}{2\hbar m\omega}[p^2+(m\omega x)^2-im\omega(xp-px)]. \tag{5.1.5}$$

Podemos escrever $\hat{a}\hat{a}^\dagger$ utilizando a relação de comutação $[\hat{A},\hat{B}]\equiv\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}$, dessa

forma

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger = \frac{1}{2\hbar m\omega}[\hat{p}^2 + (m\omega\hat{x})^2] - \frac{i}{2\hbar}[\hat{x}, \hat{p}]. \tag{5.1.6}$$

Utilizando a representação de $\hat{x}$ e $\hat{p}$ podemos verificar sua relação de comutação.

$$[\hat{x}, \hat{p}]f(x) = x\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}(f(x)) - \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}(xf(x)) = \frac{\hbar}{i}\Big(x\frac{df(x)}{dx} - x\frac{df(x)}{dx} - f(x)\Big) = i\hbar f(x). \tag{5.1.7}$$

Portanto,

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar. \tag{5.1.8}$$

Podemos reescrever o hamiltoniano através de

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} + \frac{\mathbf{1}}{2} \tag{5.1.9}$$

$$\Rightarrow \hat{H} = \hbar\omega[\hat{a}\hat{a}^\dagger - \frac{\mathbf{1}}{2}], \tag{5.1.10}$$

onde **1** é o operador unidade.

Podemos obter a relação de comutação de $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]$,

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = 1 \tag{5.1.11}$$

Escrevendo

$$\hat{x} = (\frac{\hbar}{2m\omega})^{\frac{1}{2}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \tag{5.1.12}$$

$$\hat{p} = i(\frac{m\omega\hbar}{2})^{\frac{1}{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a}), \tag{5.1.13}$$

temos através do comutador $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$

$$[(\tfrac{\hbar}{2m\omega})^{\frac{1}{2}}(\hat{a}^\dagger+\hat{a}), i(\tfrac{m\omega\hbar}{2})^{\frac{1}{2}}(\hat{a}^\dagger-\hat{a})]i\hbar$$
$$\tfrac{\hbar}{2m\omega})^{\frac{1}{2}}.i(\tfrac{m\omega\hbar}{2})^{\frac{1}{2}}[\hat{a}^\dagger+\hat{a},\hat{a}^\dagger-\hat{a}]=i\hbar$$
$$i\tfrac{\hbar}{2}([\hat{a}^\dagger,\hat{a}^\dagger]-[\hat{a}^\dagger,\hat{a}]+[\hat{a},\hat{a}^\dagger]-[\hat{a},\hat{a}]=i\hbar$$
$$\tfrac{\mathbf{1}}{2}(-(-[\hat{a}^\dagger,\hat{a}])+[\hat{a}^\dagger,\hat{a}])=\mathbf{1}, \tag{5.1.14}$$

$$[\hat{a}^\dagger,\hat{a}]=\mathbf{1}. \tag{5.1.15}$$

Dessa forma o hamiltoniano se torna

$$\hat{H}=(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{\mathbf{1}}{2})\hbar\omega. \tag{5.1.16}$$

Definido $\hat{n}=\hat{a}^\dagger\hat{a}$,

$$\hat{H}=(\hat{n}+\frac{\mathbf{1}}{2})\hbar\omega. \tag{5.1.17}$$

Temos que $[\hat{H},\hat{n}]=\emptyset$ ($\emptyset$ é o operador nulo), portanto exite uma base de autoestados em comum que vamos denotar como $|n\rangle$. Assim,

$$\hat{H}|n\rangle=E_n|n\rangle \text{ e } \hat{n}|n\rangle=n|n\rangle$$
$$(\hat{n}+\tfrac{\mathbf{1}}{2})|n\rangle=E_n|n\rangle$$
$$\hat{n}|n\rangle+\tfrac{\mathbf{1}}{2}|n\rangle=E_n|n\rangle$$
$$n|n\rangle+\tfrac{1}{2}|n\rangle=E_n|n\rangle$$
$$E_n=(n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega$$

Vamos apresentar algumas características dos comutadores de $\hat{n}$ com $\hat{a}$ e $\hat{a}^\dagger$:

(I)

$[\hat{n},\hat{a}^\dagger]=[\hat{a}^\dagger\hat{a},\hat{a}^\dagger]$

$[\hat{n},\hat{a}^\dagger]=\hat{a}^\dagger[\hat{a},\hat{a}^\dagger]+[\hat{a}^\dagger,\hat{a}^\dagger]\hat{a}$

$[\hat{n},\hat{a}^\dagger]=\hat{a}^\dagger$

(II)

$[\hat{n},\hat{a}]=[\hat{a}^\dagger\hat{a},\hat{a}]$

$[\hat{n}, \hat{a}] = \hat{a}^\dagger[\hat{a}, \hat{a}] + [\hat{a}^\dagger, \hat{a}]\hat{a}$

$[\hat{n}, \hat{a}] = \hat{a}^\dagger[0] + [-1]\hat{a}$

$[\hat{n}, \hat{a}] = -\hat{a}$

De **(I)** temos que

$$\begin{aligned}
[\hat{n}, \hat{a}^\dagger]|n\rangle &= \hat{a}^\dagger|n\rangle \\
(\hat{n}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{n})|n\rangle &= \hat{a}^\dagger|n\rangle \\
\hat{n}\hat{a}^\dagger|n\rangle &= \hat{a}^\dagger\hat{n}|n\rangle + \hat{a}^\dagger|n\rangle \\
\hat{n}\hat{a}^\dagger|n\rangle &= n\hat{a}^\dagger|n\rangle + \hat{a}^\dagger|n\rangle \\
\hat{n}(\hat{a}^\dagger|n\rangle) &= (n+1)(\hat{a}^\dagger|n\rangle)
\end{aligned} \tag{5.1.18}$$

Assim $(\hat{a}^\dagger|n\rangle)$ é autoestado de $\hat{n}$ com o autovalor $(n+1)$, ou seja $\hat{n}c_n|n+1\rangle = (n+1)c_n|n+1\rangle$ Onde c_n é uma constante. Portanto

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = c_n|n+1\rangle \tag{5.1.19}$$

Tomando o complexo conjugado de $\hat{a}^\dagger|n\rangle$

$$\langle n|\hat{a} = c_n^*\langle n+1| \tag{5.1.20}$$

e realizando o produto escalar na equação em $\hat{a}^\dagger|n\rangle = c_n|n+1\rangle$, temos

$$\begin{aligned}
\langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle &= c_n^* c_n\langle n+1|n+1\rangle \\
\langle n|(\mathbf{1} + \hat{a}^\dagger\hat{a})|n\rangle &= c_n^* c_n(1) \\
\langle n|(1+n)|n\rangle &= |c_n|^2 \\
(n+1)\langle n|n\rangle &= |c_n|^2 \\
(n+1) &= |c_n|^2,
\end{aligned} \tag{5.1.21}$$

onde assumimos os autoestados de $\hat{n}$ normalizados. Então,

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{(n+1)}|n+1\rangle \tag{5.1.22}$$

Podemos ver que a atuação de $\hat{a}^\dagger$ em um dos autoestados de $\hat{n}$ resulta no autoestado uma unidade acima. $\hat{a}^\dagger$ é chamdo de operador de criação.

De **(II)** temos que

$$\begin{aligned}
[\hat{n},\hat{a}]|n\rangle &= -\hat{a}|n\rangle \\
(\hat{n}\hat{a}-\hat{a}\hat{n})|n\rangle &= -\hat{a}|n\rangle \\
\hat{n}\hat{a}|n\rangle &= -\hat{a}|n\rangle + \hat{a}\hat{n}|n\rangle \\
\hat{n}\hat{a}|n\rangle &= -\hat{a}|n\rangle + n\hat{a}|n\rangle \\
\hat{n}(\hat{a}|n\rangle) &= (n-1)\hat{a}|n\rangle
\end{aligned} \tag{5.1.23}$$

Assim $\hat{a}|n\rangle$ é autoestado de $\hat{n}$ com o autovalor $(n-1)$, isto é $\hat{n}c_n|(n-1)\rangle = (n-1)c_n|n-1\rangle$, e consequentemente $\hat{a}|n\rangle = c_n|n-1\rangle$.

Da mesma forma que o anterior, vamos tomar o complexo conjugado e realizar o produto escalar.

$$\langle n|\hat{a}^\dagger = c_n^*\langle n-1| \tag{5.1.24}$$

$$\begin{aligned}
\langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle &= c_n^* c_n\langle n-1|n-1\rangle \\
\langle n|\hat{n}|n\rangle &= |c_n|^2 \\
n\langle n|n\rangle &= |c_n|^2 \\
|c_n|^2 &= n
\end{aligned} \tag{5.1.25}$$

$c_n = \sqrt{n}$ onde assumimos o modulo de c_n normalizado.

Portanto, $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$

Podemos ver que a atuação de $\hat{a}$ em um dos autoestados de $\hat{n}$ resulta no autoestado uma unidade abaixo. $\hat{a}$ é chamado de operador de aniquilação.

De uma forma geral temos que

$$\begin{cases} \hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \\ \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle. \end{cases}$$

Sabendo que a norma de $\hat{a}|n\rangle$ é não negativo

$$\begin{aligned} \big\|\hat{a}|n\rangle\big\| &\geq 0 \\ \langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle &\geq 0 \\ \langle n|\big(\hat{n}|n\rangle\big) &\geq 0 \\ \langle n|n|n\rangle &\geq 0 \\ n\langle n|n\rangle &\geq 0 \\ n &\geq 0. \end{aligned} \tag{5.1.26}$$

A atuação sucessiva de $\hat{a}$ em um alto estado $|n\rangle$ pode conduzir a valores negativos de n, sendo $n = 0$ um valor possível, definimos o estado fundamental $\hat{a}|0\rangle = 0$. Então os valores possiveis de n são $n = 0$, $n = 1$, $n = 2$, ...

Logo,

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle = \big(n + \frac{1}{2}\big)\hbar\omega|n\rangle \tag{5.1.27}$$

$$E_n = \big(n + \frac{1}{2}\big)\hbar\omega,\ n = 0, 1, 2, 3, ... \tag{5.1.28}$$

Ao compararmos com o caso do oscilador harmônico clássico, temos que classicamente a energia é continua e não negativa, enquanto que quanticamente a energia assume valores quantizados e bem definidos para $n = 0, 1, 2, 3, ...$ Outro ponto importante é o menor valor de energia, enquanto que classicamente o menor valor de energia é zero, quanticamente temos que a menor energia que o sistema pode assumir é de $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$.

Devido a ordem de grandeza da constante de Planck ser de 10^{-34}, não é possível observar a quantização da energia em um sistema macroscópico, por isso em sistemas macroscópicos a energia aparenta ser contínua.

O resultado $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ é chamado em M.Q. de energia de ponto zero, que é a menor energia que uma partícula quântica confinada a uma região pode possuir, o que é uma consequência do princípio de incerteza de Heisenberg. Assim, a partícula nunca poderá estar em repouso absoluto.

6 Conclusão

Nesse trabalho realizamos uma breve revisão dos aspectos principais da mecânica quântica desde sua introdução histórica, passando pelas idéias fundamentais que compõe os pilares da teoria quântica, a matemática sob a qual está fundamentada e sua estruturação algébrica, bem como a aplicação a problemas acadêmicos simples, mas de grande utilidade didática que são o caso da partícula livre e o potencial do tipo poço quadrado infinito. O objetivo central do trabalho foi aplicarmos a teoria quântica ao caso do potencial do tipo oscilador harmônico, isto é, resolvermos a equação de Schrödinger para esse potencial. O oscilador harmônico é importante em muitos ramos da física moderna como cinética de moléculas estáveis, vibrações em estruturas cristalinas, oscilações torcionais de moléculas, oscilações em cavidades ópticas, etc. Nós utilizamos o método algébrico (vetores de estado e espaço vetorial), pois nesse caso permite um tratamento mais simples do que o método analítico (funções de onda e análise funcional). Definimos operadores de criação e aniquilação e através destes reescrevemos o hamiltoniano do sistema. Por meio das propriedades algébricas desses operadores foi possível mostrar que, ao contrário do que é previsto pela física clássica, os níveis de energia do oscilador harmônico são discretos e não contínuos e que há um estado de menor energia possível que é não nula.

7 Referências

[1] GRIFFITHS D. Mecânica Quântica. 2.ed. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2011.

[2] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, e F. Lalöe, Quantum Mechanics, John-Wiley, New York, 1977, Vol. I.

[3] TIPLER P., LLEWLLYN R. Física Moderna. 5.ed. Rio de Janeiro:LTC,2010. 470 p.

[4] EISBERG R.; RESNICK, R. Física Quântica: Átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas. Rio de Janeiro: Campus, 1979. 928 p.

[5] HALLIDAY D., RESNICK R. Fundamentos de Física Vol.4. 9.ed. Rio de Janeiro: LTC.2012. 400 p.

[6] LANDAU L.D. Course of theoretical physics Vol.3. Quantum Mechanics, non-relativistic theory. 3.ed. São Paulo: Paraíso, Pergamon Editora Ltda. 1989.

[7] PFEFFER, J. I. Modern Physics: An Introductory Text. Londres: Imperial College Press, 2000.

[8] CARSON C. The origins of the quantum mechanics. Stanford, 2000.