

Introdução à Mecânica Clássica e a Mecânica Quântica

Formulamos as equações de movimento de uma partícula de acordo com a mecânica clássica e a mecânica quântica.

Introdução à mecânica clássica. Consideremos uma partícula de massa m sujeita a um campo de forças conservativo $F(x)$. Um campo de forças conservativo é descrito por menos o gradiente de uma função potencial $V(x)$. Suponha que a partícula se mova no espaço euclidiano d -dimensional, chamado espaço de configurações. Então $V(x)$ é uma função real de $x \in \mathbb{R}^d$ e a força que atua no ponto x é dada por

$$F(x) = -\nabla V(x).$$

Suponha que no instante t_0 a partícula está na posição x_0 com velocidade v_0 . Então segundo o **Lei de Newton**, a posição $x(t)$ da partícula no instante t é determinada pelo problema de valor inicial

$$\begin{aligned} m\ddot{x} &= -\nabla V(x), \\ x(t_0) &= x_0, \\ \dot{x}(t_0) &= v_0. \end{aligned}$$

A equação de Newton pode ser formulada no formalismo hamiltoniano. Definimos o **momento** p da partícula por

$$p = m\dot{x}.$$

Na mecânica hamiltoniana, o estado da partícula é representado por um ponto (x, p) no espaço $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$, chamado **espaço de fases**. Usando as variáveis x e p , podemos reescrever a equação de Newton como um sistema de primeira ordem chamado equações de Hamilton:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{1}{m}p, \\ \dot{p} &= -\nabla V(x), \\ x(t_0) &= x_0, \\ p(t_0) &= p_0. \end{aligned}$$

Podemos reescrever novamente esse sistema usando a **função de Hamilton** (ou hamiltoniana), que é uma função real no espaço de fases definida por

$$H(x, p) = \frac{1}{2m} p \cdot p + V(x).$$

A função

$$T(p) = \frac{1}{2m} p \cdot p$$

é chamada **função energia cinética**. A hamiltoniana $H(x, p)$ representa a energia total da partícula na posição x com momento p . Agora as **equações de Hamilton** assumem a forma

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{\partial H}{\partial p}(x, p), \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial x}(x, p), \\ x(t_0) &= x_0, \\ p(t_0) &= p_0. \end{aligned}$$

Se $V(x) \geq a - b|x|^2$, onde a e b são constantes com $b > 0$, o problema de valor inicial possui uma única solução definida para todo t . Portanto, se no instante t_0 a partícula está no estado (x_0, p_0) , o estado $(x(t), p(t))$ da partícula no instante t é determinado pelas equações de Hamilton. Um cálculo simples mostra que se $(x(t), p(t))$ é uma solução das equações de Hamilton o valor de $H(x(t), p(t))$ é igual a uma constante E , chamada a **energia** da partícula.

Introdução à mecânica quântica. Na escala atômica, a posição e o momento são observáveis importantes mas são insuficientes para descrever o estado de uma partícula. Na mecânica quântica, o estado é representado por uma função complexa ψ no espaço de configurações chamada **função de onda**:

$$\psi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}.$$

A função $x \mapsto |\psi(x)|^2$ é interpretada como a densidade de probabilidade para a posição da partícula. Portanto, requeremos a **condição de normalização**

$$\int_{\mathbb{R}^d} |\psi(x)|^2 dx = 1.$$

O espaço de funções de onda normalizáveis é o espaço de funções de quadrado somável

$$L^2(\mathbb{R}^d) = \left\{ \psi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C} \mid \int_{\mathbb{R}^d} |\psi(x)|^2 dx < \infty \right\}.$$

O produto interno de duas funções em $L^2(\mathbb{R}^d)$ é definido por

$$\langle \psi, \varphi \rangle = \int_{\mathbb{R}^d} \overline{\psi(x)} \varphi(x) dx.$$

Em 1926, Schrödinger postulou uma equação que descreve a evolução temporal da função de onda, que é considerada a equação fundamental da mecânica quântica. De acordo com Schrödinger, se a partícula está no estado $\psi_0(x)$ no instante t_0 , o estado $\psi(x, t)$ da partícula no instante t é determinado pelo problema de valor inicial

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= H\psi, \\ \psi(x, t_0) &= \psi_0(x), \end{aligned}$$

onde \hbar é a constante de Planck reduzida e H é um operador auto-adjunto em $L^2(\mathbb{R}^d)$, chamado **operador de Hamilton**. Vamos descrever abaixo o operador H . A equação acima é chamada **equação de Schrödinger**. A propriedade de H ser auto-adjunto implica que o problema de valor inicial possui uma única solução definida para todo t .

Na mecânica quântica, a função energia $H(x, p)$ é substituída por um **funcional de energia**, da função de onda, definido por

$$\mathcal{E}(\psi) = T_\psi + V_\psi,$$

onde

$$T_\psi = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla \psi(x)|^2 dx$$

e

$$V_\psi = \int_{\mathbb{R}^d} V(x) |\psi(x)|^2 dx.$$

As derivadas no gradiente podem ser interpretadas no sentido de distribuição. Os funcionais $\mathcal{E}(\psi)$, T_ψ e V_ψ são chamados energia total, cinética e potencial de ψ , respectivamente.

Uma comparação entre $T(p)$ e T_ψ indica que a transição da mecânica clássica para a quântica é obtida substituindo o momento p pelo operador $-i\hbar\nabla$ aplicado a ψ e substituindo o produto escalar em \mathbb{R}^d pelo produto interno em $L^2(\mathbb{R}^d)$. Assim, definimos o operador de momento por $p = -i\hbar\nabla$. Portanto

$$T_\psi = \frac{1}{2m} \int_{\mathbb{R}^d} |(p\psi)(x)|^2 dx.$$

Associado à função energia cinética $T(p)$, consideramos o operador

$$T = \frac{1}{2m} p \cdot p = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta,$$

chamado operador energia cinética, que atua em uma função por

$$(T\psi)(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^d \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_j^2}(x).$$

Associado à função $V(x)$, consideramos o operador V , chamado operador potencial, que atua em uma função por

$$(V\psi)(x) = V(x)\psi(x).$$

Portanto, associado à função $H(x, p)$ temos o operador de Hamilton (ou hamiltoniano) definido por

$$H = T + V.$$

Se ψ é uma função suave, podemos justificar a igualdade

$$\frac{1}{2m}\langle p\psi, p\psi \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\langle \psi, \Delta\psi \rangle$$

e escrever

$$\mathcal{E}(\psi) = \langle \psi, H\psi \rangle.$$

Usando o funcional $\mathcal{E}(\psi)$, podemos considerar o problema de minimização

$$E_0 = \inf \left\{ \mathcal{E}(\psi) \mid \psi \in L^2(\mathbb{R}^d) \text{ e } \int_{\mathbb{R}^d} |\psi(x)|^2 dx = 1 \right\}.$$

Suponha que $V(x)$ é tal que a constante E_0 existe. Se o ínfimo é um mínimo, isto é, se $E_0 = \mathcal{E}(\psi_0)$ para algum ψ_0 , então E_0 é chamada **energia do estado fundamental** e ψ_0 é chamado **estado fundamental**. Suponha que a partícula possua um estado fundamental. Então um cálculo simples nos leva à equação

$$H\psi_0 = E_0\psi_0.$$

Em geral, E_0 e ψ_0 não são a única solução da **equação de Schrödinger independente do tempo**

$$H\psi = E\psi.$$

Essa equação normalmente possui um número infinito de soluções E_n e ψ_n , chamadas autovalores e autovetores de H . Os números reais E_n representam as possíveis energias da partícula e ψ_n os estados correspondentes, chamados autoestados.

Consideremos agora a equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi.$$

Uma boa estratégia para investigar uma equação diferencial linear é primeiro obter soluções específicas e então construir soluções mais complicadas usando as soluções específicas. Para obter soluções explícitas, muitas vezes é útil procurar soluções de um tipo particular. Vamos usar o método de separação de variáveis e procurar por soluções do tipo

$$\psi(x, t) = \varphi(x)\chi(t).$$

Substituindo essa expressão na equação de Schrödinger, obtemos

$$\dot{\chi} = -\frac{iE}{\hbar}\chi$$

e

$$H\varphi = E\varphi,$$

onde E é a constante de separação. As soluções da equação acima consistem de múltiplos da função

$$\chi(t) = e^{-iEt/\hbar}.$$

A equação para φ é precisamente a equação de Schrödinger independente do tempo. Portanto, se E e φ são um autovalor e um autovetor de H , então

$$\psi(x, t) = \varphi(x)e^{-iEt/\hbar}$$

é uma solução da equação de Schrödinger. Soluções desse tipo são chamadas soluções estacionárias pois, embora $\psi(x, t)$ dependa do tempo, a densidade de probabilidade

$$|\psi(x, t)|^2 = |\varphi(x)|^2$$

não depende do tempo. Além disso, se supormos que as autofunções φ_n formam uma base para $L^2(\mathbb{R}^d)$, a solução geral da equação de Schrödinger é dada por

$$\psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \varphi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar},$$

onde c_1, c_2, c_3, \dots são constantes. Quando as autofunções φ_n não formam uma base para $L^2(\mathbb{R}^d)$, vamos usar uma teoria mais geral para estudar a equação $H\varphi = E\varphi$, chamada teoria espectral. Nessa teoria, o espectro de H é o conjunto de “autovalores generalizados” de H . Essas observações sugerem que as propriedades de $\psi(x, t)$ estão relacionadas às propriedades espectrais do hamiltoniano. Portanto, uma etapa essencial na análise de sistemas quânticos é investigar o espectro de H .