



FELIPE ANDRADE VELOZO

**ALGUMAS RELAÇÕES ENTRE A MECÂNICA
QUÂNTICA E O CÁLCULO DE
PROBABILIDADE**

LAVRAS – MG

2011

FELIPE ANDRADE VELOZO

**ALGUMAS RELAÇÕES ENTRE A MECÂNICA QUÂNTICA E O
CÁLCULO DE PROBABILIDADE**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agropecuária, área de concentração em Estatística e Experimentação Agropecuária, para a obtenção do título de Mestre.

Orientador
Dr. Marcelo Silva de Oliveira

**LAVRAS – MG
2011**

**Ficha Catalográfica Preparada pela Divisão de Processos Técnicos da
Biblioteca da UFLA**

Veloze, Felipe Andrade.

Algumas relações entre a mecânica quântica e o cálculo de probabilidade / Felipe Andrade Veloze. – Lavras : UFLA, 2011.
146 p. : il.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de Lavras, 2011.
Orientador: Marcelo Silva de Oliveira.
Bibliografia.

1. Função conjunta de probabilidade. 2. Teoria da perturbação dependente do tempo. 3. Sistemas físicos. I. Universidade Federal de Lavras. II. Título.

CDD – 519.2

FELIPE ANDRADE VELOZO

**ALGUMAS RELAÇÕES ENTRE A MECÂNICA QUÂNTICA E O
CÁLCULO DE PROBABILIDADE**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agropecuária, área de concentração em Estatística e Experimentação Agropecuária, para a obtenção do título de Mestre.

APROVADA em 24 de fevereiro de 2011.

Dr. Eric Batista Ferreira UNIFAL-MG
Dr. Lucas Monteiro Chaves UFLA
Dr. Ulisses Azevedo Leitão UFLA

Dr. Marcelo Silva de Oliveira
Orientador

**LAVRAS – MG
2011**

AGRADECIMENTOS

À Universidade Federal de Lavras, pelas oportunidades concedidas na minha vida acadêmica.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), pela concessão da bolsa de estudos.

Aos professores do Departamento de Ciências Exatas, pelo conhecimento transmitido e pela disposição em ajudar.

Ao professor Dr. Marcelo Silva de Oliveira, pela orientação, paciência, dedicação e seus ensinamentos, de grande importância para esta dissertação e para a minha vida acadêmica, desde os tempos de graduação.

Aos meus colegas Alexandre, Andressa, Caroline, Hernani, Izabela, Lucas, Luzia, Thalita e Vanessa que me ajudaram nas minhas dúvidas.

Aos meus colegas Diogo e Jair que me ajudaram no mestrado e me ajudaram a passar para a nova etapa da minha vida, o doutorado.

À minha família, meu irmão Gustavo e minha mãe Neuza, por tudo, pelo apoio, carinho e amor.

RESUMO

A Mecânica Quântica trata-se de uma teoria não muito intuitiva. Seus conceitos dão novas interpretações sobre a matéria e seu comportamento, tornando mais difícil sua compreensão do que a Mecânica Clássica. Esta dissertação foi feita procurando ajudar na compreensão da Mecânica Quântica e sua intercessão com a Estatística. A dissertação visa alcançar uma formulação da Mecânica Quântica a partir dos postulados da Estatística acrescidos de postulados que são necessários para completar a descrição. Com isso pretende-se alcançar uma outra forma de visualização da Mecânica Quântica, assim como existe a abordagem pela Mecânica Ondulatória e pela Mecânica das Matrizes. Formulada a Mecânica Quântica conforme o formalismo convencional na Estatística, apresenta-se dois sistemas físicos com a finalidade de exemplificar alguns dos conceitos estudados: o oscilador harmônico simples formulado na Mecânica Quântica e um paralelo com o mesmo sistema formulado na Mecânica Clássica com aleatorização da variável tempo, e o átomo de hidrogênio.

Palavras-chave: Função conjunta de probabilidade. Teoria da perturbação dependente do tempo. Sistemas físicos

ABSTRACT

Quantum Mechanics is a theory not very intuitive. Its concepts give new interpretations on the matter and its behavior, making it more difficult than understanding Classical Mechanics. This dissertation was done for trying to help in the understanding of Quantum Mechanics and its intercession with the Statistics. The dissertation aims to achieve a formulation of Quantum Mechanics from the postulates of Statistics plus postulates that are needed to complete the description. Therewith intend to achieve another form of visualization of Quantum Mechanics, as there is the approach by Wave Mechanics and Matrix Mechanics. Two physical systems are presented for the purpose of illustrating some of the concepts studied: the simple formulated harmonic oscillator in in Quantum Mechanics and a parallel with the same system in Classical Mechanics with randomization of the variable time, and the hydrogen atom.

Keywords: Joint distribution function. Time-dependent perturbation theory. Physical systems.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	Representação dos vetores a e b	32
Figura 2	Representação do produto escalar $a \cdot b$	33
Figura 3	Experiência de dupla fenda: a) balas sendo disparadas; b) ondas produzidas na água; c) elétrons sendo emitidos. $\psi_1(x)$ é a densidade de probabilidade dos objetos (balas no caso (a) e elétron no caso (c)) provenientes da fenda F_1 , $\psi_2(x)$ é a densidade de probabilidade dos objetos provenientes da fenda F_2 , $\psi_3(x)$ densidade de probabilidade mista (combinação) dos objetos provenientes das fendas F_1 e F_2 , $I_1, \text{máx}$ é a intensidade máxima das ondas provenientes da fenda F_1 , $I_2, \text{máx}$ é a intensidade máxima das ondas provenientes da fenda F_2 e $I_3, \text{máx}$ é a intensidade da combinação das ondas provenientes das fendas F_1 e F_2	57
Figura 4	Representação do modelo da partícula-relógio em fase com sua onda de propagação.....	59

LISTA DE GRÁFICOS

Gráfico 1	Densidade de probabilidade para o oscilador harmônico simples clássico.....	117
Gráfico 2	Gráficos das funções densidade de probabilidade para o oscilador harmônico simples quântico no espaço de coordenadas (gráficos à esquerda) e no espaço de momentos (gráficos à direita) com valores de k crescentes (de cima para baixo).....	127
Gráfico 3	Gráfico dos cinco primeiros níveis da função de onda do espaço das coordenadas do oscilador harmônico simples e gráfico da energia potencial (parábola).....	128
Gráfico 4	Gráfico dos cinco primeiros níveis da função densidade de probabilidade da variável aleatória espaço do oscilador harmônico simples e gráfico da energia potencial (parábola).....	129
Gráfico 5	Gráfico do centésimo nível da função de onda do espaço das coordenadas do oscilador harmônico simples.....	130
Gráfico 6	Gráfico do centésimo nível da função densidade de probabilidade da variável aleatória posição do oscilador harmônico simples.....	130
Gráfico 7	Gráfico do centésimo nível da função de onda do espaço dos momentos do oscilador harmônico simples.....	131
Gráfico 8	Gráfico do centésimo nível da função densidade de probabilidade da variável aleatória momento do oscilador harmônico simples.....	131
Gráfico 9	Gráficos bidimensional (à esquerda) e tridimensional (à direita) da densidade de probabilidade do orbital do átomo de hidrogênio com números quânticos: $n = 3$, $\ell = 0$ e $m = 0$	139

- Gráfico 10 Gráficos bidimensional (à esquerda) e tridimensional (à direita) da densidade de probabilidade do orbital do átomo de hidrogênio com números quânticos: $n = 3$, $\ell = 1$ e $m = 0$ 140
- Gráfico 11 Gráficos bidimensional (à esquerda) e tridimensional (à direita) da densidade de probabilidade do orbital do átomo de hidrogênio com números quânticos: $n = 3$, $\ell = 1$ e $m = 1$ 140
- Gráfico 12 Gráficos bidimensional (à esquerda) e tridimensional (à direita) da densidade de probabilidade do orbital do átomo de hidrogênio com números quânticos: $n = 3$, $\ell = 2$ e $m = 0$ 141
- Gráfico 13 Gráficos bidimensional (à esquerda) e tridimensional (à direita) da densidade de probabilidade do orbital do átomo de hidrogênio com números quânticos: $n = 3$, $\ell = 2$ e $m = 1$ 141
- Gráfico 14 Gráficos bidimensional (à esquerda) e tridimensional (à direita) da densidade de probabilidade do orbital do átomo de hidrogênio com números quânticos: $n = 3$, $\ell = 2$ e $m = 2$ 142

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	12
1.1	Caracterização e justificativa do problema de pesquisa estudado.....	14
1.2	Objetivos	15
2	REFERENCIAL TEÓRICO	16
2.1	Estatística	17
2.1.1	σ -Álgebra	18
2.1.2	Probabilidade axiomática	20
2.1.3	Probabilidade condicional	25
2.1.4	Teorema da probabilidade total.....	28
2.1.5	Variáveis aleatórias	30
2.1.6	Técnica da transformação de variáveis aleatórias.....	30
2.2	Álgebra Linear.....	31
2.2.1	Produto escalar	31
2.2.2	Espaço vetorial. Notação de Dirac	33
2.2.3	Espaço dual	36
2.2.4	Produto interno.....	37
2.2.5	Desigualdade de Schwarz	38
2.2.6	Conjunto ortonormal e o procedimento de Gram-Schmidt	39
2.3	Séries de Fourier.....	40
2.3.1	Fórmulas de Euler	41
2.3.2	Funções com período arbitrário.....	46
2.3.3	Integral de Fourier	47
2.3.4	Forma complexa da integral de Fourier.....	49
2.3.5	Transformada de Fourier e sua inversa	54
2.4	Mecânica Quântica.....	54
2.4.1	Equação de Schrödinger independente do tempo	61
2.4.2	Equação de Schrödinger dependente do tempo.....	65
2.4.3	Quantidades físicas.....	66
2.4.4	Valor esperado de operadores.....	67
2.4.5	O Princípio da Incerteza	70
2.4.5.1	A mínima incerteza	72
2.4.5.2	O princípio da incerteza para posição e momento	74
2.4.5.3	A mínima incerteza entre posição e momento	75
2.4.6	Teoria da perturbação dependente do tempo.....	77
2.4.6.1	Sistemas de dois níveis de energia.....	78
2.4.6.2	Sistema de dois níveis com perturbação dependente do tempo	79
2.4.6.3	Correções dos coeficientes	82

2.4.6.4	Perturbação senoidal.....	85
3	METODOLOGIA	88
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	89
4.1	Interpretação estatística	90
4.1.1	Normalização da função de onda	92
4.1.2	Solução trivial	94
4.1.3	Independência do tempo para a probabilidade de Ω	94
4.1.4	Função de onda não convergente	98
4.1.5	Função conjunta de probabilidade	103
4.1.6	Variável aleatória momento linear	105
4.1.7	Valor esperado da posição	109
4.1.8	Momento linear.....	109
4.2	O oscilador harmônico simples	114
4.2.1	Distribuição de probabilidade do oscilador harmônico simples clássico	114
4.2.2	Solução do oscilador harmônico simples quântico pelo método algébrico.....	117
4.3	O átomo de hidrogênio	132
4.3.1	Equação angular	134
4.3.2	Equação radial.....	135
4.3.3	Normalização	137
5	CONCLUSÃO	143
	REFERÊNCIAS	145

1 INTRODUÇÃO

A Mecânica Quântica é considerada a área da Física Moderna mais importante, pois subsidia toda a Química Moderna e aplicações da Eletrônica e Física Nuclear. Porém, sua natureza é probabilística (ou estatística), e, por causa disto, faz com que a Estatística esteja ligada às explicações fundamentais da estrutura da matéria e da energia. Esclarecer esta interrelação é de fundamental importância para as duas ciências, e é este esclarecimento que abordamos nesta dissertação.

A Mecânica Quântica (ou Física Quântica, ou, ainda, Teoria Quântica) é o ramo da Física que estuda os fenômenos a níveis microscópicos, atômicos e nucleares. A palavra mecânica é designada para o estudo dos efeitos de forças sobre o movimento de corpos.

O estudo a esses níveis tomou bases rigorosamente científicas no período compreendido pelo final do século XIX e início do século XX, e levou os cientistas a impasses em relação a teorias bem estabelecidas na época. Os modelos daquela época eram baseados na Mecânica Clássica e na Teoria Eletromagnética. Niels Bohr (ENCICLOPÉDIA..., 1993), na criação de seu modelo, necessitou de postulados que estivessem de acordo com a Mecânica Clássica, mas por outro lado, iam de encontro à Teoria Eletromagnética. Embora tal modelo fosse insatisfatório em vários aspectos, impulsionou os estudos acrescentando a noção de quantização dada por Max Planck (ENCICLOPÉDIA..., 1993) na análise da radiação do corpo negro.

Louis de Broglie (ENCICLOPÉDIA..., 1993) postulou a existência da dualidade de comportamento de partícula e de onda para o movimento dos elétrons no átomo, levado pela explicação de Albert Einstein sobre o efeito fotoelétrico, na qual a luz em certas circunstâncias possui características de

onda, e em outras possui características de partícula. Este postulado mostrou que a Mecânica Clássica não era apta para descrever o movimento dos elétrons atômicos.

Erwin Schrödinger (ENCICLOPÉDIA..., 1993) formulou uma equação de movimento de acordo com a hipótese de comportamento ondulatório dos elétrons, surgindo assim, em 1926, a Mecânica Ondulatória, onde suas equações nos níveis macroscópicos levam às equações da Mecânica Clássica (princípio da correspondência), estabelecendo, assim, uma espécie de coerência (ou consistência) entre as duas mecânicas.

Werner Heisenberg (ENCICLOPÉDIA..., 1993), na mesma época, descreveu as transições atômicas de forma mais eficiente que a descrição dada pelo modelo de Bohr (que empregava quantidades não acessíveis à experimentação) empregando quantidades acessíveis por meio de um algoritmo que logo foi reconhecido como matrizes, surgindo assim a Mecânica das Matrizes, que mais tarde mostrou-se equivalente à Mecânica Ondulatória.

A junção formal dessas descrições deu origem à Mecânica Quântica, principalmente depois dos trabalhos de Paul Dirac e Von Newmann (informação verbal)¹. Enquanto não se introduz conceitos e resultados da Teoria da Relatividade na Mecânica Quântica, esta se denomina Mecânica Quântica Não-Relativística. A junção da Mecânica Quântica com a Teoria da Relatividade Especial denomina-se Mecânica Quântica Relativística. A junção com a Teoria da Relatividade Geral ainda resiste à ser feita, constituindo hoje num dos maiores problemas não resolvidos da Física. Esta dissertação abordará apenas a Mecânica Quântica Não-Relativística.

Além de introduzir o conceito de quantização, todos esses estudos levaram finalmente a uma declaração de aleatoriedade fundamental nos sistemas

¹ Informe repassado pelo Dr. Marcelo S. de Oliveira durante reunião com seu orientado, Felipe A. Velozo, em 2011.

físicos, formalizada através do postulado de Max Born (GRIFFITHS, 1995), o qual declara que a quantidade fundamental da Mecânica Quântica, denominada função de onda, deve ser interpretada como associada a uma probabilidade de ocorrência de resultados observados. Este postulado, longe de ser apenas um detalhe, introduziu definitivamente conceitos probabilísticos e estatísticos dentro da Mecânica Quântica, e, em certo sentido, de um modo muito mais profundo e intrínseco, do que tais conceitos existentes na Mecânica Estatística por exemplo. Em função disso, há na literatura duas tendências para tratar os conceitos probabilísticos: i) a criação do “cálculo quântico de probabilidade”, que altera os postulados de Kolmogorov para adequar-se aos estranhos fenômenos quânticos. ii) a manutenção do cálculo clássico de probabilidades, tomando-se cuidado em uma exata e adequada definição de espaços amostrais e σ -álgebras, e esta é a tendência que será adotada neste projeto.

1.1 Caracterização e justificativa do problema de pesquisa estudado

O problema de pesquisa abordado nesta dissertação é estender os resultados do cálculo convencional de probabilidades (doravante denominado simplesmente como Cálculo de Probabilidades) para a Mecânica Quântica, com um adequado embasamento. O problema dual deste primeiro problema é pesquisar se resultados da teoria quântica podem ser levados para o cálculo de probabilidades de modo a iluminar novos discernimentos e aplicações.

A justificativa concentra-se tanto em contribuir para um melhor discernimento dos conceitos probabilísticos na teoria quântica, quanto vice-versa, permitir um melhor entrosamento entre as áreas de Estatística e Física.

1.2 Objetivos

De um modo mais detalhado, esta dissertação tem como objetivo geral estudar a Mecânica Quântica sob ótica da Estatística, uma vez que a Mecânica Quântica trabalha essencialmente com as distribuições de probabilidades associadas aos possíveis valores das quantidades físicas. Apesar da Estatística ser uma parte fundamental da Mecânica Quântica, ela é colocada normalmente em segundo plano, havendo somente a preocupação de apresentá-la para uma introdução do conceito de probabilidade, tendo todo o restante da teoria dispensada de ser apresentada, ainda que seus conceitos apareçam durante toda a Mecânica Quântica, mas sendo apresentada num enfoque da Física, um tanto quanto superficial.

Pesquisar a respeito da Mecânica Quântica nos livros de Física, e apresentar alguns aspectos estatísticos contidos na Mecânica Quântica com um pouco mais de formalismo e explicitação conforme é convencional na Estatística define o objetivo desta dissertação.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

As várias seções desta dissertação estão descritas a seguir.

A seção de **Álgebra Linear** McMahon (2006) é para apresentar a notação de Dirac (bras e kets) e apresentar material que servirá de apoio para interpretações da Mecânica Quântica, como, por exemplo, o Princípio da Incerteza.

A seção de **Estatística** apresenta os conceitos de espaço amostral, σ -álgebra e variáveis aleatórias Magalhães (2006). Também possui um desenvolvimento da probabilidade axiomática, probabilidade condicional e a técnica da transformação de variáveis Mood, Graybill e Boes (1973).

A seção de **Séries de Fourier** Kreyszig (2006) apresenta como funções podem ser representadas através de séries de funções senos e cossenos, também apresenta uma generalização das séries de funções senos e cossenos de períodos com valores naturais para valores reais. Tais representações são úteis para se resolver determinadas equações diferenciais. Mais detalhes sobre séries e transformações de Fourier podem ser encontrados em Kammler (2007).

O início da seção **Mecânica Quântica**, a seção **Equação de Schrödinger Independente do Tempo** e a seção **Equação de Schrödinger Dependente do Tempo** foram embasadas em Alcácer (2007) para trazer a discussão sobre a dualidade partícula-onda e a formulação da equação de Schrödinger.

As seções **Quantidades Físicas**, **Valor Esperado de Operadores**, **O Princípio da Incerteza** e **Teoria da Perturbação Dependente do Tempo**, apresentam uma discussão sobre a representação de quantidades físicas como operadores, o significado do valor esperado das medidas, a relação de

imprecisão na medição de duas quantidades e a transição entre dois estados, tais seções foram embasadas em Griffiths (1995).

Uma descrição mais detalhada sobre a Teoria das Perturbações aplicada na Mecânica Quântica pode ser encontrada em Levine et al. (2005).

As soluções de equações diferenciais podem ser encontradas em Kreyszig (2006), onde o método de resolução por meio das séries de potências é melhor descrito (foi desse método que se obteve os polinômios apresentados na solução do átomo de hidrogênio). Por meio deste método também é possível obter uma outra forma para se resolver o sistema do oscilador harmônico. Em Kreyszig (2006) também se encontra o método da separação de variáveis para a resolução de equações diferenciais parciais e um capítulo sobre funções ortogonais.

Os polinômios e suas formas diferentes de se representar, assim como diversas equações diferenciais, e também a parte de comutadores entre outras áreas da Matemática utilizadas nesta dissertação, podem ser encontradas em Weisstein (2003), o qual nada mais é que uma enciclopédia contendo diversas demonstrações das mais diversas áreas da Matemática.

Conceitos de operadores, lógica, espaços vetoriais entre outros, pode ser encontrados em Loomis e Sternberg (1990).

2.1 Estatística

Nesta seção serão introduzidos conceitos de Estatística que serão usados nesta dissertação. Maiores detalhes podem ser obtidos em Magalhães (2006) e em Mood, Graybill e Boes (1973).

2.1.1 σ -Álgebra

Seja \mathcal{A} um conjunto de subconjuntos de Ω , então \mathcal{A} será considerada uma σ -álgebra se obedecer as seguintes propriedades:

- a) $\Omega \in \mathcal{A}$, portanto o espaço amostral Ω tem que pertencer à σ -álgebra \mathcal{A} .
- b) $((A \in \mathcal{A}) \wedge (A \subset \Omega)) \Leftrightarrow (C_{\Omega}A \in \mathcal{A})$, ou seja, um conjunto A (contido em Ω) pertence a \mathcal{A} se, e somente se, seu complemento em relação a Ω também pertencer a \mathcal{A} .
- c) $(\{A_k: (k \in \mathbb{N}^*) \wedge (A_k \subset \Omega)\} \subset \mathcal{A}) \Rightarrow (\bigcup_{k \in \mathbb{N}^*} A_k \in \mathcal{A})$, ou seja, se um conjunto formado por conjuntos A_k (em que k é um número natural não nulo) estiver contido em \mathcal{A} , então a união dos conjuntos pertencentes a tal conjunto também pertence a \mathcal{A} . Note que o fato de que k pertença a \mathbb{N}^* significa que não há um limite para o valor máximo de k , ou seja, k cresce indefinidamente, tornando assim o conjunto formado por A_k um conjunto de dimensão infinita. Note também que o símbolo de implicação (\Rightarrow) foi utilizado, portanto pode ocorrer de que o conjunto resultante da união de quaisquer A_k (contidos em Ω) pertença a \mathcal{A} , sem que nenhum dos conjuntos A_k estejam presentes em \mathcal{A} .

PROPRIEDADE 1: O conjunto vazio \emptyset pertence à σ -álgebra \mathcal{A} .

DEMONSTRAÇÃO: A partir das propriedades (a) e (b) tem-se

$$(\Omega \in \mathcal{A}) \Leftrightarrow (C_{\Omega}\Omega \in \mathcal{A})$$

mas pela definição de complemento tem-se

$$C_{\Omega}\Omega = \{w: (w \in \Omega) \wedge (w \notin \Omega)\} = \emptyset$$

portanto

$$(\Omega \in \mathcal{A}) \Leftrightarrow (\emptyset \in \mathcal{A})$$

ou seja, o conjunto vazio é elemento de \mathcal{A} . ■

PROPRIEDADE 2: Se um conjunto de conjuntos A_k (com k pertencente a \mathbb{N}^*) está contido na σ -álgebra \mathcal{A} , então a interseção $\bigcap_{k \in \mathbb{N}^*} A_k$ também pertencerá à σ -álgebra \mathcal{A} .

DEMONSTRAÇÃO: Para demonstrar que a interseção também está contido na σ -álgebra, suponha que

$$\{A_k : (k \in \mathbb{N}^*) \wedge (A_k \subset \Omega)\} \subset \mathcal{A}$$

ou seja

$$(\forall k \in \mathbb{N}^*)(A_k \in \mathcal{A})$$

Então da propriedade (b), tem-se

$$(\forall k \in \mathbb{N}^*)(A_k \in \mathcal{A}) \Rightarrow (\forall k \in \mathbb{N}^*)(C_\Omega A_k \in \mathcal{A})$$

da propriedade (c), tem-se

$$(\{A_k : (k \in \mathbb{N}^*) \wedge (A_k \subset \Omega)\} \subset \mathcal{A}) \Rightarrow \left(\bigcup_{k \in \mathbb{N}^*} A_k \in \mathcal{A} \right)$$

Através das leis de Morgan tem-se

$$\bigcup_{k \in \mathbb{N}^*} C_\Omega A_k = C_\Omega \left(\bigcap_{k \in \mathbb{N}^*} A_k \right)$$

portanto

$$\left(\bigcup_{k \in \mathbb{N}^*} A_k \in \mathcal{A} \right) \Leftrightarrow \left(C_\Omega \left(\bigcap_{k \in \mathbb{N}^*} A_k \right) \in \mathcal{A} \right)$$

da propriedade (b) tem-se

$$\left(C_\Omega \left(\bigcap_{k \in \mathbb{N}^*} A_k \right) \in \mathcal{A} \right) \Leftrightarrow \left(\bigcap_{k \in \mathbb{N}^*} A_k \in \mathcal{A} \right)$$

assim demonstra-se que a operação de interseção também pertence à σ -álgebra. ■

Para se provar que a união finita de n conjuntos pertence à σ -álgebra, basta considerar $A_k = \emptyset$, $\forall k > n$ e para o caso da interseção finita de n conjuntos, basta considerar $A_k = \Omega$, $\forall k > n$.

2.1.2 Probabilidade axiomática

Os axiomas de Kolmogorov definem probabilidade numa formulação rigorosa, permitindo generalizar o conceito, definindo conceitos que anteriormente eram não rigorosas e firmados principalmente na intuição.

Seja uma função \mathcal{P} com domínio definido na σ -álgebra \mathcal{A} de subconjuntos Ω e contra-domínio no intervalo fechado $[0; 1]$, ou seja

$$\mathcal{P}: \mathcal{A} \rightarrow [0; 1]$$

tal função será considerada uma função de probabilidade se obedecer os seguintes axiomas:

- a) $\mathcal{P}(\Omega) \equiv 1$, o que significa que probabilidade de ocorrer o evento representado pelo conjunto Ω (o conjunto Ω contém todos os resultados possíveis de se obter na experiência, portanto o evento correspondente é o de obter qualquer um dos resultados possíveis) é igual a 1. O conjunto Ω é um evento certo de ocorrer, ou seja, com toda certeza ele ocorrerá quando for realizado a experiência.
- b) $(\forall A \in \mathcal{A})(\mathcal{P}(A) \geq 0)$, o que significa que qualquer probabilidade de ocorrer um evento qualquer representado por um conjunto $A \subseteq \Omega$ será sempre maior ou igual a 0, ou em outras palavras, probabilidade não pode ser um número negativo. Se a probabilidade de um evento for igual a 0, interpreta-se que esse evento é impossível de ocorrer.
- c) $\left(\left\{ A_k: (k \in \mathbb{N}^*) \wedge (\forall k_1 \in \mathbb{N}^*)(\forall k_2 \in \mathbb{N}^*) \left((k_1 \neq k_2) \Rightarrow (A_{k_1} \cap A_{k_2} \equiv \emptyset) \right) \right\} \subset \mathcal{A} \right) \Rightarrow \left(\mathcal{P} \left(\bigcup_{k \in \mathbb{N}^*} A_k \right) \equiv \sum_{k \in \mathbb{N}^*} \mathcal{P}(A_k) \right)$. Um

conjunto formado por conjuntos A_k (com o índice k pertencente ao conjunto \mathbb{N}^*) de forma que se forem tomados dois conjuntos (A_{k_1} e A_{k_2}) diferentes (ou seja, $k_1 \neq k_2$), então a interseção de ambos será o conjunto vazio ($A_{k_1} \cap A_{k_2} \equiv \emptyset$). Se tal conjunto, formado obedecendo essas restrições (tais restrições definem os conjuntos denominados disjuntos), estiver contido na σ -álgebra \mathcal{A} , então a probabilidade da união de seus elementos A_k (ou seja, $\mathcal{P}(\bigcup_{k \in \mathbb{N}^*} A_k)$) será igual à soma das probabilidades de cada um de seus elementos (ou seja, $\sum_{k \in \mathbb{N}^*} \mathcal{P}(A_k)$). Note que é um conjunto de conjuntos (ou família de conjuntos, um conjunto que contém outros conjuntos como elementos seus) e, portanto, seus elementos são conjuntos.

Denomina-se espaço de probabilidade à trinca $(\Omega, \mathcal{A}, \mathcal{P})$.

PROPRIEDADE 1: A probabilidade do complementar de um conjunto A é dada por

$$(\forall A \in \mathcal{A})(\mathcal{P}(C_{\Omega}A) = 1 - \mathcal{P}(A))$$

para todo conjunto A pertencente à σ -álgebra \mathcal{A} .

DEMONSTRAÇÃO: Uma vez que o conjunto A pertença ao domínio da função \mathcal{P} , ou seja, pertença à σ -álgebra \mathcal{A} , então, pelo axioma (b) da σ -álgebra, tem-se que $C_{\Omega}A$ também pertence ao domínio da função \mathcal{P} . Além disso

$$A \cap C_{\Omega}A = \emptyset$$

portanto, pelo axioma (b) da função de probabilidade, tem-se

$$\mathcal{P}(A \cup C_{\Omega}A) = \mathcal{P}(A) + \mathcal{P}(C_{\Omega}A)$$

mas como a união $A \cup C_{\Omega}A$ é igual ao conjunto Ω (qualquer que seja o conjunto A) e o valor da probabilidade de $\mathcal{P}(\Omega)$ é igual a 1 pelo axioma (a) da função de probabilidade, então

$$\mathcal{P}(\Omega) = \mathcal{P}(A) + \mathcal{P}(C_{\Omega}A)$$

$$1 = \mathcal{P}(A) + \mathcal{P}(C_{\Omega} A)$$

$$\mathcal{P}(C_{\Omega} A) = 1 - \mathcal{P}(A) \blacksquare$$

PROPRIEDADE 2: A probabilidade do conjunto vazio é dada por

$$\mathcal{P}(\emptyset) = 0$$

DEMONSTRAÇÃO: Como foi visto na propriedade (1) da σ -álgebra, o complementar $C_{\Omega}\Omega$ é igual ao conjunto vazio \emptyset , da mesma forma $C_{\Omega}\emptyset$ é igual a Ω . Utilizando-se da propriedade (1) da função de probabilidade, tem-se

$$\mathcal{P}(\emptyset) = \mathcal{P}(C_{\Omega}\Omega) = 1 - \underbrace{\mathcal{P}(\Omega)}_{=1} = 0 \blacksquare$$

PROPRIEDADE 3: A probabilidade de um conjunto A pode ser reescrito na forma de soma de probabilidades

$$(\forall A \in \mathcal{A})(\forall B \in \mathcal{A})(\mathcal{P}(A) = \mathcal{P}(A \cap B) + \mathcal{P}(A \cap C_{\Omega} B))$$

quaisquer que sejam os conjuntos A e B pertencentes à σ -álgebra \mathcal{A} .

DEMONSTRAÇÃO: Uma vez que todo conjunto pertencente à σ -álgebra \mathcal{A} é subconjunto de Ω

$$(A \in \mathcal{A}) \Leftrightarrow (A \subset \Omega)$$

portanto

$$A = A \cap \Omega$$

Tomando-se um conjunto B pertencente à σ -álgebra \mathcal{A} , portanto pelo axioma (b) da σ -álgebra tem-se

$$(B \in \mathcal{A}) \Leftrightarrow (C_{\Omega} B \in \mathcal{A})$$

como a união $B \cup C_{\Omega} B$ é igual ao conjunto Ω (qualquer que seja o conjunto B), portanto

$$A = A \cap \Omega = A \cap (B \cup C_{\Omega} B) = (A \cap B) \cup (A \cap C_{\Omega} B)$$

Realizando a interseção de $(A \cap B)$ com $(A \cap C_{\Omega} B)$, tem-se

$$\begin{aligned} (A \cap B) \cap (A \cap C_{\Omega} B) &= A \cap B \cap A \cap C_{\Omega} B = \underbrace{(A \cap A)}_{=A} \cap \underbrace{(B \cap C_{\Omega} B)}_{=\emptyset} = A \cap \emptyset = \\ &= \emptyset \end{aligned}$$

portanto os conjuntos de $(A \cap B)$ e $(A \cap C_\Omega B)$ são disjuntos e pelo axioma (c) da função de probabilidade tem-se

$$\begin{aligned}\mathcal{P}(A) &= \mathcal{P}((A \cap B) \cup (A \cap C_\Omega B)) = \mathcal{P}(A \cap B) + \mathcal{P}(A \cap C_\Omega B) \\ \mathcal{P}(A) &= \mathcal{P}(A \cap B) + \mathcal{P}(A \cap C_\Omega B) \blacksquare\end{aligned}$$

PROPRIEDADE 4: A probabilidade do conjunto $C_A B$ é dada por

$$(\forall A \in \mathcal{A})(\forall B \in \mathcal{A})(\mathcal{P}(C_A B) = \mathcal{P}(A \cap B) - \mathcal{P}(A))$$

para quaisquer conjuntos A e B pertencentes à σ -álgebra \mathcal{A} .

DEMONSTRAÇÃO: Pela definição de complementar de um conjunto B em relação ao conjunto A

$$C_A B \stackrel{\text{def}}{=} \{x: (x \in A) \wedge (x \notin B)\}$$

uma vez que todo conjunto pertencente à σ -álgebra \mathcal{A} é subconjunto de Ω , tem-se

$$C_A B = A \cap C_\Omega B$$

ou seja, para pertencer à interseção, o elemento x deve pertencer ao conjunto A e não pertencer ao conjunto B , exatamente como na definição de complementar de um conjunto B em relação ao conjunto A . Utilizando-se da propriedade (3) da função de probabilidade, tem-se

$$\mathcal{P}(A) = \mathcal{P}(A \cap B) + \mathcal{P}(A \cap C_\Omega B) = \mathcal{P}(A \cap B) + \mathcal{P}(C_A B)$$

portanto

$$\mathcal{P}(C_A B) = \mathcal{P}(A \cap B) - \mathcal{P}(A) \blacksquare$$

PROPRIEDADE 5: A probabilidade da união de dois conjuntos A e B é dada por

$$(\forall A \in \mathcal{A})(\forall B \in \mathcal{A})(\mathcal{P}(A \cup B) = \mathcal{P}(A) + \mathcal{P}(B) - \mathcal{P}(B \cap A))$$

para quaisquer conjuntos A e B pertencentes à σ -álgebra \mathcal{A} .

DEMONSTRAÇÃO: Considere a seguinte equação

$$A \cup (B \cap C_\Omega A) = (A \cup B) \cap (A \cup C_\Omega A) = (A \cup B) \cap \Omega = A \cup B$$

portanto a união $A \cup B$ pode ser reescrita como $A \cup (B \cap C_{\Omega}A)$. Calculando a interseção do conjunto A com o conjunto representado por $(B \cap C_{\Omega}A)$, tem-se

$$A \cap (B \cap C_{\Omega}A) = (A \cap C_{\Omega}A) \cap B = \emptyset \cap B = \emptyset$$

portanto A e $(B \cap C_{\Omega}A)$ são disjuntos e, utilizando-se do axioma (c) da função de probabilidade, tem-se

$$\mathcal{P}(A \cup (B \cap C_{\Omega}A)) = \mathcal{P}(A) + \mathcal{P}(B \cap C_{\Omega}A)$$

$$\mathcal{P}(A \cup B) = \mathcal{P}(A) + \mathcal{P}(B \cap C_{\Omega}A)$$

A partir da propriedade (3) da função de probabilidade tem-se

$$\mathcal{P}(B) = \mathcal{P}(B \cap A) + \mathcal{P}(B \cap C_{\Omega}A)$$

$$\mathcal{P}(B \cap C_{\Omega}A) = \mathcal{P}(B) - \mathcal{P}(B \cap A)$$

portanto

$$\mathcal{P}(A \cup B) = \mathcal{P}(A) + \mathcal{P}(B \cap C_{\Omega}A) = \mathcal{P}(A) + \mathcal{P}(B) - \mathcal{P}(B \cap A) \blacksquare$$

PROPRIEDADE 6: A probabilidade de um conjunto A subconjunto de ou igual a B é restringida pela desigualdade

$$(\forall B \in \mathcal{A})(\forall A \subseteq B)(\mathcal{P}(A) \leq \mathcal{P}(B))$$

para qualquer conjunto B pertencente à σ -álgebra e para qualquer conjunto A subconjunto ou igual a B .

DEMONSTRAÇÃO: Uma vez que A é subconjunto ou igual a B , tem-se

$$A \cap B = A$$

Utilizando-se da propriedade (3) da função de probabilidade, tem-se

$$\mathcal{P}(B) = \mathcal{P}(B \cap A) + \mathcal{P}(B \cap C_{\Omega}A)$$

$$\mathcal{P}(B) = \mathcal{P}(A) + \mathcal{P}(B \cap C_{\Omega}A)$$

portanto

$$\mathcal{P}(A) = \mathcal{P}(B) - \mathcal{P}(B \cap C_{\Omega}A)$$

Pelo axioma (b) da função de probabilidade, tem-se que $\mathcal{P}(B \cap C_{\Omega}A) \geq 0$, portanto

$$\mathcal{P}(A) \leq \mathcal{P}(B)$$

para qualquer conjunto A subconjunto ou igual a B ■

PROPRIEDADE 7: A probabilidade de um conjunto A é restringida pela desigualdade

$$(\forall A \in \mathcal{A})(0 \leq \mathcal{P}(A) \leq 1)$$

para todo conjunto A pertencente à σ -álgebra \mathcal{A} .

DEMONSTRAÇÃO: Uma vez que todo conjunto pertencente à σ -álgebra \mathcal{A} é subconjunto ou é igual a Ω , tem-se pela propriedade (6) da função de probabilidade

$$\mathcal{P}(A) \leq \mathcal{P}(\Omega)$$

Pelo axioma (a) da função de probabilidade tem-se que $\mathcal{P}(\Omega)$ é igual a 1, portanto,

$$\mathcal{P}(A) \leq \mathcal{P}(\Omega) = 1$$

$$\mathcal{P}(A) \leq 1$$

Pelo axioma (b) da função de probabilidade, tem-se

$$0 \leq \mathcal{P}(A) \leq 1 \blacksquare$$

2.1.3 Probabilidade condicional

Para se calcular a probabilidade de um evento representado pelo conjunto A uma vez que um determinado evento representado pelo conjunto B já ocorreu (em que todos os elementos dos conjuntos A e B pertencem ao mesmo conjunto Ω) define-se a probabilidade condicional

$$\mathcal{P}(A|B) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\mathcal{P}(A \cap B)}{\mathcal{P}(B)}$$

Uma vez que o evento representado pelo conjunto B ocorreu, está claro que a probabilidade $\mathcal{P}(B)$ deve ser diferente de 0, caso contrário o evento representado pelo conjunto B seria um evento impossível de ocorrer e não seria

possível calcular a probabilidade condicional $\mathcal{P}(A|B)$ pois o denominador da fórmula não pode ser nulo.

A probabilidade condicional $\mathcal{P}(A|B)$ é frequentemente referida como a *probabilidade de A dado B*, ou seja, a probabilidade de ocorrer o evento representado pelo conjunto A dado que o evento representado pelo conjunto B já ocorreu.

PROPRIEDADE 1: A probabilidade condicional do conjunto B dado B é dada por

$$\mathcal{P}(B|B) = 1$$

para todo conjunto B pertencente à σ -álgebra \mathcal{A} cuja probabilidade $\mathcal{P}(B)$ seja diferente de 0.

DEMONSTRAÇÃO: utilizando-se da definição da probabilidade condicional, tem-se

$$\mathcal{P}(B|B) = \frac{\mathcal{P}(B \cap B)}{\mathcal{P}(B)} = \frac{\mathcal{P}(B)}{\mathcal{P}(B)} = 1$$

sendo $\mathcal{P}(B)$ diferente de 0. ■

PROPRIEDADE 2: A probabilidade condicional do conjunto A dado B é restringido pela desigualdade

$$0 \leq \mathcal{P}(A|B) \leq 1$$

para quaisquer conjuntos A e B pertencentes à σ -álgebra \mathcal{A} , sendo B um conjunto cuja probabilidade $\mathcal{P}(B)$ seja diferente de 0.

PROPRIEDADE 3: A probabilidade da interseção dos conjuntos A e B é dada por

$$\mathcal{P}(A \cap B) = \mathcal{P}(A|B) \cdot \mathcal{P}(B)$$

para quaisquer conjuntos A e B pertencentes à σ -álgebra \mathcal{A} , sendo B um conjunto cuja probabilidade $\mathcal{P}(B)$ seja diferente de 0.

PROPRIEDADE 4: A probabilidade condicional da interseção $(A \cap B)$ dado B é dada por

$$\mathcal{P}(A \cap B|B) = \mathcal{P}(A|B)$$

para quaisquer conjuntos A e B pertencentes à σ -álgebra \mathcal{A} , sendo B um conjunto cuja probabilidade $\mathcal{P}(B)$ seja diferente de 0.

PROPRIEDADE 5: A probabilidade condicional da interseção $(A \cap B)$ dado a união $(A \cup B)$ é dada por

$$\mathcal{P}(A \cap B|A \cup B) = \frac{\mathcal{P}(A \cap B)}{\mathcal{P}(A \cup B)}$$

para quaisquer conjuntos A e B pertencentes à σ -álgebra \mathcal{A} , sendo A e B conjuntos cuja probabilidade $\mathcal{P}(A \cup B)$ seja diferente de 0.

PROPRIEDADE 6: A probabilidade condicional do conjunto Ω dado B é dada por

$$\mathcal{P}(\Omega|B) = 1$$

para qualquer conjunto B pertencente à σ -álgebra \mathcal{A} , sendo B um conjunto cuja probabilidade $\mathcal{P}(B)$ seja diferente de 0.

PROPRIEDADE 7: A probabilidade condicional do conjunto vazio \emptyset dado B é dada por

$$\mathcal{P}(\emptyset|B) = 0$$

para qualquer conjunto B pertencente à σ -álgebra \mathcal{A} , sendo B um conjunto cuja probabilidade $\mathcal{P}(B)$ seja diferente de 0.

PROPRIEDADE 8: A probabilidade condicional da união de conjuntos disjuntos $\bigcup_{k \in \mathbb{N}^*} A_k$ dado B é dada por

$$\mathcal{P}\left(\bigcup_{k \in \mathbb{N}^*} A_k \mid B\right) = \sum_{k \in \mathbb{N}^*} \mathcal{P}(A_k|B)$$

para quaisquer conjuntos A_k e B pertencentes à σ -álgebra \mathcal{A} , sendo B um conjunto cuja probabilidade $\mathcal{P}(B)$ seja diferente de 0.

PROPRIEDADE 9: A probabilidade condicional do complementar $C_B A$ dado B é dada por

$$\mathcal{P}(C_B A|B) = 1 - \mathcal{P}(A|B)$$

para quaisquer conjuntos A e B pertencentes à σ -álgebra \mathcal{A} , sendo B um conjunto cuja probabilidade $\mathcal{P}(B)$ seja diferente de 0.

PROPRIEDADE 10: A probabilidade condicional de A dado B pode ser reescrita na forma de soma de duas probabilidades condicionais

$$\mathcal{P}(A|B) = \mathcal{P}(A \cap C|B) + \mathcal{P}(A \cap C_B^c|B)$$

para quaisquer conjuntos A , B e C pertencentes à σ -álgebra \mathcal{A} , sendo B um conjunto cuja probabilidade $\mathcal{P}(B)$ seja diferente de 0.

PROPRIEDADE 11: A probabilidade condicional da união $(A \cup C)$ dado B é dada por

$$\mathcal{P}(A \cup C|B) = \mathcal{P}(A|B) + \mathcal{P}(C|B) - \mathcal{P}(A \cap C|B)$$

para quaisquer conjuntos A , B e C pertencentes à σ -álgebra \mathcal{A} , sendo B um conjunto cuja probabilidade $\mathcal{P}(B)$ seja diferente de 0.

PROPRIEDADE 12: A probabilidade condicional de A dado B , sendo A subconjunto ou igual a C é restringida pela desigualdade

$$\mathcal{P}(A|B) \leq \mathcal{P}(C|B)$$

para quaisquer conjuntos A , B e C pertencentes à σ -álgebra \mathcal{A} , sendo B um conjunto cuja probabilidade $\mathcal{P}(B)$ seja diferente de 0 e sendo A um subconjunto ou igual a C .

2.1.4 Teorema da probabilidade total

Considere um conjunto de conjuntos B_k que formem uma partição de Ω , dado por

$$\left\{ B_k : (k \in \bar{n}) \wedge (\forall k_1 \in \bar{n})(\forall k_2 \in \bar{n}) \left((k_1 \neq k_2) \Rightarrow (B_{k_1} \cap B_{k_2} \equiv \emptyset) \right) \wedge \right. \\ \left. \wedge \left(\bigcup_{k \in \bar{n}} B_k \equiv \Omega \right) \right\}$$

em que todo B_k pertence à σ -álgebra \mathcal{A}

$$(\forall k \in \bar{n})(B_k \in \mathcal{A})$$

Considerando um conjunto A pertencente à σ -álgebra \mathcal{A} , portanto A é subconjunto ou é igual a Ω

$$A \subseteq \Omega \therefore A \cap \Omega = A$$

mas como $\bigcup_{k \in \bar{n}} B_k \equiv \Omega$, tem-se

$$A = A \cap \Omega = A \cap \left(\bigcup_{k \in \bar{n}} B_k \right) = \bigcup_{k \in \bar{n}} (A \cap B_k)$$

Realizando a interseção dos conjuntos $(A \cap B_{k_1})$ e $(A \cap B_{k_2})$ para todo k_1 e k_2 , tem-se

$$(A \cap B_{k_1}) \cap (A \cap B_{k_2}) = A \cap (B_{k_1} \cap B_{k_2})$$

mas como

$$(\forall k_1 \in \bar{n})(\forall k_2 \in \bar{n}) \left((k_1 \neq k_2) \Rightarrow (B_{k_1} \cap B_{k_2} \equiv \emptyset) \right)$$

portanto

$$(k_1 \neq k_2) \Rightarrow \left((A \cap B_{k_1}) \cap (A \cap B_{k_2}) = A \cap (B_{k_1} \cap B_{k_2}) = A \cap \emptyset = \emptyset \right)$$

assim os conjuntos formados por $(A \cap B_{k_1}) \cap (A \cap B_{k_2})$ são disjuntos e, portanto, pode-se aplicar o axioma (c) da função de probabilidade

$$\mathcal{P}(A) = \mathcal{P} \left(\bigcup_{k \in \bar{n}} (A \cap B_k) \right) = \sum_{k \in \bar{n}} \mathcal{P}(A \cap B_k)$$

Se as probabilidades dos conjuntos B_k forem diferentes de 0, para todo k , então existirá a probabilidade condicional $\mathcal{P}(A|B_k)$ para todo k , assim, tem-se

$$\mathcal{P}(A|B_k) = \frac{\mathcal{P}(A \cap B_k)}{\mathcal{P}(B_k)} \therefore \mathcal{P}(A \cap B_k) = \mathcal{P}(A|B_k) \cdot \mathcal{P}(B_k)$$

portanto

$$\mathcal{P}(A) = \sum_{k \in \bar{n}} \mathcal{P}(A|B_k) \cdot \mathcal{P}(B_k)$$

desta forma, pode-se obter a probabilidade de qualquer evento a partir de uma soma de probabilidades condicionais, desde que elas existam.

2.1.5 Variáveis aleatórias

Denomina-se variável aleatória, toda função $X: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ tal que a imagem de sua inversa $X^{(-1)}(w)$ pertença à σ -álgebra \mathcal{A} , ou seja

$$X^{(-1)}(\mathbb{I}) = \{w: (w \in \Omega) \wedge (X(w) \in \mathbb{I})\} \in \mathcal{A}$$

em que $\mathbb{I} \subseteq \mathbb{R}$ é um intervalo.

2.1.6 Técnica da transformação de variáveis aleatórias

A técnica da transformação é uma técnica para se conseguir as funções de densidade de probabilidade de funções de variáveis aleatórias, ou seja, a partir da densidade de probabilidade $f_X(x)$ da variável aleatória $X(w)$, pretende-se encontrar a densidade de probabilidade $f_Y(y)$ da variável aleatória $Y(w) = g(X(w))$ que é um função da variável aleatória $X(w)$. Existe algumas suposições a serem satisfeitas para se aplicar a técnica, que são:

- d) $(\forall x \in \mathfrak{X})(\exists! y \in \mathfrak{Y})(y = g(x)) \wedge (\forall y \in \mathfrak{Y})(\exists! x \in \mathfrak{X})(y = g(x))$
- e) ou seja, $y = g(x)$ é uma função biunívoca, com $y \in \mathfrak{Y}$ e $x \in \mathfrak{X}$.
- f) A função inversa deve possuir a primeira derivada contínua e não nula no conjunto \mathfrak{Y} .

Satisfeitas essas condições, então tem-se

$$f_Y(y) = \left| \frac{dg^{(-1)}(y)}{dy} \right| \cdot f_X(g^{(-1)}(y)) \cdot J_{\mathfrak{Y}}(y)$$

com função acumulada

$$\mathcal{P}_Y(y \in (-\infty; u]) = \int_{-\infty}^u f_X(g^{(-1)}(y)) \cdot J_{\mathfrak{Y}}(y) \cdot \left| \frac{dg^{(-1)}(y)}{dy} \right| dy$$

2.2 Álgebra Linear

Nesta seção serão tratados os aspectos relacionados a vetores, tais como produto escalas, operações entre vetores e entre escalares e vetores. Maiores detalhes podem ser obtidos em McMahon (2006).

2.2.1 Produto escalar

Suponha dois vetores bidimensionais \vec{a} e \vec{b} , representados por

$$\vec{a} = a_1 \cdot \vec{i} + a_2 \cdot \vec{j}$$

$$\vec{b} = b_1 \cdot \vec{i} + b_2 \cdot \vec{j}$$

o produto escalar é definido por

$$\begin{aligned} \vec{a} \cdot \vec{b} &= (a_1 \cdot \vec{i} + a_2 \cdot \vec{j}) \cdot (b_1 \cdot \vec{i} + b_2 \cdot \vec{j}) = \\ &= a_1 \cdot b_1 \cdot \vec{i} \cdot \vec{i} + a_1 \cdot b_2 \cdot \vec{i} \cdot \vec{j} + a_2 \cdot b_1 \cdot \vec{j} \cdot \vec{i} + a_2 \cdot b_2 \cdot \vec{j} \cdot \vec{j} = \\ &= a_1 \cdot b_1 + a_2 \cdot b_2 \\ \vec{a} \cdot \vec{b} &\stackrel{\text{def}}{=} a_1 \cdot b_1 + a_2 \cdot b_2 \end{aligned}$$

em que

$$\begin{cases} \vec{i} \cdot \vec{i} \stackrel{\text{def}}{=} 1 \\ \vec{j} \cdot \vec{j} \stackrel{\text{def}}{=} 1 \\ \vec{i} \cdot \vec{j} \stackrel{\text{def}}{=} 0 \\ \vec{j} \cdot \vec{i} \stackrel{\text{def}}{=} 0 \end{cases}$$

TEOREMA 1: Sejam \vec{a} e \vec{b} dois vetores bidimensionais, então o produto escalar deles é dado por

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = \|\vec{a}\| \cdot \|\vec{b}\| \cdot \cos \alpha$$

em que α é o ângulo entre eles

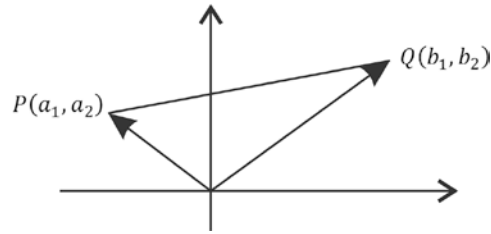


Figura 1 Representação dos vetores \vec{a} e \vec{b}

DEMONSTRAÇÃO: Considerando o vetor \vec{a} com sendo representada pela reta orientada \overrightarrow{OP} e o vetor \vec{b} pela reta orientada \overrightarrow{OQ} . Do triângulo POQ , tem-se que o tamanho da reta \overrightarrow{PQ} é dado por

$$\|\overrightarrow{PQ}\|^2 = \|\overrightarrow{OP}\|^2 + \|\overrightarrow{OQ}\|^2 - 2 \cdot \|\overrightarrow{OP}\| \cdot \|\overrightarrow{OQ}\| \cdot \cos \alpha$$

$$\cos \alpha = \frac{\|\overrightarrow{OP}\|^2 + \|\overrightarrow{OQ}\|^2 - \|\overrightarrow{PQ}\|^2}{2 \cdot \|\overrightarrow{OP}\| \cdot \|\overrightarrow{OQ}\|}$$

mas como $\|\overrightarrow{OP}\| = \|\vec{a}\|$ e $\|\overrightarrow{OQ}\| = \|\vec{b}\|$, e também tem-se

$$\|\overrightarrow{OP}\|^2 = a_1^2 + a_2^2$$

$$\|\overrightarrow{OQ}\|^2 = b_1^2 + b_2^2$$

então

$$\cos \alpha = \frac{(a_1^2 + a_2^2) + (b_1^2 + b_2^2) - [(a_1 - b_1)^2 + (a_2 - b_2)^2]}{2 \cdot \|\overrightarrow{OP}\| \cdot \|\overrightarrow{OQ}\|}$$

$$\cos \alpha = \frac{2 \cdot a_1 \cdot b_1 + 2 \cdot a_2 \cdot b_2}{2 \cdot \|\overrightarrow{OP}\| \cdot \|\overrightarrow{OQ}\|}$$

portanto

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = \|\vec{a}\| \cdot \|\vec{b}\| \cdot \cos \alpha \blacksquare$$

O produto escalar

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = \|\vec{a}\| \cdot \|\vec{b}\| \cdot \cos \alpha$$

pode ser interpretado da seguinte maneira: é a multiplicação do tamanho do vetor \vec{a} pelo tamanho da projeção do vetor \vec{b} em \vec{a} , ou seja

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = \|\vec{a}\| \cdot (\|\vec{b}\| \cdot \cos \alpha)$$

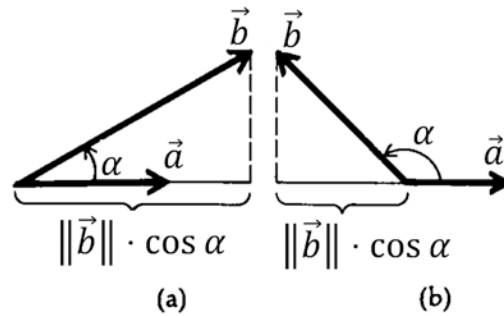


Figura 2 Representação do produto escalar $\vec{a} \cdot \vec{b}$

2.2.2 Espaço vetorial. Notação de Dirac

Um espaço vetorial consiste de um conjunto de vetores ($|\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle, \dots$) – ou também chamados *ket* – e de um conjunto de escalares (a, b, c, \dots) os quais são sujeitos a duas operações (adição vetorial e multiplicação escalar).

Um vetor é representado por uma n-upla ordenada de escalares pertencentes ao conjunto dos números complexos

$$|\alpha\rangle = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}, \quad \{a_1, a_2, \dots, a_n\} \subset \mathbb{C}$$

ou seja

$$|\alpha\rangle \in \mathbb{C}^{\bar{n}}, \quad \bar{n} \stackrel{\text{def}}{=} \{u: (u \in \mathbb{N}^*) \wedge (u \leq n)\}$$

A fórmula anterior significa que $|\alpha\rangle$ pertence ao espaço de funções com domínio \bar{n} (conjunto formado por números naturais não nulos que são menores ou iguais a n) e contradomínio \mathbb{C} (conjunto dos números complexos), ou seja, para todo k pertencente a \bar{n} , tem-se que $a_k \equiv a(k)$ é uma função definida por $a: \bar{n} \rightarrow \mathbb{C}$ e retorna um valor complexo.

A adição vetorial de dois vetores ($|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$) resulta em outro vetor $|\gamma\rangle$

$$|\alpha\rangle = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}, \quad |\beta\rangle = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \therefore |\alpha\rangle + |\beta\rangle = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 + b_1 \\ a_2 + b_2 \\ \vdots \\ a_n + b_n \end{bmatrix} = |\gamma\rangle$$

Propriedade comutativa da adição vetorial

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\beta\rangle + |\alpha\rangle$$

Propriedade associativa da adição vetorial

$$|\alpha\rangle + (|\beta\rangle + |\gamma\rangle) = (|\alpha\rangle + |\beta\rangle) + |\gamma\rangle$$

Existência de identidade aditiva ($|0\rangle$) em que

$$(\forall \bar{n})(\exists! |0\rangle \in \mathbb{C}^{\bar{n}})(\forall |\alpha\rangle \in \mathbb{C}^{\bar{n}})(|0\rangle + |\alpha\rangle = |\alpha\rangle)$$

A fórmula anterior significa que para todo conjunto \bar{n} , existe um, e um só, vetor nulo $|0\rangle$ (com dimensão igual a n) que para todo vetor $|\alpha\rangle$ (com dimensão igual a n) a soma é igual ao próprio $|\alpha\rangle$, ou seja, existem diversos vetores nulos $|0\rangle$ com dimensões diferentes, mas não existe mais do que um vetor nulo de mesma dimensão. O vetor nulo pode ser representado por

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

Existência de negativo onde para qualquer vetor $|\alpha\rangle$ tem-se um vetor $|- \alpha\rangle$ em que

$$(\forall \bar{n})(\forall |\alpha\rangle \in \mathbb{C}^{\bar{n}})(\exists! (-|\alpha\rangle) \in \mathbb{C}^{\bar{n}})((|\alpha\rangle + (-|\alpha\rangle) = |0\rangle) \wedge (|0\rangle \in \mathbb{C}^{\bar{n}}))$$

A fórmula anterior significa que para todo conjunto \bar{n} , para todo vetor $|\alpha\rangle$ (com dimensão igual a n) existe um, e um só, vetor negativo $(-|\alpha\rangle)$ (com dimensão igual a n) em que a soma de ambos resulta no vetor nulo $|0\rangle$ (com dimensão igual a n). O vetor $(-|\alpha\rangle)$ pode ser representado por

$$|\alpha\rangle = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \Leftrightarrow -|\alpha\rangle = \begin{bmatrix} -a_1 \\ -a_2 \\ \vdots \\ -a_n \end{bmatrix}$$

e, portanto, substituindo na equação imediatamente anterior, tem-se

$$|\alpha\rangle + (-|\alpha\rangle) = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -a_1 \\ -a_2 \\ \vdots \\ -a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 - a_1 \\ a_2 - a_2 \\ \vdots \\ a_n - a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

A multiplicação escalar entre um escalar a e um vetor $|\beta\rangle$ resulta em outro vetor $|\gamma\rangle$

$$|\beta\rangle = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \therefore a \cdot |\beta\rangle = \begin{bmatrix} a \cdot b_1 \\ a \cdot b_2 \\ \vdots \\ a \cdot b_n \end{bmatrix} = |\gamma\rangle$$

Propriedade distributiva da multiplicação escalar (escalar a), em relação à adição de vetores ($|\beta\rangle$ e $|\gamma\rangle$)

$$a \cdot (|\beta\rangle + |\gamma\rangle) = a \cdot |\beta\rangle + a \cdot |\gamma\rangle$$

Propriedade distributiva da multiplicação escalar, em relação à adição de escalares

$$(a + b) \cdot |\gamma\rangle = a \cdot |\gamma\rangle + b \cdot |\gamma\rangle$$

Propriedade associativa da multiplicação escalar

$$a \cdot (b \cdot |\gamma\rangle) = (a \cdot b) \cdot |\gamma\rangle$$

Existência de identidade para a multiplicação escalar

$$1 \cdot |\alpha\rangle = |\alpha\rangle$$

Multiplicação de um vetor qualquer pelo escalar 0

$$0 \cdot |\alpha\rangle = |0\rangle$$

Uma combinação linear de vetores ($|\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle, \dots$) é uma expressão da seguinte forma

$$c_1 \cdot |\alpha\rangle + c_2 \cdot |\beta\rangle + c_3 \cdot |\gamma\rangle + \dots = |\lambda\rangle$$

Um vetor $|\lambda\rangle$ é dito ser linearmente independente em relação ao conjunto $|\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle, \dots$ se não puder ser escrito como uma combinação linear deles, ou seja

$$c_1 \cdot |\alpha\rangle + c_2 \cdot |\beta\rangle + c_3 \cdot |\gamma\rangle + \dots = |\lambda\rangle$$

$$(\forall (c_1, c_2, c_3, \dots)) (|\lambda\rangle \neq c_1 \cdot |\alpha\rangle + c_2 \cdot |\beta\rangle + c_3 \cdot |\gamma\rangle + \dots)$$

ou de outra forma

$$c_1 \cdot |\alpha\rangle + c_2 \cdot |\beta\rangle + c_3 \cdot |\gamma\rangle + \dots + c_n \cdot |\lambda\rangle = |0\rangle \Rightarrow c_1 = c_2 = c_3 = \dots = c_n = 0$$

Um conjunto de vetores é chamado de gerador do espaço se todo vetor puder ser escrito como uma combinação linear deles. O conjunto de vetores linearmente independentes que geram um espaço são chamados bases. O número de bases usadas para se gerar um espaço é chamado a dimensão do espaço. Assim, qualquer vetor pode ser escrito da seguinte forma

$$|\alpha\rangle = a_1 \cdot |e_1\rangle + a_2 \cdot |e_2\rangle + \dots + a_n \cdot |e_n\rangle$$

em que $|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots, |e_n\rangle$ são as bases do espaço e n é a dimensão do espaço.

2.2.3 Espaço dual

Complexo conjugado de um vetor $|\alpha\rangle$ é dado por

$$|\alpha\rangle^* = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}^* = \begin{bmatrix} a_1^* \\ a_2^* \\ \vdots \\ a_n^* \end{bmatrix}$$

POSTULADO: Para todo ket $|\alpha\rangle$ existe um correspondente vetor no espaço dual, chamado *bra*, denotado por $\langle\alpha|$ que também é uma n-tupla ordenada de escalares que também pertencem ao conjunto dos números complexos. A correspondência é dada por

$$\langle\alpha| = |\alpha\rangle^\dagger = (|\alpha\rangle^*)^\top = \begin{bmatrix} a_1^* \\ a_2^* \\ \vdots \\ a_n^* \end{bmatrix}^\top = [a_1^* \quad a_2^* \quad \dots \quad a_n^*]$$

ou seja, é a matriz transposta com seus valores sendo os complexos conjugados da matriz coluna $|\alpha\rangle$. O símbolo \dagger (dagger) significa que, o vetor dual $\langle\alpha| = |\alpha\rangle^\dagger$ é o hermitiano adjunto, ou simplesmente adjunto do vetor $|\alpha\rangle$, que é simplesmente a aplicação da operação de conjugação e a transposta na matriz.

Da mesma forma que o espaço vetorial, o espaço dual possui as mesmas propriedades.

A soma de dois vetores ($\langle\alpha|$ e $\langle\beta|$) do espaço dual é dada por

$$\begin{aligned}\langle\alpha| + \langle\beta| &= [a_1^* \ a_2^* \ \dots \ a_n^*] + [b_1^* \ b_2^* \ \dots \ b_n^*] = \\ &= [a_1^* + b_1^* \ a_2^* + b_2^* \ \dots \ a_n^* + b_n^*] = \begin{bmatrix} a_1 + b_1 \\ a_2 + b_2 \\ \vdots \\ a_n + b_n \end{bmatrix}^\dagger = (\langle\alpha| + \langle\beta|)^\dagger\end{aligned}$$

A multiplicação escalar entre um escalar a e um vetor $\langle\beta|$ do espaço dual é dado por

$$\begin{aligned}a \cdot \langle\beta| &= a \cdot [b_1^* \ b_2^* \ \dots \ b_n^*] = [a \cdot b_1^* \ a \cdot b_2^* \ \dots \ a \cdot b_n^*] = \\ &= \begin{bmatrix} a \cdot b_1 \\ a \cdot b_2 \\ \vdots \\ a \cdot b_n \end{bmatrix}^\dagger = (a \cdot \langle\beta|)^\dagger\end{aligned}$$

2.2.4 Produto interno

Considerando-se dois vetores $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$, tem-se que o *produto interno* deles é dado por

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \langle\alpha| \cdot |\beta\rangle = [a_1^* \ a_2^* \ \dots \ a_n^*] \cdot \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} = \sum_{k=1}^n (a_k^* \cdot b_k)$$

que nada mais é do que o produto matricial de uma matriz linha com uma matriz coluna.

O produto interno possui as seguintes propriedades

$$\begin{aligned}\langle \alpha | \beta \rangle &= \langle \alpha | \cdot | \beta \rangle = [a_1^* \quad a_2^* \quad \dots \quad a_n^*] \cdot \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} = [b_1 \quad b_2 \quad \dots \quad b_n] \cdot \begin{bmatrix} a_1^* \\ a_2^* \\ \vdots \\ a_n^* \end{bmatrix} = \\ &= [b_1^* \quad b_2^* \quad \dots \quad b_n^*]^* \cdot \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = (\langle \beta | \cdot | \alpha \rangle)^* = \langle \beta | \alpha \rangle^*\end{aligned}$$

Verifica-se assim que o produto interno $\langle \alpha | \beta \rangle$ é diferente de $\langle \beta | \alpha \rangle$, exceto no caso em que $\langle \alpha | \beta \rangle$ seja um número real.

O produto vetorial de qualquer vetor com ele mesmo é um número não negativo, ou seja

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = \sum_{k=1}^n (a_k^* \cdot a_k) = \sum_{k=1}^n \|a_k\|^2$$

assim, tem-se

$$(\forall k \in \bar{n})(\|a_k\|^2 \geq 0) \therefore \langle \alpha | \alpha \rangle \geq 0$$

A *norma* de um vetor é dada por

$$\|a_k\| = \sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle}$$

e ela representa uma generalização da noção de “comprimento do vetor”.

2.2.5 Desigualdade de Schwarz

A *desigualdade de Schwarz* declara que

$$\|\langle \alpha | \beta \rangle\|^2 \leq \langle \alpha | \alpha \rangle \cdot \langle \beta | \beta \rangle$$

ou seja, o quadrado do tamanho da projeção do vetor α em β é menor ou igual ao quadrado do tamanho do vetor α vezes o quadrado do tamanho do vetor β .

Demonstração: Considere o seguinte vetor

$$|\gamma\rangle = |\alpha\rangle - \frac{\langle \beta | \alpha \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle} \cdot |\beta\rangle$$

Lembrando que

$$\langle \gamma | \gamma \rangle \geq 0$$

tem-se

$$\begin{aligned} \langle \gamma | \gamma \rangle &= \left(|\alpha\rangle - \frac{\langle \beta | \alpha \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle} \cdot |\beta\rangle \right)^\dagger \cdot \left(|\alpha\rangle - \frac{\langle \beta | \alpha \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle} \cdot |\beta\rangle \right) = \\ &= \left(\langle \alpha | - \frac{\langle \alpha | \beta \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle} \cdot \langle \beta | \right) \cdot \left(|\alpha\rangle - \frac{\langle \beta | \alpha \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle} \cdot |\beta\rangle \right) = \\ &= \langle \alpha | \alpha \rangle - \frac{\langle \beta | \alpha \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle} \cdot \langle \alpha | \beta \rangle - \frac{\langle \alpha | \beta \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle} \cdot \langle \beta | \alpha \rangle + \frac{\langle \alpha | \beta \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle} \cdot \frac{\langle \beta | \alpha \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle} \cdot \langle \beta | \beta \rangle = \\ &= \langle \alpha | \alpha \rangle - \frac{\|\langle \beta | \alpha \rangle\|^2}{\langle \beta | \beta \rangle} - \frac{\|\langle \alpha | \beta \rangle\|^2}{\langle \beta | \beta \rangle} + \frac{\|\langle \alpha | \beta \rangle\|^2}{\langle \beta | \beta \rangle} = \langle \alpha | \alpha \rangle - \frac{\|\langle \alpha | \beta \rangle\|^2}{\langle \beta | \beta \rangle} \end{aligned}$$

Então

$$\begin{aligned} 0 &\leq \langle \alpha | \alpha \rangle - \frac{\|\langle \alpha | \beta \rangle\|^2}{\langle \beta | \beta \rangle} \\ \frac{\|\langle \alpha | \beta \rangle\|^2}{\langle \beta | \beta \rangle} &\leq \langle \alpha | \alpha \rangle \\ \|\langle \alpha | \beta \rangle\|^2 &\leq \langle \alpha | \alpha \rangle \cdot \langle \beta | \beta \rangle \end{aligned}$$

2.2.6 Conjunto ortonormal e o procedimento de Gram-Schmidt

Na Mecânica Quântica é desejável se ter um conjunto de bases ortonormais, ou seja, conjunto mínimo de vetores pelos quais se pode representar qualquer outro vetor. As bases ortonormais devem obedecer à seguinte equação

$$\langle e_{k_1} | e_{k_2} \rangle \equiv \delta_{k_1, k_2}$$

É possível a partir de um conjunto de vetores $|\lambda_k\rangle$ se extrair um conjunto de bases ortonormais $|e_k\rangle$ através do procedimento Gram-Schmidt, que leva em consideração a idéia de que o produto interno é uma generalização do produto de vetores em três dimensões, onde o produto retorna a projeção de um vetor em um segundo vetor. Começando por definir

$$|\kappa_1\rangle = |\lambda_1\rangle$$

e

$$|e_1\rangle = \frac{1}{\langle \kappa_1 | \kappa_1 \rangle} \cdot |\kappa_1\rangle$$

Tem-se a primeira base ortonormal $|e_1\rangle$, a partir dele

O segundo passo é definir $|\kappa_2\rangle$ através de $|\lambda_2\rangle$, tomando o cuidado de se retirar a projeção sobre o vetor $|\lambda_1\rangle$ já definido

$$|\kappa_2\rangle = |\lambda_2\rangle - \frac{\langle \kappa_1 | \lambda_2 \rangle}{\langle \kappa_1 | \kappa_1 \rangle} \cdot |\kappa_1\rangle$$

e

$$|e_2\rangle = \frac{1}{\langle \kappa_2 | \kappa_2 \rangle} \cdot |\kappa_2\rangle$$

e assim, recursivamente

$$\begin{aligned} |\kappa_3\rangle &= |\lambda_3\rangle - \frac{\langle \kappa_1 | \lambda_3 \rangle}{\langle \kappa_1 | \kappa_1 \rangle} \cdot |\kappa_1\rangle - \frac{\langle \kappa_2 | \lambda_3 \rangle}{\langle \kappa_2 | \kappa_2 \rangle} \cdot |\kappa_2\rangle, & |e_3\rangle &= \frac{1}{\langle \kappa_3 | \kappa_3 \rangle} \cdot |\kappa_3\rangle \\ |\kappa_4\rangle &= |\lambda_4\rangle - \frac{\langle \kappa_1 | \lambda_4 \rangle}{\langle \kappa_1 | \kappa_1 \rangle} \cdot |\kappa_1\rangle - \frac{\langle \kappa_2 | \lambda_4 \rangle}{\langle \kappa_2 | \kappa_2 \rangle} \cdot |\kappa_2\rangle - \frac{\langle \kappa_3 | \lambda_4 \rangle}{\langle \kappa_3 | \kappa_3 \rangle} \cdot |\kappa_3\rangle, \\ |e_4\rangle &= \frac{1}{\langle \kappa_4 | \kappa_4 \rangle} \cdot |\kappa_4\rangle \end{aligned}$$

Generalizando

$$|\kappa_n\rangle = |\lambda_n\rangle - \sum_{j=1}^{n-1} \left(\frac{\langle \kappa_j | \lambda_n \rangle}{\langle \kappa_j | \kappa_j \rangle} \cdot |\kappa_j\rangle \right), \quad |e_n\rangle = \frac{1}{\langle \kappa_n | \kappa_n \rangle} \cdot |\kappa_n\rangle$$

2.3 Séries de Fourier

Nesta seção serão introduzidos a série de Fourier, a integral de Fourier e a transformada de Fourier, que são uma forma de se reescrever uma função em termos de funções seno e cosseno, de maneira semelhante à série de Taylor. Maiores detalhes podem ser obtidos em Kreyszig (2006) e em Kammler (2007).

2.3.1 Fórmulas de Euler

Seja $f(x)$ uma função periódica, que por definição, pode ser representada da seguinte forma

$$f(x + T) = f(x)$$

onde T representa o período da função. A partir dessa equação pode-se chegar a seguinte equação

$$\begin{aligned} f(x + 2 \cdot T) &= f((x + T) + T) = f(x + T) = f(x) \\ (\forall n \in \mathbb{Z})(f(x + n \cdot T) &= f(x)) \end{aligned}$$

Supondo que o período de $f(x)$ seja $T = 2 \cdot \pi$, e supondo que a função $f(x)$ seja integrável em qualquer intervalo, então pode-se reescrever a função como sendo uma soma de funções senos e cossenos

$$f(x) \equiv a_0 + \sum_{n=1}^{+\infty} [a_n \cdot \cos(n \cdot x) + b_n \cdot \text{sen}(n \cdot x)]$$

restando a tarefa de determinar os coeficientes a_0 , a_n e b_n .

Começando por determinar o coeficiente a_n , integrando ambos os membros da equação, tem-se

$$\begin{aligned} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) dx &= \int_{-\pi}^{\pi} \left\{ a_0 + \sum_{n=1}^{+\infty} [a_n \cdot \cos(n \cdot x) + b_n \cdot \text{sen}(n \cdot x)] \right\} dx = \\ &= a_0 \cdot \int_{-\pi}^{\pi} dx + \sum_{n=1}^{+\infty} \left[a_n \cdot \int_{-\pi}^{\pi} \cos(n \cdot x) dx + b_n \cdot \int_{-\pi}^{\pi} \text{sen}(n \cdot x) dx \right] \\ a_0 \cdot \int_{-\pi}^{\pi} dx &= a_0 \cdot [x]_{x=-\pi}^{x=\pi} = a_0 \cdot [\pi - (-\pi)] = a_0 \cdot 2 \cdot \pi \end{aligned}$$

Calculando a integral $\int_{-\pi}^{\pi} \cos(n \cdot x) dx$, tem-se

$$\begin{aligned} \int_{-\pi}^{\pi} \cos(n \cdot x) dx &= \frac{1}{n} \cdot \int_{-\pi}^{\pi} \cos(n \cdot x) \cdot (n \cdot dx) = \frac{1}{n} \cdot [\text{sen}(n \cdot x)]_{x=-\pi}^{x=\pi} = \\ &= \frac{1}{n} \cdot \left[\underbrace{\text{sen}(n \cdot \pi)}_{=0} - \underbrace{\text{sen}(-n \cdot \pi)}_{=0} \right] = 0 \end{aligned} \quad (1)$$

Calculando a integral $\int_{-\pi}^{\pi} \text{sen}(n \cdot x) dx$, tem-se

$$\begin{aligned} \int_{-\pi}^{\pi} \text{sen}(n \cdot x) dx &= \frac{1}{n} \cdot \int_{-\pi}^{\pi} \text{sen}(n \cdot x) \cdot (n \cdot dx) = \frac{1}{n} \cdot [-\cos(n \cdot x)]_{x=-\pi}^{x=\pi} = \\ &= \frac{1}{n} \cdot \left\{ -\cos(n \cdot \pi) - \left[-\underbrace{\cos(-n \cdot \pi)}_{=\cos(n \cdot \pi)} \right] \right\} = \frac{1}{n} \cdot [-\cos(n \cdot \pi) + \cos(n \cdot \pi)] = \\ &= 0 \end{aligned}$$

Substituindo na série os resultados encontrados para as integrais, tem-se

$$a_0 = \frac{1}{2 \cdot \pi} \cdot \int_{-\pi}^{\pi} f(x) dx$$

Para se determinar o coeficiente a_n , tem-se

$$\begin{aligned} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cdot \cos(m \cdot x) dx &= \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} \left\{ a_0 + \sum_{n=1}^{+\infty} [a_n \cdot \cos(n \cdot x) + b_n \cdot \text{sen}(n \cdot x)] \right\} \cdot \cos(m \cdot x) dx = \\ &= a_0 \cdot \int_{-\pi}^{\pi} \cos(m \cdot x) dx + \\ &+ \sum_{n=1}^{+\infty} \left[a_n \cdot \int_{-\pi}^{\pi} \cos(n \cdot x) \cdot \cos(m \cdot x) dx + b_n \cdot \right. \\ &\left. \cdot \int_{-\pi}^{\pi} \text{sen}(n \cdot x) \cdot \cos(m \cdot x) dx \right], \quad m \in \mathbb{N}^* \end{aligned} \quad (2)$$

Partindo para o cálculo de $\int_{-\pi}^{\pi} \cos(n \cdot x) \cdot \cos(m \cdot x) dx$ tem-se

$$\begin{aligned}
\int_{-\pi}^{\pi} \cos(n \cdot x) \cdot \cos(m \cdot x) dx &= \\
&= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\cos((n+m) \cdot x) + \cos((n-m) \cdot x)}{2} dx = \\
&= \frac{1}{2} \cdot \underbrace{\int_{-\pi}^{\pi} \cos\left(\underbrace{(n+m)}_{\substack{\in \mathbb{N}^* \\ =0}} \cdot x\right) dx}_{=0} + \frac{1}{2} \cdot \int_{-\pi}^{\pi} \cos((n-m) \cdot x) dx
\end{aligned}$$

Para $n \neq m$ tem-se

$$n \neq m \Rightarrow \int_{-\pi}^{\pi} \cos((n-m) \cdot x) dx = 0$$

pois $(n-m)$ se torna um número inteiro não nulo, e como em (1), o resultado da integral é nula. Para o caso em que $n = m$, tem-se

$$n = m \Rightarrow \int_{-\pi}^{\pi} \cos\left(\underbrace{(n-m)}_{=0} \cdot x\right) dx = \int_{-\pi}^{\pi} \underbrace{\cos 0}_{=1} dx = [x]_{x=-\pi}^{x=\pi} = 2 \cdot \pi$$

Substituindo na equação da integral $\int_{-\pi}^{\pi} \cos(n \cdot x) \cdot \cos(m \cdot x) dx$ os valores encontrados para os casos $n \neq m$ e $n = m$, tem-se

$$\begin{aligned}
n = m \Rightarrow \int_{-\pi}^{\pi} \cos(n \cdot x) \cdot \cos(m \cdot x) dx &= \int_{-\pi}^{\pi} \cos(n \cdot x) \cdot \cos(n \cdot x) dx = \\
&= \frac{1}{2} \cdot 2 \cdot \pi = \pi
\end{aligned}$$

Agora, calculando a integral $\int_{-\pi}^{\pi} \text{sen}(n \cdot x) \cdot \cos(m \cdot x) dx$, tem-se

$$\begin{aligned}
\int_{-\pi}^{\pi} \text{sen}(n \cdot x) \cdot \cos(m \cdot x) dx &= \\
&= \int_{-\pi}^0 \text{sen}(n \cdot x) \cdot \cos(m \cdot x) dx + \int_0^{\pi} \text{sen}(n \cdot x) \cdot \cos(m \cdot x) dx = \\
&= - \int_0^{-\pi} \text{sen}(n \cdot x) \cdot \cos(m \cdot x) dx + \int_0^{\pi} \text{sen}(n \cdot x) \cdot \cos(m \cdot x) dx
\end{aligned}$$

Realizando uma variação de parâmetros

$$x = u \Rightarrow \begin{cases} \operatorname{sen}(n \cdot x) = \operatorname{sen}(-n \cdot u) = -\operatorname{sen}(n \cdot u) \\ \cos(m \cdot x) = \cos(-m \cdot u) = \cos(m \cdot u) \\ x = 0 \Leftrightarrow u = 0 \\ x = -\pi \Leftrightarrow u = \pi \\ dx = -du \end{cases}$$

assim, tem-se

$$\begin{aligned} \int_{x=0}^{x=-\pi} \operatorname{sen}(n \cdot x) \cdot \cos(m \cdot x) dx &= \\ &= \int_{u=0}^{u=\pi} [-\operatorname{sen}(n \cdot u)] \cdot \cos(m \cdot u) \cdot (-du) = \int_0^{\pi} \operatorname{sen}(n \cdot u) \cdot \cos(m \cdot u) du \end{aligned}$$

permitindo, então, que se escreva que

$$\int_0^{-\pi} \operatorname{sen}(n \cdot x) \cdot \cos(m \cdot x) dx = \int_0^{\pi} \operatorname{sen}(n \cdot x) \cdot \cos(m \cdot x) dx$$

Substituindo na equação da integral $\int_{-\pi}^{\pi} \operatorname{sen}(n \cdot x) \cdot \cos(m \cdot x) dx$ tem-se que

$$\int_{-\pi}^{\pi} \operatorname{sen}(n \cdot x) \cdot \cos(m \cdot x) dx = 0$$

Substituindo na equação (2) os valores encontrados, fica determinado o coeficiente a_n

$$a_n = \frac{1}{\pi} \cdot \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cdot \cos(n \cdot x) dx, \quad n \in \mathbb{N}^*$$

Partindo para a determinação do coeficiente b_n , utilizando-se dos resultados já obtidos na determinação do coeficiente a_n , tem-se então

$$\begin{aligned}
& \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cdot \text{sen}(m \cdot x) dx = \\
& = \int_{-\pi}^{\pi} \left\{ a_0 + \sum_{n=1}^{+\infty} [a_n \cdot \cos(n \cdot x) + b_n \cdot \text{sen}(n \cdot x)] \right\} \cdot \text{sen}(m \cdot x) dx = \\
& = a_0 \cdot \int_{-\pi}^{\pi} \text{sen}(m \cdot x) dx + \\
& + \sum_{n=1}^{+\infty} \left[a_n \cdot \int_{-\pi}^{\pi} \cos(n \cdot x) \cdot \text{sen}(m \cdot x) dx + b_n \cdot \right. \\
& \left. \cdot \int_{-\pi}^{\pi} \text{sen}(n \cdot x) \cdot \text{sen}(m \cdot x) dx \right], \quad m \in \mathbb{N}^*
\end{aligned}$$

Partindo para o cálculo de $\int_{-\pi}^{\pi} \text{sen}(n \cdot x) \cdot \text{sen}(m \cdot x) dx$, pode-se reescrever da seguinte forma

$$\begin{aligned}
& \int_{-\pi}^{\pi} \text{sen}(n \cdot x) \cdot \text{sen}(m \cdot x) dx = \\
& = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\cos((n - m) \cdot x) - \cos((n + m) \cdot x)}{2} dx = \\
& = \frac{1}{2} \cdot \int_{-\pi}^{\pi} \cos((n - m) \cdot x) dx - \frac{1}{2} \cdot \underbrace{\int_{-\pi}^{\pi} \cos((n + m) \cdot x) dx}_{=0}
\end{aligned}$$

Utilizando-se dos resultados já obtidos anteriormente, e procedendo da mesma forma, tem-se

$$n = m \Rightarrow \int_{-\pi}^{\pi} \text{sen}(n \cdot x) \cdot \text{sen}(m \cdot x) dx = \pi$$

e assim fica determinado o coeficiente b_n

$$b_n = \frac{1}{\pi} \cdot \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cdot \text{sen}(n \cdot x) dx, \quad n \in \mathbb{N}^*$$

Substituindo na série trigonométrica os valores dos coeficientes calculados nas equações anteriores, tem-se

$$\begin{aligned}
 f(x) &= \\
 &= \frac{1}{2 \cdot \pi} \cdot \int_{-\pi}^{\pi} f(x) dx + \frac{1}{\pi} \cdot \\
 &\cdot \sum_{n=1}^{+\infty} \left[\cos(n \cdot x) \cdot \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cdot \cos(n \cdot x) dx + \operatorname{sen}(n \cdot x) \cdot \right. \\
 &\left. \cdot \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cdot \operatorname{sen}(n \cdot x) dx \right], \quad f(x + 2 \cdot \pi) = f(x)
 \end{aligned}$$

esta série é chamada série de Fourier e as fórmulas dos coeficientes são chamados fórmulas de Euler.

2.3.2 Funções com período arbitrário

A transição de funções de período $2 \cdot \pi$ para funções de período T qualquer é dada por uma simples mudança de escala. Introduzindo-se uma nova variável de tal maneira que a função $f(t)$ possua período $2 \cdot \pi$ sendo função de x . Fazendo

$$t = \frac{T}{2 \cdot \pi} \Leftrightarrow x = \frac{2 \cdot \pi}{T}$$

assim $x = \pm \pi$ corresponde a $t = \pm T/2$, e a série toma a forma

$$\begin{aligned}
 f(t) &= f\left(\frac{T}{2 \cdot \pi} \cdot x\right) = a_0 + \sum_{n=1}^{+\infty} [a_n \cdot \cos(n \cdot x) + b_n \cdot \operatorname{sen}(n \cdot x)] = \\
 &= a_0 + \sum_{n=1}^{+\infty} \left[a_n \cdot \cos\left(\frac{2 \cdot n \cdot \pi \cdot t}{T}\right) + b_n \cdot \operatorname{sen}\left(\frac{2 \cdot n \cdot \pi \cdot t}{T}\right) \right]
 \end{aligned}$$

e com coeficientes

$$\begin{cases} a_0 = \frac{1}{T} \cdot \int_{-T/2}^{T/2} f(t) dt \\ a_n = \frac{2}{T} \cdot \int_{-T/2}^{T/2} f(t) \cdot \cos\left(\frac{2 \cdot n \cdot \pi \cdot t}{T}\right) dt \\ b_n = \frac{2}{T} \cdot \int_{-T/2}^{T/2} f(t) \cdot \text{sen}\left(\frac{2 \cdot n \cdot \pi \cdot t}{T}\right) dt \end{cases}$$

O intervalo de integração pode ser substituído por qualquer outro com comprimento T .

2.3.3 Integral de Fourier

As séries de Fourier mostram ser uma ferramenta eficiente para as funções periódicas, mas muitas das funções que aparecem em problemas práticos não são periódicas, é desejável ampliar este método para incluí-las. Ampliando seu período para um comprimento infinito tem-se uma função que não é periódica.

Considerando uma função periódica $f_T(x)$, com período T , tem-se

$$f_T(x) = a_0 + \sum_{n=1}^{+\infty} [a_n \cdot \cos(w_n \cdot x) + b_n \cdot \text{sen}(w_n \cdot x)], \quad w_n = \frac{2 \cdot n \cdot \pi}{T}$$

Substituindo os coeficientes e verificando que

$$\Delta w = w_{n+1} - w_n = \frac{2 \cdot \pi}{T} \Leftrightarrow \frac{2}{T} = \frac{\Delta w}{\pi}$$

Pode-se escrever a série de Fourier sob a forma

$$\begin{aligned}
f_T(x) &= \\
&= \frac{1}{T} \cdot \int_{-T/2}^{T/2} f_T(\xi) d\xi + \frac{1}{\pi} \cdot \\
&\cdot \sum_{n=1}^{+\infty} \left[\cos(w_n \cdot x) \cdot \Delta w \cdot \int_{-T/2}^{T/2} f_T(\xi) \cdot \cos(w_n \cdot \xi) d\xi + \text{sen}(w_n \cdot x) \cdot \Delta w \cdot \right. \\
&\cdot \left. \int_{-T/2}^{T/2} f_T(\xi) \cdot \text{sen}(w_n \cdot \xi) d\xi \right]
\end{aligned}$$

Fazendo T se aproximar do infinito, Δw se aproximará de zero, tem-se

$$\lim_{T \rightarrow +\infty} \Delta w = \lim_{T \rightarrow +\infty} \frac{2 \cdot \pi}{T} = 0 \Leftrightarrow \lim_{T \rightarrow +\infty} \Delta w = \lim_{\Delta w \rightarrow 0} \Delta w$$

assim, tem-se

$$\begin{aligned}
f(x) &= \lim_{T \rightarrow +\infty} f_T(x) = \\
&= \lim_{T \rightarrow +\infty} \left[\frac{1}{T} \cdot \int_{-T/2}^{T/2} f_T(\xi) d\xi \right] + \\
&+ \lim_{T \rightarrow +\infty} \left\{ \frac{1}{\pi} \cdot \right. \\
&\cdot \sum_{n=1}^{+\infty} \left[\cos(w_n \cdot x) \cdot \Delta w \cdot \int_{-T/2}^{T/2} f_T(\xi) \cdot \cos(w_n \cdot \xi) d\xi + \text{sen}(w_n \cdot x) \cdot \Delta w \cdot \right. \\
&\cdot \left. \int_{-T/2}^{T/2} f_T(\xi) \cdot \text{sen}(w_n \cdot \xi) d\xi \right] \left. \right\} = \\
&= 0 + \\
&+ \lim_{\Delta w \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{\pi} \cdot \right. \\
&\cdot \sum_{n=1}^{+\infty} \left[\cos(w_n \cdot x) \cdot \Delta w \cdot \int_{-T/2}^{T/2} f_T(\xi) \cdot \cos(w_n \cdot \xi) d\xi + \text{sen}(w_n \cdot x) \cdot \Delta w \cdot \right. \\
&\cdot \left. \int_{-T/2}^{T/2} f_T(\xi) \cdot \text{sen}(w_n \cdot \xi) d\xi \right] \left. \right\}
\end{aligned}$$

O somatório transforma-se numa integral em relação a w

$$\begin{aligned}
 f(x) &= \\
 &= \frac{1}{\pi} \cdot \\
 &\cdot \int_0^{+\infty} \left[\cos(w \cdot x) \cdot \int_{-T/2}^{T/2} f_T(\xi) \cdot \cos(w \cdot \xi) d\xi + \operatorname{sen}(w \cdot x) \cdot \right. \\
 &\left. \cdot \int_{-T/2}^{T/2} f_T(\xi) \cdot \operatorname{sen}(w \cdot \xi) d\xi \right] dw
 \end{aligned}$$

que constitui a integral de Fourier. Se $f(x)$ for contínua em qualquer intervalo finito e possui, para cada ponto, derivadas à esquerda e à direita, e a integral $\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)| dx$ existir, então se pode representar a função por uma integral de Fourier.

2.3.4 Forma complexa da integral de Fourier

A forma real da integral de Fourier, como foi visto anteriormente, é dada por

$$\begin{aligned}
 f(x) &= \int_0^{+\infty} [A(w) \cdot \cos(w \cdot x) + B(w) \cdot \operatorname{sen}(w \cdot x)] dw, \\
 A(w) &= \frac{1}{\pi} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} f(v) \cdot \cos(w \cdot v) dv, \\
 B(w) &= \frac{1}{\pi} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} f(v) \cdot \operatorname{sen}(w \cdot v) dv
 \end{aligned}$$

Substituindo os coeficiente $A(w)$ e $B(w)$ dentro da fórmula, tem-se

$$\begin{aligned}
f(x) &= \\
&= \frac{1}{\pi} \cdot \\
&\cdot \int_0^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(v) \cdot \\
&\cdot [\cos(w \cdot v) \cdot \cos(w \cdot x) + \text{sen}(w \cdot v) \cdot \text{sen}(w \cdot x)] dv dw = \\
&= \frac{1}{\pi} \cdot \int_0^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(v) \cdot \cos(w \cdot x - w \cdot v) dv dw = \\
&= \frac{1}{\pi} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} f(v) \cdot \cos(w \cdot (x - v)) dw dv
\end{aligned}$$

Fazendo uma mudança de variáveis para mudar os limites do integrando, tem-se

$$w = -u \Leftrightarrow \begin{cases} dw = -du \\ w = 0 \Leftrightarrow u = 0 \\ \lim_{w \rightarrow +\infty} w = \lim_{-u \rightarrow +\infty} (-u) = \lim_{u \rightarrow -\infty} u \end{cases}$$

portanto

$$\begin{aligned}
\int_0^{+\infty} f(v) \cdot \cos(w \cdot (x - v)) dw &= \int_0^{-\infty} f(v) \cdot \cos(-u \cdot (x - v)) (-du) = \\
&= - \int_0^{-\infty} f(v) \cdot \cos(u \cdot (x - v)) du = \int_{-\infty}^0 f(v) \cdot \cos(u \cdot (x - v)) du
\end{aligned}$$

Da identidade acima tem-se então

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} f(v) \cdot \cos(w \cdot (x - v)) dw &= \\
&= \underbrace{\int_{-\infty}^0 f(v) \cdot \cos(w \cdot (x - v)) dw}_{= \int_0^{+\infty} f(v) \cdot \cos(w \cdot (x - v)) dw} + \int_0^{+\infty} f(v) \cdot \cos(w \cdot (x - v)) dw = \\
&= 2 \cdot \int_0^{+\infty} f(v) \cdot \cos(w \cdot (x - v)) dw
\end{aligned}$$

portanto pode-se mudar o limite inferior da integração de 0 para $-\infty$, tomando-se o cuidado de dividir por dois

$$\int_0^{+\infty} f(v) \cdot \cos(w \cdot (x - v)) dw = \frac{1}{2} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} f(v) \cdot \cos(w \cdot (x - v)) dw$$

desta forma a integral de fourier pode ser reescrita como a seguir

$$\begin{aligned} f(x) &\equiv \frac{1}{\pi} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} f(v) \cdot \cos(w \cdot (x - v)) dw dv \equiv \\ &\equiv \frac{1}{\pi} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} f(v) \cdot \cos(w \cdot (x - v)) dw dv \equiv \\ &\equiv \frac{1}{2 \cdot \pi} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(v) \cdot \cos(w \cdot (x - v)) dv dw \end{aligned}$$

Realizando uma mudança de variáveis igual a que foi feita anteriormente

$$w = -u \Leftrightarrow \begin{cases} dw = -du \\ w = 0 \Leftrightarrow u = 0 \\ \lim_{w \rightarrow +\infty} w = \lim_{-u \rightarrow +\infty} (-u) = \lim_{u \rightarrow -\infty} u \end{cases}$$

agora o integrando será modificado, no lugar da função cosseno, será posto a função seno, tem-se então

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} f(v) \cdot \text{sen}(w \cdot (x - v)) dw &= \int_0^{-\infty} f(v) \cdot \text{sen}(-u \cdot (x - v)) (-du) = \\ &= \int_0^{-\infty} f(v) \cdot [-\text{sen}(u \cdot (x - v))] (-du) = \\ &= \int_0^{-\infty} f(v) \cdot \text{sen}(u \cdot (x - v)) du = - \int_{-\infty}^0 f(v) \cdot \text{sen}(u \cdot (x - v)) du \end{aligned}$$

portanto

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} f(v) \cdot \text{sen}(u \cdot (x - v)) \, dw &= \\ &= \underbrace{\int_{-\infty}^0 f(v) \cdot \text{sen}(u \cdot (x - v)) \, dw}_{=-\int_0^{+\infty} f(v) \cdot \text{sen}(u \cdot (x - v)) \, dw} + \int_0^{+\infty} f(v) \cdot \text{sen}(u \cdot (x - v)) \, dw = 0 \end{aligned}$$

Uma vez que a integral acima é zero, pode-se multiplicá-la por uma constante e somá-la à integral de Fourier, que esta não será alterada. Aproveitando-se do fato que a integral é um operador linear (a integral de uma soma é a soma das integrais e constantes que multiplicam a integral podem ser colocadas dentro, multiplicando o integrando) e aproveitando também a identidade $e^{i\theta} = \cos \theta + i \cdot \text{sen} \theta$, tem-se

$$\begin{aligned}
f(x) &= \frac{1}{2 \cdot \pi} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(v) \cdot \cos(w \cdot x - w \cdot v) \, dv \, dw = \\
&= \frac{1}{2 \cdot \pi} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} f(v) \cdot \cos(w \cdot x - w \cdot v) \, dw + i \cdot 0 \right] \, dv = \\
&= \frac{1}{2 \cdot \pi} \cdot \\
&\quad \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} f(v) \cdot \cos(w \cdot x - w \cdot v) \, dw + i \cdot \right. \\
&\quad \cdot \left. \int_{-\infty}^{+\infty} f(v) \cdot \operatorname{sen}(w \cdot (x - v)) \, dw \right] \, dv = \\
&= \frac{1}{2 \cdot \pi} \cdot \\
&\quad \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(v) \cdot [\cos(w \cdot x - w \cdot v) + i \cdot \operatorname{sen}(w \cdot x - w \cdot v)] \, dw \, dv = \\
&= \frac{1}{2 \cdot \pi} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(v) \cdot e^{i \cdot (w \cdot x - w \cdot v)} \, dw \, dv = \\
&= \frac{1}{2 \cdot \pi} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(v) \cdot e^{i \cdot w \cdot (x - v)} \, dv \, dw
\end{aligned}$$

portanto a função $f(x)$ pode ser reescrita sob a forma complexa da integral de Fourier

$$f(x) = \frac{1}{2 \cdot \pi} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(v) \cdot e^{i \cdot w \cdot (x - v)} \, dv \, dw$$

2.3.5 Transformada de Fourier e sua inversa

Uma vez obtida a fórmula complexa da integral de Fourier, pode-se rearranjar os termos da seguinte maneira

$$\begin{aligned}
 f(x) &= \frac{1}{2 \cdot \pi} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(v) \cdot e^{i \cdot w \cdot (x-v)} \, dv \, dw \equiv \\
 &\equiv \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(v) \cdot e^{-i \cdot w \cdot v} \cdot e^{i \cdot w \cdot x} \, dv \, dw \equiv \\
 &\equiv \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{\left[\frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} f(v) \cdot e^{-i \cdot w \cdot v} \, dv \right]}_{=\mathcal{F}_w(f(v))} \cdot e^{i \cdot w \cdot x} \, dw
 \end{aligned}$$

à fórmula dentro dos colchetes denomina-se transformada de Fourier

$$\mathcal{F}_w(f(x)) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \cdot e^{-i \cdot w \cdot x} \, dx$$

e a sua inversa é definida por

$$\mathcal{F}_x^{(-1)}(f(w)) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} f(w) \cdot e^{i \cdot w \cdot x} \, dw$$

de modo que

$$f(x) = \mathcal{F}_x^{(-1)}\left(\mathcal{F}_w(f(x))\right) = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{F}_w(f(x)) \cdot e^{i \cdot w \cdot x} \, dw$$

2.4 Mecânica Quântica

Inicialmente, as quantidades físicas comprimento de onda λ e momento linear p , relacionadas ao movimento ondulatório e ao movimento de partícula, não haviam sido relacionadas, pois ainda não havia o senso de que partículas

poderiam se comportar como ondas e nem que ondas poderiam se comportar como partículas.

Para se exemplificar essa relação de ondas e partículas, suponha o experimento em que uma metralhadora, não muito precisa, é disposta frente a um anteparo que possui duas fendas (Figura 3 (a)). A distância é suficiente para que algumas das balas disparadas pela metralhadora consigam atingir o anteparo justamente nos locais das fendas. Posto a metralhadora a disparar, as balas atingirão aleatoriamente o anteparo, e algumas atingirão os locais das fendas, as fendas são suficientemente apertadas para que as balas passem interagindo com as bordas das fendas, de modo que a trajetória sofra um desvio não controlado, ou seja, um desvio aleatório. Um alvo é colocado a uma certa distância do anteparo de forma que o anteparo fique entre ele e a metralhadora. A distância entre o anteparo e o alvo é o suficiente para que as balas que atravessarem qualquer uma das fendas possam atingir uma região considerável, ou seja, deve haver uma região considerável em que se observem balas tanto de uma fenda com de outra, atingindo esse mesmo local, havendo assim um acúmulo de balas de ambas as fendas. Uma vez acionada a metralhadora, observa-se no alvo que a distribuição das balas é igual à soma das distribuições de cada fenda, como se fosse tampado uma das fendas e deixada livre a outra.

Suponha agora o mesmo experimento, só que em vez de uma metralhadora, é utilizado um tanque de água, de forma que as fendas permitam a passagem de qualquer onda proveniente de uma fonte colocada a uma certa distância (Figura 3, (b)). Uma vez que a fonte comece a produzir ondas, elas se chocarão contra o anteparo, e no local das duas fendas, elas passarão. As fendas são suficientemente apertadas para que as ondas que passarem pelas fendas reproduzam como se as fendas fossem também fontes de ondas. Observando-se o alvo, vê-se que, alternadamente, há regiões oscilando muito (em que as intensidades das ondas contribuem para a formação de uma onda de maior

intensidade) e regiões sem nenhuma oscilação (em que as intensidades das ondas se anulam, de modo que não há perturbação na região).

Através da experiência das duas fendas de Young, observou-se o comportamento ondulatório da luz, quando se faz passar a luz de uma fonte emissora, através de duas fendas num anteparo, observa-se que a luz tem o mesmo comportamento das ondas na água, quando estas passam por duas fendas de um anteparo e se chocam contra o alvo. No alvo é observado um padrão de interferência, em que há alternadamente, presença de regiões com interferência construtiva (em que as intensidades das ondas contribuem para a formação de uma onda de maior intensidade) e de regiões com interferência destrutiva (em que as intensidades das ondas se anulam, de modo que não há perturbação na região).

Suponha agora que o alvo seja uma película fotográfica e que a intensidade de emissão da fonte de luz seja reduzida. É de se esperar que a intensidade das regiões de interferência construtiva também se reduzam. Mas ao considerar-se como é feita a interação da luz com a película fotográfica (a qual trata-se de colisões da luz com íons de um halogeneto de prata), um fenômeno inusitado se apresenta, a saber, em intensidades pequenas, observa-se a produção de pontos aleatoriamente distribuídos, o que contraria o conceito de onda, pois a onda atingiria todos os pontos, só que com menor intensidade. Se a película for exposta por tempo suficiente à emissão de baixa intensidade, o padrão encontrado, vai se igualando aos poucos com o padrão encontrado em intensidade alta. Desta experiência (dentre outras) observa-se que a luz se comporta também como partícula e, à partícula de luz, denomina-se fóton. A experiência também foi feita para elétrons, chegando-se nas mesmas conclusões.

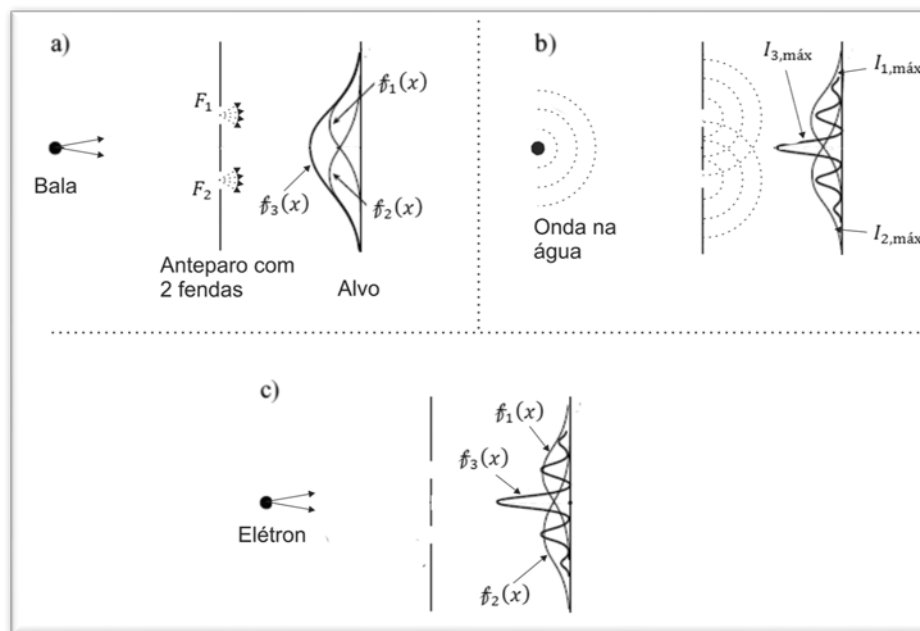


Figura 3 Experiência de dupla fenda: a) balas sendo disparadas; b) ondas produzidas na água; c) elétrons sendo emitidos. $f_1(x)$ é a densidade de probabilidade dos objetos (balas no caso (a) e elétron no caso (c)) provenientes da fenda F_1 , $f_2(x)$ é a densidade de probabilidade dos objetos provenientes da fenda F_2 , $f_3(x)$ densidade de probabilidade mista (combinação) dos objetos provenientes das fendas F_1 e F_2 , $I_{1,máx}$ é a intensidade máxima das ondas provenientes da fenda F_1 , $I_{2,máx}$ é a intensidade máxima das ondas provenientes da fenda F_2 e $I_{3,máx}$ é a intensidade da combinação das ondas provenientes das fendas F_1 e F_2

A Figura 3 anterior representa a experiência da dupla fenda para balas sendo disparadas da metralhadora, das onda sendo produzidas na água e para os elétrons sendo emitidos por uma fonte. Note que a densidade de probabilidade $f_3(x)$ produzida pelas duas fendas não se trata de uma soma de variáveis aleatórias, pois as variáveis aleatórias tratam-se das posições em que se podem encontrar o objeto em questão (balas ou elétrons) e não faria sentido somar suas

posições. A densidade de probabilidade $f_3(x)$ trata-se da soma das frequências em que encontra o objeto numa determinada região do alvo, portanto trata-se de uma função densidade de probabilidade mista para o caso da bala.

No caso de ondas, as intensidades $I_{1,máx.}$ e $I_{2,máx.}$ são proporcionais ao quadrado das amplitudes das ondas e $I_{3,máx.}$ é proporcional ao quadrado da soma das amplitudes, que em determinados pontos se anulam, havendo assim interferência. O que foi observado para as intensidades também foi observado para a densidade de probabilidade $f_3(x)$ no experimento com elétrons.

A seguir é citado um trabalho demonstrando a relação de de Broglie (ALCÁCER, 2007, p.31), que relaciona o momento (quantidade relacionada a partículas) com o comprimento de onda (quantidade relacionada a ondas).

Guiado pelas ideias de Paul Langevin sobre a teoria da relatividade, fiz um estudo profundo das propriedades da representação relativista de uma onda em propagação. Inspirado por uma das ideias fundamentais da teoria quântica, fui levado a definir uma frequência interna da partícula em repouso, ν_0 , ligada com a energia $m_0 \cdot c^2$ da massa em repouso, pela relação $h \cdot \nu_0 = m_0 \cdot c^2$. Isso levou-me a pensar que a partícula se comportava como um pequeno relógio em movimento. Fiquei impressionado com o fato de que a fórmula de transformação de Lorentz para uma onda era

$$\nu = \frac{\nu_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

e a fórmula de transformação da frequência de um relógio, que traduzia o famoso atraso dos relógios em movimento, era

$$\nu = \nu_0 \cdot \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$$

Intrigado com esta diferença, perguntei a mim mesmo como é que uma partícula semelhante a um relógio se desloca na sua onda de modo a que a sua fase interna permanece constantemente igual à da própria onda

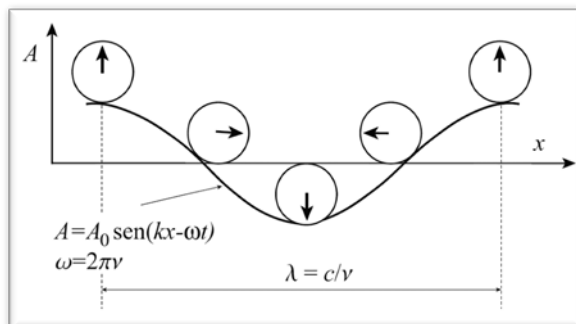


Figura 4 Representação do modelo da partícula-relógio em fase com sua onda de propagação

Apliquei esta ideia, embora esquematicamente, ao caso simples de uma onda plana monocromática, $A = A_0 \cdot \text{sen}(k \cdot x - \omega \cdot t)$, em que A_0 é a amplitude máxima, e $k = 2 \cdot \pi / \lambda$. Supus que a onda se propagava ao longo do eixo dos x . Fui então levado a escrever para a variação da fase, $d\phi$, dessa onda, (atendendo a que $\omega = 2 \cdot \pi \cdot \nu$)

$$d\phi = 2 \cdot \pi \left(\nu \cdot dt - \frac{dx}{\lambda} \right) = 2 \cdot \pi \cdot \left(\frac{\nu_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \cdot dt - \frac{dx}{\lambda} \right) =$$

$$= \frac{2 \cdot \pi}{h} \cdot \left(\frac{m_0 \cdot c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \cdot dt - h \cdot \frac{dx}{\lambda} \right)$$

e para a variação no intervalo de tempo, dt , da fase interna da partícula que se desloca ao longo de x , com velocidade v

$$d\phi_{\text{In.}} = 2 \cdot \pi \cdot \nu_0 \cdot \left(dt \cdot \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \right) =$$

$$= \frac{2 \cdot \pi}{h} \cdot m_0 \cdot c^2 \cdot \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \cdot dt$$

fazendo $d\phi = d\phi_{\text{In.}}$ e $dx = v \cdot dt$

$$\begin{aligned}
& \frac{2 \cdot \pi}{h} \cdot \left[\frac{m_0 \cdot c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \cdot dt - h \cdot \frac{(v \cdot dt)}{\lambda} \right] = \\
& = \frac{2 \cdot \pi}{h} \cdot m_0 \cdot c^2 \cdot \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \cdot dt \\
& \frac{m_0 \cdot c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - h \cdot \frac{v}{\lambda} = m_0 \cdot c^2 \cdot \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \\
& \frac{m_0 \cdot c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - m_0 \cdot c^2 \cdot \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} = h \cdot \frac{v}{\lambda} \\
& m_0 \cdot c^2 \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \right) = \\
& = m_0 \cdot c^2 \cdot \left[\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - \frac{\left(\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \right)^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \right] = \\
& = m_0 \cdot c^2 \cdot \frac{1 - \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right)}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = m_0 \cdot c^2 \cdot \frac{\frac{v^2}{c^2}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = \\
& = \frac{m_0 \cdot v^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}
\end{aligned}$$

portanto

$$\begin{aligned}
\frac{m_0 \cdot v^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} &= \frac{h \cdot v}{\lambda} \\
\frac{m_0 \cdot v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} &= \frac{h}{\lambda}
\end{aligned}$$

sendo o momento de uma partícula dada por $p = \frac{m_0 \cdot v}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$
então

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

Ficava assim relacionado o momento linear (ou quantidade de movimento), que é uma grandeza típica de uma partícula, com o comprimento de uma onda.

Assim, foram encontradas as duas equações fundamentais da mecânica ondulatória:

$$E = h \cdot \nu$$

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

associando com elas a imagem de uma partícula localizada que se desloca numa onda ao longo de um dos seus raios, mas que se mantém constantemente em fase com ela. Isto eu apresentei na minha tese em 1924, bem como a ideia hoje confirmada de que o fóton em repouso tem massa não nula, embora muito pequena (PRICE; CHISSICK et al., 1973 apud ALCÁCER, 2007, p.31)

2.4.1 Equação de Schrödinger independente do tempo

Em 1926, Erwin Schrödinger (ALCÁCER, 2007), inspirado na teoria de Hamilton-Jacobi e na tese de De Broglie, desenvolveu a Mecânica Ondulatória, em que aplicou ao modelo de átomo de Niels Bohr e demonstrou que os valores das energias concordavam com os valores obtidos experimentalmente. A equação de que derivou a demonstração é conhecida atualmente por equação de Schrödinger e pode ser demonstrada obtendo-se a expressão do momento linear ($p = m \cdot v$) de uma partícula a partir de sua equação de energia total ($E = E_p + E_c$) e obtendo-se a expressão do comprimento de onda λ a partir da equação de onda e substituindo-se na equação de De Broglie, como é demonstrado a seguir:

$$E = \frac{m \cdot v^2}{2} + E_p$$

$=E_c$

em que E_c trata-se da energia cinética, E_p trata-se da energia potencial, m trata-se da massa da partícula e possui valor real positivo ($m \in \mathbb{R}_+^*$) e v trata-se da velocidade, definida por

$$v(t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{dx(t)}{dt}$$

e $x(t)$ é a posição da partícula dependente do tempo t

$$x: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$$

A energia potencial $E_p(x)$ dependerá da posição da partícula, o que significa uma dependência implícita do tempo $E_p(x(t))$, mas pode também depender explicitamente do tempo $E_p(x(t), t)$. A dependência implícita difere-se da explícita pelo seguinte: se a partícula se manter numa posição num determinado intervalo de tempo, então a sua energia potencial permanecerá constante para o caso de dependência implícita, mas para o caso de dependência explícita, a energia potencial poderá variar com o tempo.

Inicialmente será obtida a equação de Schrödinger independente do tempo, portanto, é suposto que a energia potencial depende implicitamente do tempo $E_p(x(t))$

$$E_p: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$$

Isolando a velocidade, tem-se

$$v = \sqrt{\frac{2 \cdot (E - E_p)}{m}}$$

portanto, a expressão do momento linear de uma partícula obtida através da energia total é obtida multiplicando-se por m os dois membros da equação anterior

$$p = m \cdot v = \sqrt{2 \cdot m \cdot (E - E_p)}$$

Uma vez obtida a expressão do momento linear, resta tratar a equação de onda para obter-se uma relação com o comprimento de onda λ . A equação de onda unidimensional (com relação somente a x) é dada a seguir

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\left(\frac{2 \cdot \pi}{\lambda}\right)^2 \cdot \psi$$

em que $\psi(x)$ é a função de onda dependente da posição x

$$\psi: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$$

Isolando λ , tem-se

$$\frac{1}{\lambda} = \sqrt{-\frac{1}{4 \cdot \pi^2} \cdot \frac{1}{\psi} \cdot \frac{d^2\psi}{dx^2}}$$

Agora parte-se da equação de De Broglie que relaciona ao momento de uma partícula um comprimento de onda

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

Substitui-se as expressões conseguidas a partir da energia total e da equação de onda

$$\sqrt{2 \cdot m \cdot (E - E_p)} = h \cdot \sqrt{-\frac{1}{4 \cdot \pi^2} \cdot \frac{1}{\psi} \cdot \frac{d^2\psi}{dx^2}}$$

Elevando ao quadrado ambos os membros da equação

$$2 \cdot m \cdot (E - E_p) = -\frac{h^2}{4 \cdot \pi^2} \cdot \frac{1}{\psi} \cdot \frac{d^2\psi}{dx^2}$$

Rearranjando os termos e substituindo h (constante de Planck) por \hbar (constante de Planck racionalizada), definida por

$$\hbar = \frac{h}{2 \cdot \pi}$$

tem-se a equação de Schrödinger independente do tempo

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

que pode ser escrita da seguinte forma

$$\underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} + E_p\right)}_{=\hat{H}} \psi = E \cdot \psi$$

em que o termo dentro dos parênteses trata-se do operador hamiltoniano \hat{H} . A generalização da equação de Schrödinger independente do tempo do caso unidimensional para o caso tridimensional é facilmente obtida trocando $\frac{d^2}{dx^2}$ pelo operador laplaciano $\left(\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$ na demonstração acima, obtendo-se a seguinte equação

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + E_p(x, y, z)\right] \psi(x, y, z) = E \cdot \psi(x, y, z)$$

em que

$$\psi: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$$

$$E_p: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$$

ou, de forma mais reduzida (utilizando-se da notação vetorial para representar a posição)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \nabla^2 + E_p(\vec{r})\right] \cdot \psi(\vec{r}) = E \cdot \psi(\vec{r})$$

em que \vec{r} trata-se do vetor posição cuja representação tridimensional em coordenadas cartesianas é

$$\vec{r} = x \cdot \vec{i} + y \cdot \vec{j} + z \cdot \vec{k}$$

A equação de Schrödinger independente do tempo é suficiente para tratar os problemas estacionários.

2.4.2 Equação de Schrödinger dependente do tempo

Para se obter a equação de Schrödinger dependente do tempo, considere $\Psi(\vec{r}, t)$ uma onda, dada por

$$\Psi(\vec{r}, t) = A \cdot e^{i(\vec{K} \cdot \vec{r} - \omega \cdot t)}$$

em que A é a amplitude, $\vec{K} \equiv \vec{K}(\vec{r})$ é o vetor da direção da onda em cada coordenada espacial \vec{r} , t é o tempo e ω é a velocidade angular definida por

$$\omega = 2 \cdot \pi \cdot \nu$$

Reescrevendo a função $\Psi(\vec{r}, t)$ na forma de um produto de uma função da posição \vec{r} com uma função do tempo t

$$\Psi(\vec{r}, t) = A \cdot e^{i(\vec{K} \cdot \vec{r} - \omega \cdot t)} = \underbrace{A \cdot e^{i \cdot \vec{K} \cdot \vec{r}}}_{=\psi(\vec{r})} \cdot e^{i \cdot \omega \cdot t}$$

Derivando a função de onda $\Psi(\vec{r}, t)$ em relação ao tempo t

$$\frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -i \cdot \omega \cdot \underbrace{A \cdot e^{i(\vec{K} \cdot \vec{r} - \omega \cdot t)}}_{=\Psi(\vec{r}, t)} = -i \cdot \omega \cdot \Psi(\vec{r}, t)$$

como a energia é definida por

$$E = h \cdot \nu = h \cdot \frac{\omega}{2 \cdot \pi} = \hbar \cdot \omega$$

Multiplicando ambos os membros da equação por $i \cdot \hbar$, tem-se

$$i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -i^2 \cdot \hbar \cdot \omega \cdot \Psi(\vec{r}, t) = E \cdot \Psi(\vec{r}, t)$$

$$E \cdot \Psi(\vec{r}, t) = E \cdot \psi(\vec{r}) \cdot e^{i \cdot \omega \cdot t}$$

mas como

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \nabla^2 + E_p(\vec{r}) \right] \cdot \psi(\vec{r}) = E \cdot \psi(\vec{r})$$

portanto

$$i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \nabla^2 + E_p(\vec{r}) \right] \cdot \psi(\vec{r}) \cdot e^{i \cdot \omega \cdot t}$$

$$i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \nabla^2 + E_p(\vec{r}) \right] \cdot \Psi(\vec{r}, t)$$

Essa é a equação de Schrödinger dependente do tempo. Através dela é possível descrever o sistema com sua evolução temporal.

Numa seção posterior será tratada a equação de Schrödinger com potencial dependente do tempo $E_p(\vec{r}, t)$ para se obter transições entre diferentes estados de um sistema.

2.4.3 Quantidades físicas

Na mecânica quântica, as quantidades físicas são representadas por operadores. Relembrando a definição de energia total E

$$E_C + E_p = E$$

em que E_p é o potencial e E_C a energia cinética

$$E_C = \frac{1}{2} \cdot m \cdot v^2 = \frac{p^2}{2 \cdot m}$$

Multiplicando os membros da equação da energia total por Ψ

$$(E_C + E_p)\Psi = E \cdot \Psi$$

Comparando essa equação com a equação de Schrödinger, pode-se determinar o operador que representa o momento, utilizando-se da equação da energia cinética, obtendo-se a seguinte equação

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

e para a energia total

$$\hat{E} = i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t}$$

Adotando-se o símbolo $\hat{\quad}$ para indicar operadores.

A energia potencial E_p não é um operador, trata-se de uma função e quanto a x , y e z (assim como t) tratam-se de variáveis no espaço de

coordenadas. A função de onda no espaço de coordenadas tem por variáveis aleatórias as coordenadas espaciais (x , y e z).

No espaço de momentos os papéis se invertem. No espaço de momentos a função de onda tem por variáveis aleatórias os momentos lineares (p_x , p_y e p_z , momentos lineares orientados nos eixos x , y e z , respectivamente).

Na representação em momentos é obtida definindo o operador \hat{x} como

$$\hat{x} = -\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{d}{dp}$$

enquanto que o operador momento \hat{p} é representado por

$$\hat{p} = p$$

ou seja, o operador \hat{p} é representado por uma variável.

2.4.4 Valor esperado de operadores

Como foi visto, o valor esperado do operador \hat{p} no espaço de coordenadas é dado por

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \cdot \hat{p} \Psi(x, t) dx$$

e o valor esperado da variável posição pode ser reescrito como

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot \|\Psi(x, t)\|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \cdot x \cdot \Psi(x, t) dx$$

No espaço de momentos, o valor esperado do momento linear é dado por

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^*(p, t) \cdot p \cdot \Phi(p, t) dp = \int_{-\infty}^{+\infty} p \cdot \|\Phi(p, t)\|^2 dp$$

em que $\Phi(p, t)$ é a função de onda para o espaço de momento. Como p é uma variável no espaço de momentos, e não um operador, pode-se mudá-lo de lugar, pois será comutável, ou seja

$$\Phi^*(p, t) \cdot p \cdot \Phi(p, t) = p \cdot \Phi^*(p, t) \cdot \Phi(p, t) = p \cdot \|\Phi(p, t)\|^2$$

A função densidade de probabilidade é dada por

$$\rho_{\|\Phi\|^2}(p; t) = \|\Phi(p, t)\|^2$$

e a função de probabilidade é dada por

$$\mathcal{P}_{\|\Phi\|^2}(p \in R; t) = \int_{p \in R} \|\Phi(p, t)\|^2 dp$$

O valor esperado para a coordenada espacial x no espaço de momentos diferirá do definido para o espaço das coordenadas pelo fato de que x será representado por um operador \hat{x} , definido anteriormente por

$$\hat{x} = -\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{d}{dp}$$

e seu valor esperado será

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^*(p, t) \cdot \hat{x}\Phi(p, t) dx$$

Uma vez que \hat{x} é um operador, não se tem mais a mesma liberdade para movimentá-lo dentro de uma fórmula.

Para uma quantidade física qualquer Q , esta será representada na mecânica quântica por um operador \hat{Q} , que pode ser uma função de x e \hat{p} (no espaço de coordenadas) ou de \hat{x} e p (no espaço de momentos). Suponha uma quantidade física Q no espaço de coordenadas, seu valor esperado será dado por

$$\langle \hat{Q} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \cdot \hat{Q}\Psi(x, t) dx$$

Para que o valor esperado seja um valor encontrado experimentalmente, este deve ser um valor real, portanto o valor esperado $\langle \hat{Q} \rangle$ deve ser igual ao seu complexo conjugado do valor esperado $\langle \hat{Q} \rangle^*$

$$\begin{aligned} \langle \hat{Q} \rangle^* &= \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \cdot \hat{Q}\Psi(x, t) dx \right]^* = \int_{-\infty}^{+\infty} [\Psi^*(x, t)]^* \cdot [\hat{Q}\Psi(x, t)]^* dx = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, t) \cdot \hat{Q}^*\Psi^*(x, t) dx \end{aligned}$$

portanto

$$\langle Q \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \cdot \hat{Q} \Psi(x, t) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, t) \cdot \hat{Q}^* \Psi^*(x, t) dx = \langle Q \rangle^*$$

O operador momento linear \hat{p} (no espaço de coordenadas) é um operador que obedece a tal relação. Seu valor esperado é dado por

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \cdot \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} dx$$

portanto

$$\begin{aligned} \langle \hat{p} \rangle^* &= \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \cdot \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} dx \right]^* = \\ &= \left[\frac{\hbar}{i} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} dx \right]^* = -\frac{\hbar}{i} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} dx \end{aligned}$$

Utilizando-se do método de integração por partes

$$\int u \cdot dv = u \cdot v - \int v \cdot du$$

Mudando as variáveis

$$\begin{aligned} u &= \Psi(x, t) \Leftrightarrow du = \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} dx \\ dv &= \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} dx \Leftrightarrow v = \Psi^*(x, t) \end{aligned}$$

Substituindo na integral

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} dx &= \\ &= [\Psi^*(x, t) \cdot \Psi(x, t)]_{x \rightarrow -\infty}^{x \rightarrow +\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} dx \end{aligned}$$

Como foi dito anteriormente, para que as funções convirjam, tem-se que

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \Psi(x, t) = 0$$

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \Psi^*(x, t) = 0$$

portanto, o primeiro termo do segundo membro da equação se anulará

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial t} dx = \\
& = \underbrace{[\Psi^*(x, t) \cdot \Psi(x, t)]_{x \rightarrow -\infty}^{x \rightarrow +\infty}}_{=0} - \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial t} dx = \\
& = - \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial t} dx
\end{aligned}$$

Substituindo, tem-se

$$\begin{aligned}
\langle \hat{p} \rangle^* &= -\frac{\hbar}{i} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial t} dx = \\
&= -\frac{\hbar}{i} \cdot \left[- \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial t} dx \right] = \frac{\hbar}{i} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial t} dx = \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, t) \cdot \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial t} dx = \langle \hat{p} \rangle
\end{aligned}$$

portanto, o valor esperado da quantidade física momento linear, representada pelo operador \hat{p} , é um valor real

$$\langle \hat{p} \rangle \in \mathbb{R}$$

2.4.5 O Princípio da Incerteza

Para qualquer observável \hat{A} (operador expresso em termos de x e p), tem-se sua variância dada por

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

e, semelhantemente, para um outro observável \hat{B} , tem-se

$$\sigma_B^2 = \langle (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) \Psi | (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) \Psi \rangle$$

formando o produto das variâncias e substituindo na desigualdade de Schwarz

$$\begin{aligned}
\sigma_A^2 \cdot \sigma_B^2 &= \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \Psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \Psi \rangle \cdot \langle (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) \Psi | (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) \Psi \rangle \geq \\
&\geq \| \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \Psi | (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) \Psi \rangle \|^2
\end{aligned} \tag{3}$$

Para qualquer número complexo $w = u + i \cdot v$, tem-se que

$$\|w\|^2 = [\Re(w)]^2 + [\Im(w)]^2 = u^2 + v^2 \geq [\Im(w)]^2 = v^2 \quad (4)$$

e que

$$\frac{1}{2 \cdot i} \cdot (w - w^*) = \frac{1}{2 \cdot i} \cdot [(u + i \cdot v) - (u - i \cdot v)] = \frac{1}{2 \cdot i} \cdot (2 \cdot i \cdot v) = v$$

assim, substituindo na equação anterior

$$\|w\|^2 = u^2 + v^2 \geq v^2 = \left[\frac{1}{2 \cdot i} \cdot (w - w^*) \right]^2$$

substituindo w por $\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \Psi | (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) \Psi \rangle$ tem-se

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2 \cdot i} \cdot [\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \Psi | (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) \Psi \rangle - \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \Psi | (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) \Psi \rangle^*] = \\ & = \frac{1}{2 \cdot i} \cdot [\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \Psi | (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) \Psi \rangle - \langle (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) \Psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \Psi \rangle] = \end{aligned}$$

ou seja

$$\begin{aligned} & \|\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \Psi | (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) \Psi \rangle\|^2 \geq \\ & \geq \left\| \frac{1}{2 \cdot i} \cdot [\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \Psi | (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) \Psi \rangle - \langle (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) \Psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \Psi \rangle] \right\|^2 \end{aligned}$$

tem-se que

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

e, semelhantemente

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

como $\langle \hat{A} \rangle$ e $\langle \hat{B} \rangle$ são números reais, então $\langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle = \langle \hat{B} \rangle \langle \hat{A} \rangle$.

Substituindo

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2 \cdot i} \cdot [\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \Psi | (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) \Psi \rangle - \langle (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) \Psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \Psi \rangle] = \\ & = \frac{1}{2 \cdot i} \cdot [\langle \hat{A} \hat{B} \rangle - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle] - [\langle \hat{B} \hat{A} \rangle - \langle \hat{B} \rangle \langle \hat{A} \rangle] = \frac{1}{2 \cdot i} \cdot (\langle \hat{A} \hat{B} \rangle - \langle \hat{B} \hat{A} \rangle) \end{aligned}$$

finalmente chega-se que

$$\sigma_{\hat{A}}^2 \cdot \sigma_{\hat{B}}^2 \geq \left\| \frac{1}{2 \cdot i} \cdot (\langle \hat{A} \hat{B} \rangle - \langle \hat{B} \hat{A} \rangle) \right\|^2 = \left\| \frac{1}{2 \cdot i} \cdot \langle \Psi | [\hat{A}, \hat{B}]_- \Psi \rangle \right\|^2$$

onde $[\hat{A}, \hat{B}]_-$ é o comutador dos operadores \hat{A} e \hat{B} . Esta desigualdade é chamada de *princípio da incerteza*, pois demonstra que há uma limitação na precisão no par de certos observáveis.

2.4.5.1 A mínima incerteza

Foi visto que as quantidades físicas na Mecânica Quântica não são funções, mas sim operadores que operam sobre a função de onda Ψ , e que, por meio da equação $\langle \Psi | \hat{Q} | \Psi \rangle$, encontra-se o valor esperado da quantidade \hat{Q} . Observou-se também que há pares de quantidades que quando não comutam entre si, tem-se uma incompatibilidade, impedindo que ambas possam ser determinadas conjuntamente com precisão arbitrária, fazendo com que o produto das variâncias dessas quantidades possuem um limite inferior que será obtido encontrando-se uma função de onda adequada.

Para se obter o limite inferior para as variâncias, deve-se encontrar a função de onda Ψ para que o limite seja alcançado. A partir da desigualdade de Schwarz

$$\| \langle \beta | \alpha \rangle \|^2 \leq \langle \alpha | \alpha \rangle \cdot \langle \beta | \beta \rangle \quad (5)$$

se

$$| \beta \rangle = c \cdot | \alpha \rangle = | c \cdot \alpha \rangle$$

Substituindo no segundo membro da equação (5), tem-se

$$\langle \alpha | \alpha \rangle \cdot \langle \beta | \beta \rangle = \langle \alpha | \alpha \rangle \cdot \langle c \cdot \alpha | c \cdot \alpha \rangle = \langle \alpha | \alpha \rangle \cdot c^* \cdot \langle \alpha | \alpha \rangle \cdot c = \|c\|^2 \cdot (\langle \alpha | \alpha \rangle)^2$$

A partir do primeiro membro da equação $\|\langle\beta|\alpha\rangle\|^2 \leq \langle\alpha|\alpha\rangle \cdot \langle\beta|\beta\rangle$, tem-se

$$\begin{aligned}\|\langle\beta|\alpha\rangle\|^2 &= \langle\beta|\alpha\rangle \cdot \langle\beta|\alpha\rangle^* = \langle\beta|\alpha\rangle \cdot \langle\alpha|\beta\rangle = \langle c \cdot \alpha|\alpha\rangle \cdot \langle\alpha|c \cdot \alpha\rangle = \\ &= c^* \cdot \langle\alpha|\alpha\rangle \cdot \langle\alpha|\alpha\rangle \cdot c = \|c\|^2 \cdot (\langle\alpha|\alpha\rangle)^2\end{aligned}$$

portanto, quando $|\beta\rangle = c \cdot |\alpha\rangle = |c \cdot \alpha\rangle$, tem-se que a desigualdade de Schwarz se restringe à uma igualdade. Então, aplicando este resultado em (5), tem-se

$$|(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle)\Psi\rangle = c \cdot |(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)\Psi\rangle \quad (6)$$

Substituindo $|(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle)\Psi\rangle$ por $|\beta\rangle$ e $|(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)\Psi\rangle$ por $|\alpha\rangle$, a partir da equação (4), tem-se

$$\|\langle\beta|\alpha\rangle\|^2 = \Re^2(\langle\beta|\alpha\rangle) + \Im^2(\langle\beta|\alpha\rangle) \geq \Im^2(\langle\beta|\alpha\rangle)$$

que se transforma em igualdade somente se

$$\Re^2(\langle\beta|\alpha\rangle) = 0 \Leftrightarrow \Re(\langle\beta|\alpha\rangle) = 0$$

portanto

$$\Re(\langle\beta|\alpha\rangle) = \Re(c^* \cdot \langle\alpha|\alpha\rangle) = 0$$

mas como $\langle\alpha|\alpha\rangle$ é real, então

$$\Re(\langle\beta|\alpha\rangle) = \langle\alpha|\alpha\rangle \cdot \Re(c^*) = 0$$

portanto

$$(\langle\alpha|\alpha\rangle = 0) \vee (\Re(c^*) = 0)$$

Para que $\langle\alpha|\alpha\rangle$ seja igual a 0, o vetor $|\alpha\rangle$ deveria ser o vetor nulo $|0\rangle$, o que não é de interesse, pois não poderia ser considerado como um sistema válido estatisticamente, uma vez que os brackets $\langle\alpha|\alpha\rangle$ devem representar os valores esperados de quantidades e, se o vetor $|\alpha\rangle$ for o vetor nulo $|0\rangle$, então os valores esperados de todas as quantidades seriam nulas (uma vez que a quantidade \hat{A} é arbitrária), portanto,

$$\Re(c^*) = 0$$

Assim a componente real de c^* é nula, o que o torna um número imaginário puro, podendo ser reescrito da seguinte forma

$$c^* = -i \cdot a \Leftrightarrow c = i \cdot a$$

Substituindo em (6), tem-se

$$\begin{aligned} |(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle)\Psi\rangle &= c \cdot |(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)\Psi\rangle = i \cdot a \cdot |(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)\Psi\rangle = |i \cdot a \cdot (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)\Psi\rangle \\ (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle)\Psi &= i \cdot a \cdot (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)\Psi \end{aligned} \quad (7)$$

A solução dessa equação fornece a função de onda Ψ que permite e menor incerteza sobre as quantidades \hat{A} e \hat{B} , ou seja, cujas variâncias de \hat{A} e \hat{B} são as menores possíveis, obedecendo o princípio da incerteza de Heisenberg.

2.4.5.2 O princípio da incerteza para posição e momento

Para as quantidades posição \hat{x} e momento \hat{p} , o princípio da incerteza toma a seguinte forma

$$\sigma_{\hat{x}}^2 \cdot \sigma_{\hat{p}}^2 \geq \left\| \frac{1}{2 \cdot i} \cdot \langle \Psi | [\hat{x}, \hat{p}] | \Psi \rangle \right\|^2$$

Levando em consideração que a função Ψ esteja na representação de coordenadas (ou seja, seja função da posição e do tempo), tem-se

$$\sigma_{\hat{x}}^2 \cdot \sigma_{\hat{p}}^2 \geq \left\| \frac{1}{2 \cdot i} \cdot \langle \Psi(x, t) | \left[x, \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \right] | \Psi(x, t) \rangle \right\|^2$$

Aplicando o comutador u= numa função de teste $f(x, t)$ arbitrária, tem-se

$$\begin{aligned} \left[x, \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \right] f(x, t) &= \left[x \left(\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \right) - \left(\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \right) x \right] f(x, t) = \\ &= \frac{\hbar}{i} \cdot x \cdot \frac{\partial f(x, t)}{\partial x} - \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial}{\partial x} [x \cdot f(x, t)] = \\ &= \frac{\hbar}{i} \cdot x \cdot \frac{\partial f(x, t)}{\partial x} - \frac{\hbar}{i} \cdot \left[\frac{dx}{dx} \cdot f(x, t) + x \cdot \frac{\partial f(x, t)}{\partial x} \right] = -\frac{\hbar}{i} \cdot f(x, t) \end{aligned}$$

Retirando-se a função $f(x, t)$ tem-se que

$$\left[x, \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \right] \equiv -\frac{\hbar}{i} \equiv i \cdot \hbar$$

portanto,

$$\begin{aligned}
\sigma_x^2 \cdot \sigma_p^2 &\geq \left\| \frac{1}{2 \cdot i} \cdot \langle \Psi(x, t) | i \cdot \hbar \cdot \Psi(x, t) \rangle \right\|^2 = \\
&= \left\| \frac{1}{2 \cdot i} \cdot i \cdot \hbar \cdot \underbrace{\langle \Psi(x, t) | \Psi(x, t) \rangle}_{=1} \right\|^2 = \left\| \frac{1}{2 \cdot i} \cdot i \cdot \hbar \right\|^2 = \left\| \frac{1}{2} \cdot \hbar \right\|^2 = \frac{\hbar^2}{4} \\
\sigma_x \cdot \sigma_p &\geq \frac{\hbar}{2}
\end{aligned}$$

portanto, tem-se que a multiplicação das variâncias das medidas das quantidades físicas de posição e momento deve ser maior ou igual a $\hbar^2/4$, ou seja, tem-se que um aumento na precisão da definição da posição da partícula, leva a um decréscimo na precisão da definição do momento da partícula e vice-versa, obedecendo os limites determinados pela equação.

2.4.5.3 A mínima incerteza entre posição e momento

Considerando as quantidades físicas de posição e momento

$$\begin{aligned}
\hat{A} &= \hat{x} = x \\
\hat{B} &= \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial}{\partial x}
\end{aligned}$$

e substituindo em (7), tem-se

$$\left(\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial}{\partial x} - \langle \hat{p} \rangle \right) \Psi(x, t) = i \cdot a \cdot (x - \langle x \rangle) \Psi(x, t)$$

As quantidades $\langle x \rangle$ e $\langle \hat{p} \rangle$ são os valores esperados das quantidades posição e momento, respectivamente, portanto são constantes, assim tem-se

$$\begin{aligned}
\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \langle \hat{p} \rangle \cdot \Psi(x, t) &= i \cdot a \cdot x \cdot \Psi(x, t) - i \cdot a \cdot \langle x \rangle \cdot \Psi(x, t) \\
\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} + \left[\frac{\langle \hat{p} \rangle}{i \cdot \hbar} + \frac{a \cdot (x - \langle x \rangle)}{\hbar} \right] \cdot \Psi(x, t) &= 0
\end{aligned}$$

esta equação pode ser tratada como uma equação diferencial ordinária de primeira ordem, cuja solução é dada por

$$\Psi(x, t) = k \cdot e^{\int \left[\frac{\langle \hat{p} \rangle}{i \cdot \hbar} + \frac{a \cdot (x - \langle x \rangle)}{\hbar} \right] dx} \quad (8)$$

Calculando a integral, tem-se

$$\begin{aligned} \int \left[\frac{\langle \hat{p} \rangle}{i \cdot \hbar} + \frac{a \cdot (x - \langle x \rangle)}{\hbar} \right] dx &= \frac{\langle \hat{p} \rangle}{i \cdot \hbar} \cdot x + \frac{a}{2 \cdot \hbar} \cdot x^2 - \frac{a \cdot \langle x \rangle}{\hbar} \cdot x = \\ &= \frac{\langle \hat{p} \rangle}{i \cdot \hbar} \cdot x + a \cdot \frac{x^2 - 2 \cdot \langle x \rangle \cdot x}{2 \cdot \hbar} = \\ &= \frac{-i \cdot \langle \hat{p} \rangle}{\hbar} \cdot x + a \cdot \frac{x^2 - 2 \cdot \langle x \rangle \cdot x + \langle x \rangle^2}{2 \cdot \hbar} - \frac{\langle x \rangle^2}{2 \cdot \hbar} = \\ &= -\frac{\langle x \rangle^2}{2 \cdot \hbar} + a \cdot \frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2 \cdot \hbar} - \frac{i \cdot \langle \hat{p} \rangle}{\hbar} \cdot x \end{aligned}$$

Substituindo em (8) tem-se

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= k \cdot e^{-\frac{\langle x \rangle^2}{2 \cdot \hbar} + a \cdot \frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2 \cdot \hbar} - \frac{i \cdot \langle \hat{p} \rangle}{\hbar} \cdot x} = \underbrace{k \cdot e^{-\frac{\langle x \rangle^2}{2 \cdot \hbar}}}_{=C} \cdot e^{a \cdot \frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2 \cdot \hbar}} \cdot e^{-\frac{i \cdot \langle \hat{p} \rangle}{\hbar} \cdot x} = \\ &= C \cdot e^{a \cdot \frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2 \cdot \hbar}} \cdot e^{-\frac{i \cdot \langle \hat{p} \rangle}{\hbar} \cdot x} \end{aligned}$$

Tomando o conjugado tem-se

$$\Psi^*(x, t) = C^* \cdot e^{a \cdot \frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2 \cdot \hbar}} \cdot e^{\frac{i \cdot \langle \hat{p} \rangle}{\hbar} \cdot x}$$

portanto,

$$\begin{aligned} \|\Psi(x, t)\|^2 &= \Psi^*(x, t) \cdot \Psi(x, t) = \\ &= C^* \cdot e^{a \cdot \frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2 \cdot \hbar}} \cdot e^{\frac{i \cdot \langle \hat{p} \rangle}{\hbar} \cdot x} \cdot C \cdot e^{a \cdot \frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2 \cdot \hbar}} \cdot e^{-\frac{i \cdot \langle \hat{p} \rangle}{\hbar} \cdot x} = \\ &= \|C\|^2 \cdot e^{a \cdot \frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2 \cdot \hbar} + a \cdot \frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2 \cdot \hbar}} \cdot e^{\frac{i \cdot \langle \hat{p} \rangle}{\hbar} \cdot x - \frac{i \cdot \langle \hat{p} \rangle}{\hbar} \cdot x} = \|C\|^2 \cdot e^{a \cdot \frac{(x - \langle x \rangle)^2}{\hbar}} \end{aligned}$$

Como $\|\Psi(x, t)\|^2$ é a função densidade de probabilidade da partícula, conforme o caso unidimensional da equação de Schrödinger, tem-se então que a distribuição Gaussiana é a distribuição que minimiza a incerteza para as quantidades posição e momento.

2.4.6 Teoria da perturbação dependente do tempo

A equação de Schrödinger dependente do tempo

$$i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \nabla^2 + E_P(\vec{r}) \right]}_{=\hat{H}(\vec{r})} \Psi(\vec{r}, t)$$

possui a solução

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E \cdot t}{\hbar}}$$

A densidade de probabilidade é dada por

$$\begin{aligned} \|\Psi(\vec{r}, t)\|^2 &= \Psi^*(\vec{r}, t) \cdot \Psi(\vec{r}, t) = \left[\psi(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E \cdot t}{\hbar}} \right]^* \cdot \left[\psi(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E \cdot t}{\hbar}} \right] = \\ &= \psi^*(\vec{r}) \cdot \psi(\vec{r}) \cdot e^{\frac{i \cdot E \cdot t}{\hbar}} \cdot e^{-\frac{i \cdot E \cdot t}{\hbar}} = \psi^*(\vec{r}) \cdot \psi(\vec{r}) = \|\psi(\vec{r})\|^2 \end{aligned}$$

Vê-se que a densidade de probabilidade é independente do tempo, portanto a equação de Schrödinger dependente do tempo fornece uma amplitude de probabilidade dependente do tempo, mas ao obter a função densidade de probabilidade, a dependência temporal é retirada, sobrando somente a dependência espacial.

Para permitir a transição entre estados de diferentes níveis de energia (valores de energia total do sistema), será necessário introduzir um potencial dependente do tempo na equação de Schrödinger

$$i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \nabla^2 + E_P(\vec{r}, t) \right]}_{=\hat{H}(\vec{r}, t)} \Psi(\vec{r}, t)$$

Essa equação nem sempre tem uma solução exata fácil de se encontrar. Para solucionar a equação, pode-se tratar a parte temporal como uma perturbação $H'(\vec{r}, t)$ (dependente da posição e principalmente do tempo), desde que seja pequena quando comparada com a parte independente do tempo $\hat{H}_0(\vec{r})$. Somadas resultam em

$$\hat{H}(\vec{r}, t) = \hat{H}_0(\vec{r}) + H'(\vec{r}, t)$$

Uma vez que $\hat{H}_0(\vec{r})$ será a parte dependente somente da posição, o termo $-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \nabla^2$ estará presente (pois o operador laplaciano ∇^2 é dependente da posição). O potencial $E_p(\vec{r}, t)$ é uma função dependente do tempo, e será essa função (ou um parcela dela, caso seja possível separar numa soma de dois outros potenciais, um dependente do tempo e o outro não) que estará presente em $H'(\vec{r}, t)$.

2.4.6.1 Sistemas de dois níveis de energia

Considere duas funções de onda ortonormais ($\psi_a(\vec{r})$ e $\psi_b(\vec{r})$) e a hamiltoniana sem a perturbação dependente do tempo

$$\begin{cases} \hat{H}_0 \psi_a(\vec{r}) = E_a \cdot \psi_a(\vec{r}) \\ \hat{H}_0 \psi_b(\vec{r}) = E_b \cdot \psi_b(\vec{r}) \\ \langle \psi_a(\vec{r}) | \psi_b(\vec{r}) \rangle = \delta_{a,b} \end{cases}$$

esses estados com dependência temporal são dados por

$$\begin{cases} \Psi_a(\vec{r}, t) = \psi_a(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_a \cdot t}{\hbar}} \\ \Psi_b(\vec{r}, t) = \psi_b(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_b \cdot t}{\hbar}} \end{cases}$$

A partir desses dois estados pode-se construir o seguinte estado

$$\Psi(\vec{r}, t) = c_a \cdot \psi_a(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_a \cdot t}{\hbar}} + c_b \cdot \psi_b(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_b \cdot t}{\hbar}}$$

em que $\|c_a\|^2$ é a probabilidade de se encontrar o sistema no estado representado por $\psi_a(\vec{r})$ e $\|c_b\|^2$ é a probabilidade de se encontrar o sistema no estado representado por $\psi_b(\vec{r})$. Portanto

$$\|c_a\|^2 + \|c_b\|^2 = 1$$

2.4.6.2 Sistema de dois níveis com perturbação dependente do tempo

Para se descrever um sistema em que há a transição entre seus dois níveis, acrescenta-se uma perturbação $H'(\vec{r}, t)$. O que difere esse sistema com o sistema de dois níveis sem a perturbação temporal, é o fato de que as constantes c_a e c_b serão trocadas pelas funções dependentes do tempo $c_a(t)$ e $c_b(t)$, respectivamente, para permitir a transição entre os dois níveis

$$\Psi_{a,b}(\vec{r}, t) = c_a(t) \cdot \underbrace{\psi_a(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_a \cdot t}{\hbar}}}_{=\Psi_a(\vec{r}, t)} + c_b(t) \cdot \underbrace{\psi_b(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_b \cdot t}{\hbar}}}_{=\Psi_b(\vec{r}, t)}$$

Supondo que o sistema no tempo $t = 0$ esteja no estado representado pela função de onda $\Psi_a(\vec{r}, t)$ e que no tempo $t = t_1$ passa a estar no estado representado pela função de onda $\Psi_b(\vec{r}, t)$, então

$$(c_a(0) = 1) \wedge (c_b(0) = 0)$$

$$(c_a(t_1) = 0) \wedge (c_b(t_1) = 1)$$

A equação de Schrödinger com a perturbação temporal será

$$\underbrace{[\hat{H}_0(\vec{r}) + H'(\vec{r}, t)]}_{=\hat{H}(\vec{r}, t)} \Psi(\vec{r}, t) = i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t}$$

Calculando $[\hat{H}_0(\vec{r}) + H'(\vec{r}, t)]\Psi(\vec{r}, t)$, tem-se

$$\begin{aligned} & [\hat{H}_0(\vec{r}) + H'(\vec{r}, t)]\Psi(\vec{r}, t) = \\ & = [\hat{H}_0(\vec{r}) + H'(\vec{r}, t)] \left[c_a(t) \cdot \psi_a(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_a \cdot t}{\hbar}} + c_b(t) \cdot \psi_b(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_b \cdot t}{\hbar}} \right] = \\ & = c_a(t) \cdot \hat{H}_0(\vec{r}) \psi_a(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_a \cdot t}{\hbar}} + c_b(t) \cdot \hat{H}_0(\vec{r}) \psi_b(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_b \cdot t}{\hbar}} + c_a(t) \cdot \\ & \cdot H'(\vec{r}, t) \cdot \psi_a(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_a \cdot t}{\hbar}} + c_b(t) \cdot H'(\vec{r}, t) \cdot \psi_b(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_b \cdot t}{\hbar}} \end{aligned}$$

Substituindo o sistema $\begin{cases} \hat{H}_0 \psi_a(\vec{r}) = E_a \cdot \psi_a(\vec{r}) \\ \hat{H}_0 \psi_b(\vec{r}) = E_b \cdot \psi_b(\vec{r}) \end{cases}$ encontrado na seção anterior,

tem-se

$$\begin{aligned}
& [\hat{H}_0(\vec{r}) + H'(\vec{r}, t)]\Psi(\vec{r}, t) = \\
& = c_a(t) \cdot E_a \cdot \psi_a(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_a \cdot t}{\hbar}} + c_b(t) \cdot E_b \cdot \psi_b(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_b \cdot t}{\hbar}} + c_a(t) \cdot \\
& \cdot H'(\vec{r}, t) \cdot \psi_a(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_a \cdot t}{\hbar}} + c_b(t) \cdot H'(\vec{r}, t) \cdot \psi_b(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_b \cdot t}{\hbar}}
\end{aligned}$$

Calculando $i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t}$, tem-se

$$\begin{aligned}
i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} &= i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} \left[c_a(t) \cdot \psi_a(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_a \cdot t}{\hbar}} + c_b(t) \cdot \psi_b(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_b \cdot t}{\hbar}} \right] = \\
&= i \cdot \hbar \cdot \\
&\cdot \left[\frac{dc_a(t)}{dt} \cdot \psi_a(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_a \cdot t}{\hbar}} + c_a(t) \cdot \psi_a(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_a \cdot t}{\hbar}} \cdot \left(-\frac{i \cdot E_a}{\hbar} \right) + \frac{dc_b(t)}{dt} \cdot \right. \\
&\cdot \psi_b(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_b \cdot t}{\hbar}} + c_b(t) \cdot \psi_b(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_b \cdot t}{\hbar}} \cdot \left. \left(-\frac{i \cdot E_b}{\hbar} \right) \right] = \\
&= i \cdot \hbar \cdot \frac{dc_a(t)}{dt} \cdot \psi_a(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_a \cdot t}{\hbar}} + E_a \cdot c_a(t) \cdot \psi_a(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_a \cdot t}{\hbar}} + i \cdot \hbar \cdot \\
&\cdot \frac{dc_b(t)}{dt} \cdot \psi_b(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_b \cdot t}{\hbar}} + E_b \cdot c_b(t) \cdot \psi_b(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_b \cdot t}{\hbar}}
\end{aligned}$$

Substituindo os membros calculados na equação, tem-se

$$\begin{aligned}
& c_a(t) \cdot E_a \cdot \psi_a(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_a \cdot t}{\hbar}} + c_b(t) \cdot E_b \cdot \psi_b(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_b \cdot t}{\hbar}} + c_a(t) \cdot H'(\vec{r}, t) \cdot \\
& \cdot \psi_a(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_a \cdot t}{\hbar}} + c_b(t) \cdot H'(\vec{r}, t) \cdot \psi_b(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_b \cdot t}{\hbar}} = \\
& = i \cdot \hbar \cdot \frac{dc_a(t)}{dt} \cdot \psi_a(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_a \cdot t}{\hbar}} + E_a \cdot c_a(t) \cdot \psi_a(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_a \cdot t}{\hbar}} + i \cdot \hbar \cdot \\
& \cdot \frac{dc_b(t)}{dt} \cdot \psi_b(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_b \cdot t}{\hbar}} + E_b \cdot c_b(t) \cdot \psi_b(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_b \cdot t}{\hbar}}
\end{aligned}$$

Simplificando os termos que aparecem em ambos os membros da equação tem-se

$$\begin{aligned}
& c_a(t) \cdot H'(\vec{r}, t) \cdot \psi_a(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_a \cdot t}{\hbar}} + c_b(t) \cdot H'(\vec{r}, t) \cdot \psi_b(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_b \cdot t}{\hbar}} = \\
& = i \cdot \hbar \cdot \frac{dc_a(t)}{dt} \cdot \psi_a(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_a \cdot t}{\hbar}} + i \cdot \hbar \cdot \frac{dc_b(t)}{dt} \cdot \psi_b(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_b \cdot t}{\hbar}}
\end{aligned}$$

Se as funções de onda $\psi_a(\vec{r})$ e $\psi_b(\vec{r})$ são ortonormais, então pode-se multiplicar ambos os membros por $\psi_a^*(\vec{r})$ e depois integrar ambos os membros da equação, desta forma, pode-se tirar proveito da ortonormalização

$$\begin{aligned} \left\langle \psi_a(\vec{r}) \left| c_a(t) \cdot H'(\vec{r}, t) \cdot \psi_a(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_a \cdot t}{\hbar}} + c_b(t) \cdot H'(\vec{r}, t) \cdot \psi_b(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_b \cdot t}{\hbar}} \right. \right\rangle = \\ = \left\langle \psi_a(\vec{r}) \left| i \cdot \hbar \cdot \frac{dc_a(t)}{dt} \cdot \psi_a(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_a \cdot t}{\hbar}} + i \cdot \hbar \cdot \frac{dc_b(t)}{dt} \cdot \psi_b(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_b \cdot t}{\hbar}} \right. \right\rangle \end{aligned}$$

Retirando o que é constante na integração, tem-se

$$\begin{aligned} c_a(t) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_a \cdot t}{\hbar}} \cdot \langle \psi_a(\vec{r}) | H'(\vec{r}, t) | \psi_a(\vec{r}) \rangle + c_b(t) \cdot e^{-\frac{i \cdot E_b \cdot t}{\hbar}} \cdot \\ \cdot \langle \psi_a(\vec{r}) | H'(\vec{r}, t) | \psi_b(\vec{r}) \rangle = \\ = i \cdot \hbar \cdot \frac{dc_a(t)}{dt} \cdot e^{-\frac{i \cdot E_a \cdot t}{\hbar}} \cdot \underbrace{\langle \psi_a(\vec{r}) | \psi_a(\vec{r}) \rangle}_{=1} + i \cdot \hbar \cdot \frac{dc_b(t)}{dt} \cdot e^{-\frac{i \cdot E_b \cdot t}{\hbar}} \cdot \\ \cdot \underbrace{\langle \psi_a(\vec{r}) | \psi_b(\vec{r}) \rangle}_{=0} \end{aligned}$$

Isolando o termo $\frac{dc_a(t)}{dt}$ tem-se

$$\begin{aligned} \frac{dc_a(t)}{dt} = \\ = -\frac{i}{\hbar} \cdot \\ \cdot \left[c_a(t) \cdot \langle \psi_a(\vec{r}) | H'(\vec{r}, t) | \psi_a(\vec{r}) \rangle + c_b(t) \cdot e^{-\frac{i \cdot (E_b - E_a) \cdot t}{\hbar}} \cdot \right. \\ \left. \cdot \langle \psi_a(\vec{r}) | H'(\vec{r}, t) | \psi_b(\vec{r}) \rangle \right] \end{aligned}$$

De forma semelhante tem-se

$$\begin{aligned}
\frac{dc_b(t)}{dt} &= \\
&= -\frac{i}{\hbar} \cdot \\
&\cdot \left[c_b(t) \cdot \langle \psi_b(\vec{r}) | H'(\vec{r}, t) | \psi_b(\vec{r}) \rangle + c_a(t) \cdot e^{\frac{i \cdot (E_b - E_a) \cdot t}{\hbar}} \cdot \right. \\
&\quad \left. \cdot \langle \psi_b(\vec{r}) | H'(\vec{r}, t) | \psi_a(\vec{r}) \rangle \right]
\end{aligned}$$

É comum ocorrer que $\langle \psi_a(\vec{r}) | H'(\vec{r}, t) | \psi_a(\vec{r}) \rangle$ seja nulo quando a perturbação $H'(\vec{r}, t)$ quando multiplicada com a função $\psi_a(\vec{r})$ resulta em outra função $\psi_{a'}(\vec{r})$, com $a \neq a'$, ou seja

$$\langle \psi_a(\vec{r}) | H'(\vec{r}, t) | \psi_a(\vec{r}) \rangle = \langle \psi_a(\vec{r}) | H'(\vec{r}, t) \cdot \psi_a(\vec{r}) \rangle = \langle \psi_a(\vec{r}) | \psi_{a'}(\vec{r}) \rangle \cdot C(t)$$

Uma vez que os estados são ortogonais, tem-se

$$\langle \psi_a(\vec{r}) | \psi_{a'}(\vec{r}) \rangle = 0, \quad a \neq a'$$

em que $C(t)$ é uma função de t ou uma constante, não podendo ser uma função de \vec{r} . Portanto,

$$\begin{aligned}
\langle \psi_a(\vec{r}) | H'(\vec{r}, t) | \psi_a(\vec{r}) \rangle = 0 &\Rightarrow \\
\Rightarrow \begin{cases} \frac{dc_a(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \cdot c_b(t) \cdot e^{-\frac{i \cdot (E_b - E_a) \cdot t}{\hbar}} \cdot \langle \psi_a(\vec{r}) | H'(\vec{r}, t) | \psi_b(\vec{r}) \rangle \\ \frac{dc_b(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \cdot c_a(t) \cdot e^{\frac{i \cdot (E_b - E_a) \cdot t}{\hbar}} \cdot \langle \psi_b(\vec{r}) | H'(\vec{r}, t) | \psi_a(\vec{r}) \rangle \end{cases}
\end{aligned}$$

2.4.6.3 Correções dos coeficientes

Inicialmente foi admitido as seguinte condições

$$(c_a(0) = 1) \wedge (c_b(0) = 0)$$

$$(c_a(t_1) = 0) \wedge (c_b(t_1) = 1)$$

Também será suposto que

$$\langle \psi_a(\vec{r}) | H'(\vec{r}, t) | \psi_a(\vec{r}) \rangle = 0$$

A partir dessas condições serão encontradas as correções.

A correção de ordem zero será dada por

$$\begin{cases} c_a^{(0)}(t) = 1 \\ c_b^{(0)}(t) = 0 \end{cases}$$

Trata-se do caso em que não há perturbação, pois das condições acima, quando $t = 0$ tem-se que $c_a(t) = 1$ e $c_b(t) = 0$, e das correções de ordem zero, para qualquer t , tem-se que $c_a^{(0)}(t) = 1$ e $c_b^{(0)}(t) = 0$, ou seja, não há transição entre os estados, portanto não há perturbação.

A correção de primeira ordem é dada por

$$\frac{dc_a^{(1)}(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \cdot \underbrace{c_b^{(0)}(t)}_{=0} \cdot e^{-\frac{i \cdot (E_b - E_a) \cdot t}{\hbar}} \cdot \langle \psi_a(\vec{r}) | H'(\vec{r}, t) | \psi_b(\vec{r}) \rangle = 0$$

portanto,

$$c_a^{(1)}(t) = \int_0^t 0 \cdot dt' = 1$$

Devido à normalização a constante é 1. Para $c_b^{(1)}(t)$ tem-se

$$\begin{aligned} \frac{dc_b^{(1)}(t)}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} \cdot \underbrace{c_a^{(0)}(t)}_{=1} \cdot e^{\frac{i \cdot (E_b - E_a) \cdot t}{\hbar}} \cdot \langle \psi_b(\vec{r}) | H'(\vec{r}, t) | \psi_a(\vec{r}) \rangle = \\ &= -\frac{i}{\hbar} \cdot e^{\frac{i \cdot (E_b - E_a) \cdot t}{\hbar}} \cdot \langle \psi_b(\vec{r}) | H'(\vec{r}, t) | \psi_a(\vec{r}) \rangle \end{aligned}$$

portanto,

$$c_b^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \cdot \int_0^t e^{\frac{i \cdot (E_b - E_a) \cdot t'}{\hbar}} \cdot \langle \psi_b(\vec{r}) | H'(\vec{r}, t') | \psi_a(\vec{r}) \rangle dt'$$

Assim a correção de primeira ordem fornece

$$\begin{cases} c_a^{(1)}(t) = 1 \\ c_b^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \cdot \int_0^t e^{\frac{i \cdot (E_b - E_a) \cdot t'}{\hbar}} \cdot \langle \psi_b(\vec{r}) | H'(\vec{r}, t') | \psi_a(\vec{r}) \rangle dt' \end{cases}$$

A correção de segunda ordem é dada por

$$\frac{dc_a^{(2)}(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \cdot c_b^{(1)}(t) \cdot e^{-\frac{i \cdot (E_b - E_a) \cdot t}{\hbar}} \cdot \langle \psi_a(\vec{r}) | H'(\vec{r}, t) | \psi_b(\vec{r}) \rangle$$

$$\begin{aligned} \frac{dc_a^{(2)}(t)}{dt} &= \\ &= -\frac{i}{\hbar} \cdot \left[-\frac{i}{\hbar} \cdot \int_0^t e^{\frac{i(E_b-E_a)\cdot t'}{\hbar}} \cdot \langle \psi_b(\vec{r}) | H'(\vec{r}, t') | \psi_a(\vec{r}) \rangle dt' \right] \cdot e^{-\frac{i(E_b-E_a)\cdot t}{\hbar}} \cdot \\ &\quad \cdot \langle \psi_a(\vec{r}) | H'(\vec{r}, t) | \psi_b(\vec{r}) \rangle \end{aligned}$$

portanto,

$$\begin{aligned} c_a^{(2)}(t) &= \\ &= -\frac{1}{\hbar^2} \cdot \\ &\quad \cdot \int_0^t e^{-\frac{i(E_b-E_a)\cdot t'}{\hbar}} \cdot \langle \psi_a(\vec{r}) | H'(\vec{r}, t') | \psi_b(\vec{r}) \rangle \cdot \\ &\quad \cdot \int_0^{t'} e^{\frac{i(E_b-E_a)\cdot t''}{\hbar}} \cdot \langle \psi_b(\vec{r}) | H'(\vec{r}, t'') | \psi_a(\vec{r}) \rangle dt'' dt' \end{aligned}$$

Para $c_b^{(2)}(t)$ tem-se

$$\frac{dc_b^{(2)}(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \cdot \underbrace{c_a^{(1)}(t)}_{=1} \cdot e^{\frac{i(E_b-E_a)\cdot t}{\hbar}} \cdot \langle \psi_b(\vec{r}) | H'(\vec{r}, t) | \psi_a(\vec{r}) \rangle$$

portanto,

$$c_b^{(2)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \cdot \int_0^t e^{\frac{i(E_b-E_a)\cdot t'}{\hbar}} \cdot \langle \psi_b(\vec{r}) | H'(\vec{r}, t') | \psi_a(\vec{r}) \rangle dt'$$

Assim a correção de segunda fornece

$$\begin{aligned} c_a^{(2)}(t) &= \\ &= -\frac{1}{\hbar^2} \cdot \\ &\quad \cdot \int_0^t e^{-\frac{i(E_b-E_a)\cdot t'}{\hbar}} \cdot \langle \psi_a(\vec{r}) | H'(\vec{r}, t') | \psi_b(\vec{r}) \rangle \cdot \\ &\quad \cdot \int_0^{t'} e^{\frac{i(E_b-E_a)\cdot t''}{\hbar}} \cdot \langle \psi_b(\vec{r}) | H'(\vec{r}, t'') | \psi_a(\vec{r}) \rangle dt'' dt' \\ c_b^{(2)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \cdot \int_0^t e^{\frac{i(E_b-E_a)\cdot t'}{\hbar}} \cdot \langle \psi_b(\vec{r}) | H'(\vec{r}, t') | \psi_a(\vec{r}) \rangle dt' \end{aligned}$$

Desta forma pode-se obter a correção de n-ésima ordem repetindo o procedimento anterior n vezes para ambos os coeficientes relacionados aos estados $\Psi_a(\vec{r}, t)$ e $\Psi_b(\vec{r}, t)$.

2.4.6.4 Perturbação senoidal

Suponha uma perturbação com dependência temporal $H'(\vec{r}, t)$ descrita por

$$H'(\vec{r}, t) = E_P(\vec{r}) \cdot \cos(\omega \cdot t)$$

portanto,

$$\langle \psi_a(\vec{r}) | H'(\vec{r}, t) | \psi_b(\vec{r}) \rangle = \langle \psi_a(\vec{r}) | E_P(\vec{r}) | \psi_b(\vec{r}) \rangle \cdot \cos(\omega \cdot t)$$

Considerando a correção de primeira ordem, tem-se

$$\begin{aligned} c_b^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \cdot \int_0^t e^{\frac{i \cdot (E_b - E_a) \cdot t'}{\hbar}} \cdot \langle \psi_b(\vec{r}) | H'(\vec{r}, t') | \psi_a(\vec{r}) \rangle dt' = \\ &= -\frac{i}{\hbar} \cdot \langle \psi_a(\vec{r}) | E_P(\vec{r}) | \psi_b(\vec{r}) \rangle \cdot \int_0^t e^{\frac{i \cdot (E_b - E_a) \cdot t'}{\hbar}} \cdot \cos(\omega \cdot t') dt' \end{aligned}$$

Mas como $e^{i\theta} = \cos \theta + i \cdot \text{sen } \theta$ e $e^{-i\theta} = \cos \theta - i \cdot \text{sen } \theta$, tem-se a seguinte identidade

$$\cos \theta = \frac{e^{i\theta} + e^{-i\theta}}{2}$$

Substituindo θ por $\omega \cdot t$ e usando a identidade na correção de primeira ordem

$c_b^{(1)}(t)$, tem-se

$$\begin{aligned} c_b^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \cdot \langle \psi_a(\vec{r}) | E_P(\vec{r}) | \psi_b(\vec{r}) \rangle \cdot \int_0^t e^{\frac{i \cdot (E_b - E_a) \cdot t'}{\hbar}} \cdot \frac{e^{i\omega \cdot t'} + e^{-i\omega \cdot t'}}{2} dt' = \\ &= -\frac{i \cdot \langle \psi_a(\vec{r}) | E_P(\vec{r}) | \psi_b(\vec{r}) \rangle}{2 \cdot \hbar} \cdot \int_0^t \left\{ e^{i \left[\frac{(E_b - E_a)}{\hbar} + \omega \right] \cdot t'} + e^{i \left[\frac{(E_b - E_a)}{\hbar} - \omega \right] \cdot t'} \right\} dt' \end{aligned}$$

Calculando as integrais separadamente, tem-se

$$\begin{aligned} \int_0^t e^{i \cdot \left[\frac{(E_b - E_a)}{\hbar} + \omega \right] \cdot t'} \cdot dt' &= \frac{1}{i \cdot \left[\frac{(E_b - E_a)}{\hbar} + \omega \right]} \cdot \left[e^{i \cdot \left[\frac{(E_b - E_a)}{\hbar} + \omega \right] \cdot t'} \right]_{t'=0}^{t'=t} = \\ &= \frac{-i}{\frac{(E_b - E_a)}{\hbar} + \omega} \cdot \left\{ e^{i \cdot \left[\frac{(E_b - E_a)}{\hbar} + \omega \right] \cdot t} - 1 \right\} = \frac{-i \cdot \left\{ e^{i \cdot \left[\frac{(E_b - E_a)}{\hbar} + \omega \right] \cdot t} - 1 \right\}}{\frac{(E_b - E_a)}{\hbar} + \omega} \end{aligned}$$

Da mesma forma

$$\int_0^t e^{i \cdot \left[\frac{(E_b - E_a)}{\hbar} - \omega \right] \cdot t'} \cdot dt' = \frac{-i \cdot \left\{ e^{i \cdot \left[\frac{(E_b - E_a)}{\hbar} - \omega \right] \cdot t} - 1 \right\}}{\frac{(E_b - E_a)}{\hbar} - \omega}$$

Substituindo na correção $c_b^{(1)}(t)$, tem-se

$$\begin{aligned} c_b^{(1)}(t) &= \\ &= -\frac{\langle \psi_a(\vec{r}) | E_P(\vec{r}) | \psi_b(\vec{r}) \rangle}{2 \cdot \hbar} \cdot \left(\frac{e^{i \cdot \left[\frac{(E_b - E_a)}{\hbar} + \omega \right] \cdot t} - 1}{\frac{(E_b - E_a)}{\hbar} + \omega} + \frac{e^{i \cdot \left[\frac{(E_b - E_a)}{\hbar} - \omega \right] \cdot t} - 1}{\frac{(E_b - E_a)}{\hbar} - \omega} \right) \end{aligned}$$

portanto, a probabilidade de transição do estado $\psi_a(\vec{r})$ para o estado $\psi_b(\vec{r})$ é dado por

$$\mathcal{P}_{\|\Psi_{a,b}\|}(n; t) \approx \left\| c_a^{(1)}(t) \right\|^2 \cdot \mathcal{J}_{\{a\}}(n) + \left\| c_b^{(1)}(t) \right\|^2 \cdot \mathcal{J}_{\{b\}}(n)$$

ou seja, a probabilidade de um sistema estar no estado com função densidade de probabilidade $\|\psi_a(\vec{r})\|^2$ em um tempo t (parâmetro) é dado por $\left\| c_a^{(1)}(t) \right\|^2$ e a probabilidade de um sistema estar no estado com função densidade de probabilidade $\|\psi_b(\vec{r})\|^2$ em um tempo t é dado por $\left\| c_b^{(1)}(t) \right\|^2$. Como pode se observar, trata-se de uma função de probabilidade de Bernoulli. Note que na função de probabilidade não aparece a variável aleatória posição \vec{r} pois trata-se de uma função de probabilidade marginal para a variável aleatória n , que pode assumir os valores contidos no conjunto $\{a, b\}$. O sinal \approx (quase igual a) foi

utilizado pois trata-se de um método de aproximação, que em alguns casos pode coincidir com a solução exata. Pode-se verificar que

$$\|c_a^{(1)}(t)\|^2 + \|c_b^{(1)}(t)\|^2 = 1$$

portanto,

$$\mathcal{P}_{\|\Psi_{a,b}\|}(n \in \{a, b\}; t) = \|c_a^{(1)}(t)\|^2 + \|c_b^{(1)}(t)\|^2 = 1$$

3 METODOLOGIA

O delineamento da pesquisa consiste de Pesquisa Bibliográfica, onde foi utilizado o acervo bibliográfico em Estatística, Matemática e Física, teórica e aplicada, existente na Universidade Federal de Lavras, da biblioteca particular do orientador e orientado, e acervo de outras bibliotecas disponíveis na Internet.

A revisão foi realizada durante os estudos pessoais e em equipe, e a reorganização dos textos lidos e discutidos consiste na própria proposta do trabalho, junto com todas as demonstrações realizadas. Por causa disto, nos resultados do desenvolvimento da seção **Interpretação Estatística**, estão contemplados estas demonstrações e a reorganização.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

As demonstrações que serão apresentadas na seção **Interpretação Estatística** e em suas subseções são contribuições desta dissertação, com exceção de algumas, que foram retiradas da literatura e foram acrescidas e/ou destacados alguns detalhes que não mudam sua essência, mas foram mantidas nesta seção para manter uma coerência no texto, que é a principal contribuição desta dissertação. As demonstrações retiradas da literatura são:

- a) A demonstração apresentada na seção **Independência do Tempo para a Probabilidade de Ω** foi essencialmente obtida de Griffiths(1995).
- b) A demonstração apresentada na seção **Momento Linear** foi obtida de Griffiths (1995).

As interpretações apresentadas nas seções O Oscilador Harmônico Simples e O Átomo de Hidrogênio são exemplos de aplicações do que foi apresentado nesta dissertação, suas demonstrações foram retiradas de Griffiths (1995), com exceção da demonstração da função densidade de probabilidade apresentada na subseção **Distribuição de Probabilidade do Oscilador Harmônico Simples Clássico**, que é uma contribuição desta dissertação.

A interpretação dada no final da seção **Perturbação Senoidal** é coerente com o que é apresentado em **Interpretação Estatística**, mas como todo o restante do conteúdo é encontrado na literatura, então foi mantido no referencial teórico.

4.1 Interpretação estatística

Admitindo o caso unidimensional, o módulo ao quadrado $\|\Psi(x, t)\|^2$ trata-se da função densidade de probabilidade (postulado de Born) para se encontrar a partícula na posição x e tempo t . Como se supõe que a partícula exista em todo tempo t (o tempo é um parâmetro), então tem-se que

$$\mathcal{P}_{\|\Psi\|^2}(x \in R; t) = \int_{x \in R} \|\Psi(x, t)\|^2 dx$$

que significa que a probabilidade de x possuir algum valor na região R (ou seja, possuir algum valor pertencente ao conjunto R) no tempo t (que é parâmetro da função de probabilidade) com densidade de probabilidade $\|\Psi\|^2$, é dada pela integral $\int_R \|\Psi(x, t)\|^2 dx$.

Uma vez que $\|\Psi(x, t)\|^2$ trata-se da função densidade de probabilidade para se encontrar a partícula na posição x e tempo t , então deve respeitar a seguinte condição

$$(\forall x \in \mathbb{R})(\forall t \in \mathbb{R})(\|\Psi(x, t)\|^2 \geq 0)$$

Como o módulo de um número complexo é um valor real, então seu quadrado será um valor real não-negativo, portanto tal condição é garantida.

O espaço amostral Ω é formado por todas as posições possíveis de se encontrar a partícula

$$\Omega = \{w: w \text{ é a posição } x \text{ que a partícula pode assumir}\}$$

Como a posição é uma quantidade contínua e acessível à medição, portanto o conjunto que se adequa é o conjunto dos números reais \mathbb{R} , assim a σ -álgebra que se adequa é a de Borel $\mathcal{B}(\mathbb{R})$ que contém todos os intervalos abertos dos reais. A σ -álgebra de Borel pode ser gerada pelo conjunto de todos os intervalos abertos $\{(-\infty; x): x \in \mathbb{R}\}$ utilizando-se das definições apresentadas na seção **σ -Álgebra**. Do mesmo modo, a variável aleatória X será contínua, ou seja, possuirá imagem no conjuntos dos números reais

$$X: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$$

A variável x será o valor observado de X , ou seja

$$x = X(w)$$

desta forma o valor de x está associado a um evento w pertencente ao espaço amostral. A σ -álgebra de Borel tem o papel de definir o domínio da função de probabilidade \mathcal{P}

$$\mathcal{P}: \mathcal{B}(\mathbb{R}) \rightarrow [0; 1]$$

possibilitando o cálculo da probabilidade de conjuntos de números reais, como definido no início desta seção

$$\mathcal{P}_{\|\Psi\|^2}(x \in R; t) = \int_{x \in R} \|\Psi(x, t)\|^2 dx$$

ou seja, a cada conjunto contido nos reais será associado um valor real maior ou igual a 0 e menor ou igual a 1, ou seja, contido no intervalo $[0; 1]$.

Supondo que a partícula não é criada e nem aniquilada, então deve existir em alguma parte do espaço a todo instante t , então deve respeitar a seguinte condição

$$(\forall t \in \mathbb{R}) \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \|\Psi(x, t)\|^2 dx = 1 \right)$$

daí fica claro o papel da variável t como parâmetro da função densidade de probabilidade com variável aleatória posição x .

Existem quatro possibilidades

a) A integral é igual a 1

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \|\Psi(x, t)\|^2 dx = 1$$

b) A integral é igual a uma constante diferente de 1 e de 0

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \|\Psi(x, t)\|^2 dx = C, \quad C \in \mathbb{R}_+^* - \{1\}$$

c) A integral é igual a zero

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \|\Psi(x, t)\|^2 dx = 0$$

d) A integral não converge

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \|\Psi(x, t)\|^2 dx = +\infty$$

Não existe a possibilidade de valores negativos, uma vez que $\|\Psi(x, t)\|^2 \geq 0$, por isso tal consideração não foi cogitada nos quatro casos acima. Pode-se esperar que $\int_{-\infty}^{+\infty} \|\Psi(x, t)\|^2 dx$ seja igual a uma função f da variável t (simplesmente variável, e não uma variável aleatória), uma vez que está a se integrar com relação a x um integrando que é uma função de x e de t . Tal situação $\left(\int_{-\infty}^{+\infty} \|\Psi(x, t)\|^2 dx = f(t)\right)$ será tratada na próxima seção.

Nas subseções que se seguem, serão tratados os casos acima referidos.

4.1.1 Normalização da função de onda

Para resolver o caso (b), uma vez que $\Psi(x, t)$ é solução de uma equação diferencial, sabe-se que a solução multiplicada por uma constante também será uma solução da equação diferencial, portanto pode-se utilizar uma constante para torna-la igual a 1, como se segue

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \|\Psi(x, t)\|^2 dx = C \quad \therefore \quad \frac{1}{C} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \|\Psi(x, t)\|^2 dx = 1$$

Tal constante $(1/C)$ é denominada constante normalizadora.

Inicialmente considere que $\Psi(x, t)$ seja uma solução da equação de Schrödinger, então

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

Agora considere a função $\Psi'(x, t)$ obtida através da multiplicação da função $\Psi(x, t)$ com uma constante A pertencente ao conjunto dos números complexos

$$\Psi'(x, t) = A \cdot \Psi(x, t)$$

Substituindo $\Psi'(x, t)$ na equação de Schrödinger

$$\begin{aligned} i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial \Psi'(x, t)}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi'(x, t)}{\partial x^2} + E_p(x) \cdot \Psi'(x, t) \\ i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} [A \cdot \Psi(x, t)] &= -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} [A \cdot \Psi(x, t)] + E_p(x) \cdot A \cdot \Psi(x, t) \\ A \cdot i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} &= A \cdot \left[-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + E_p(x) \cdot \Psi(x, t) \right] \\ i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + E_p(x) \cdot \Psi(x, t) \end{aligned}$$

ou seja, a multiplicação da solução por uma constante também é uma solução.

Agora parte-se para o cálculo da integral $\int_{-\infty}^{+\infty} \|\Psi'(x, t)\|^2 dx$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \|\Psi'(x, t)\|^2 dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} \|A \cdot \Psi(x, t)\|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \|A\|^2 \cdot \|\Psi(x, t)\|^2 dx = \\ &= \|A\|^2 \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \|\Psi(x, t)\|^2 dx = \|A\|^2 \cdot C \end{aligned}$$

Todo número complexo pode ser escrito na forma polar

$$A = \rho \cdot (\cos \theta + i \cdot \sen \theta)$$

cujos módulo é

$$\|A\| = \rho$$

portanto, se for escolhido uma constante A com módulo $\|A\| = 1/\sqrt{C}$, então

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \|\Psi'(x, t)\|^2 dx = \|A\|^2 \cdot C = \left(\frac{1}{\sqrt{C}}\right)^2 \cdot C = \frac{1}{C} \cdot C = 1$$

Assim, pode ser encontrada uma constante A que normalize a integral $\int_{-\infty}^{+\infty} \|\Psi'(x, t)\|^2 dx$, de forma que $\|\Psi'(x, t)\|^2$ representará uma função densidade de probabilidade.

4.1.2 Solução trivial

O caso (c) trata-se da solução trivial $\Psi(x, t) \equiv 0$, que não representa uma função densidade de probabilidade, e portanto é descartada.

4.1.3 Independência do tempo para a probabilidade de Ω

O fato de que a integral $\int_{-\infty}^{+\infty} \|\Psi(x, t)\|^2 dx$ ser uma integral em x (mas a função $\Psi(x, t)$ é de duas variáveis) implica em geral a possibilidade de que seu resultado seja uma função de t

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \|\Psi(x, t)\|^2 dx = f(t)$$

Impossibilitando encontrar uma constante que normalize a integral para todo t , a não ser quando $f(t)$ é igual a uma constante, para todo valor de t

$$(\forall t)(f(t) = C)$$

Para se verificar a hipótese de que $f(t)$ seja constante, deriva-se com relação a t , se o resultado for igual a 0, para qualquer valor de t , então estará comprovado que $f(t)$ é constante. Para que a integral não cresça indefinidamente (não convirja), deve-se exigir as seguintes condições

$$\left(\lim_{x \rightarrow -\infty} \Psi(x, t) = 0 \right) \wedge \left(\lim_{x \rightarrow +\infty} \Psi(x, t) = 0 \right)$$

Assim, para o conjugado da função de onda tem-se

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} \Psi^*(x, t) = \left[\lim_{x \rightarrow -\infty} \Psi(x, t) \right]^* = 0^* = 0$$

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} \Psi^*(x, t) = \left[\lim_{x \rightarrow +\infty} \Psi(x, t) \right]^* = 0^* = 0$$

portanto,

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow -\infty} \|\Psi(x, t)\|^2 &= \lim_{x \rightarrow -\infty} [\Psi^*(x, t) \cdot \Psi(x, t)] = \lim_{x \rightarrow -\infty} \Psi^*(x, t) \cdot \lim_{x \rightarrow -\infty} \Psi(x, t) = \\ &= 0 \end{aligned}$$

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} \|\Psi(x, t)\|^2 = \lim_{x \rightarrow +\infty} [\Psi^*(x, t) \cdot \Psi(x, t)] = \lim_{x \rightarrow +\infty} \Psi^*(x, t) \cdot \lim_{x \rightarrow +\infty} \Psi(x, t) = 0$$

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \|\Psi(x, t)\|^2 = 0$$

Essa é uma condição necessária para que $\int_{-\infty}^{+\infty} \|\Psi(x, t)\|^2 dx$ convirja mas não é suficiente, pois se a integral for imprópria então não convergirá.

Derivando com relação a t , tem-se

$$\begin{aligned} \frac{df(t)}{dt} &= \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} \|\Psi(x, t)\|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial t} \|\Psi(x, t)\|^2 dx \\ \frac{\partial}{\partial t} \|\Psi(x, t)\|^2 &= \frac{\partial}{\partial t} [\Psi^*(x, t) \cdot \Psi(x, t)] = \\ &= \Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial t} \cdot \Psi(x, t) \end{aligned}$$

A partir da equação de Schrödinger, tem-se

$$\begin{aligned} i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + E_P(x) \cdot \Psi(x, t) \\ \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} &= \frac{i \cdot \hbar}{2 \cdot m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar} \cdot E_P(x) \cdot \Psi(x, t) \end{aligned}$$

Aplicando a operação de complexo conjugado em ambos os membros da equação, tem-se

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \right]^* &= \left[\frac{i \cdot \hbar}{2 \cdot m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar} \cdot E_P(x) \cdot \Psi(x, t) \right]^* \\ \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial t} &= -\frac{i \cdot \hbar}{2 \cdot m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi^*(x, t)}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar} \cdot E_P(x) \cdot \Psi^*(x, t) \end{aligned}$$

Substituindo as equações obtidas nas derivadas, tem-se

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \|\Psi(x, t)\|^2 &= \\
&= \Psi^*(x, t) \cdot \left[\frac{i \cdot \hbar}{2 \cdot m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar} \cdot E_P(x) \cdot \Psi(x, t) \right] + \\
&+ \left[-\frac{i \cdot \hbar}{2 \cdot m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi^*(x, t)}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar} \cdot E_P(x) \cdot \Psi^*(x, t) \right] \cdot \Psi(x, t) \\
\frac{\partial}{\partial t} \|\Psi(x, t)\|^2 &= \\
&= \frac{i \cdot \hbar}{2 \cdot m} \cdot \Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar} \cdot E_P(x) \cdot \Psi^*(x, t) \cdot \Psi(x, t) - \frac{i \cdot \hbar}{2 \cdot m} \cdot \\
&\cdot \frac{\partial^2 \Psi^*(x, t)}{\partial x^2} \cdot \Psi(x, t) + \frac{i}{\hbar} \cdot E_P(x) \cdot \Psi^*(x, t) \cdot \Psi(x, t) \\
\frac{\partial}{\partial t} \|\Psi(x, t)\|^2 &= \frac{i \cdot \hbar}{2 \cdot m} \cdot \Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} - \frac{i \cdot \hbar}{2 \cdot m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi^*(x, t)}{\partial x^2} \cdot \Psi(x, t) = \\
&= \frac{i \cdot \hbar}{2 \cdot m} \cdot \left[\Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*(x, t)}{\partial x^2} \cdot \Psi(x, t) \right]
\end{aligned}$$

Somando e subtraindo $\frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x}$ no segundo membro da equação, dentro dos colchetes

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \|\Psi(x, t)\|^2 &= \\
&= \frac{i \cdot \hbar}{2 \cdot m} \cdot \\
&\cdot \left[\Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} + \right. \\
&\left. - \frac{\partial^2 \Psi^*(x, t)}{\partial x^2} \cdot \Psi(x, t) \right]
\end{aligned}$$

Desenvolvendo a derivada $\frac{\partial}{\partial x} \left[\Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \right]$, tem-se

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \right] = \Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x}$$

Desenvolvendo a derivada $\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \Psi(x, t) \right]$, tem-se

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \Psi(x, t) \right] = \frac{\partial^2 \Psi^*(x, t)}{\partial x^2} \cdot \Psi(x, t) + \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x}$$

Somando-se as duas equações obtidas, tem-se a expressão contida nos colchetes da equação anterior, portanto

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \|\Psi(x, t)\|^2 &= \frac{i \cdot \hbar}{2 \cdot m} \cdot \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[\Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \Psi(x, t) \right] \right\} = \\ &= \frac{i \cdot \hbar}{2 \cdot m} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[\Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \Psi(x, t) \right] \end{aligned}$$

Substituindo na integral, tem-se

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial t} \|\Psi(x, t)\|^2 dx &= \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{i \cdot \hbar}{2 \cdot m} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[\Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \Psi(x, t) \right] dx = \\ &= \frac{i \cdot \hbar}{2 \cdot m} \cdot \left[\Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \Psi(x, t) \right]_{x \rightarrow -\infty}^{x \rightarrow +\infty} = \\ &= \lim_{x \rightarrow +\infty} \left\{ \frac{i \cdot \hbar}{2 \cdot m} \cdot \left[\Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \Psi(x, t) \right] \right\} + \\ &\quad - \lim_{x \rightarrow -\infty} \left\{ \frac{i \cdot \hbar}{2 \cdot m} \cdot \left[\Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \Psi(x, t) \right] \right\} \end{aligned}$$

Quando foi tratado o problema da normalização da função de onda $\Psi(x, t)$, admitiu-se a condição

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \Psi(x, t) = 0$$

Aplicando-se tal condição, tem-se

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \left[\Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \Psi(x, t) \right] &= \\ &= \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \Psi^*(x, t) \cdot \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \Psi(x, t) = \\ &= 0 \cdot \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot 0 = 0 \end{aligned}$$

então

$$\frac{df(t)}{dt} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial t} \|\Psi(x, t)\|^2 dx = 0$$

portanto,

$$f(t) = C$$

Assim fica provado que a integral $\int_{-\infty}^{+\infty} \|\Psi(x, t)\|^2 dx$ é independente de t , ou seja, é constante, portanto é normalizável

$$X: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$$

$$(X(\Omega) = \mathbb{R}) \Leftrightarrow (X^{(-1)}(\mathbb{R}) = \Omega)$$

$$(\forall t) (\mathcal{P}_{\|\Psi\|^2}(x \in \mathbb{R}; t) \equiv \mathcal{P}_{\|\Psi\|^2}(X^{(-1)}(\mathbb{R}) = \Omega; t) = 1)$$

portanto,

$$\mathcal{P}_{\|\Psi\|^2}(x \in \mathbb{R}; t) \equiv \mathcal{P}_{\|\Psi\|^2}(x \in \mathbb{R})$$

Apesar de $\int_{-\infty}^{+\infty} \|\Psi(x, t)\|^2 dx$ ser independente de t , a integral $\int_{x_1}^{x_2} \|\Psi(x, t)\|^2 dx$ pode não ser.

4.1.4 Função de onda não convergente

O caso (d) não representa uma função de densidade de probabilidade, e portanto é descartada. Para se evitar este caso, deve-se exigir que a seguinte condição seja satisfeita

$$\left(\lim_{x \rightarrow -\infty} \Psi(x, t) = 0 \right) \wedge \left(\lim_{x \rightarrow +\infty} \Psi(x, t) = 0 \right)$$

Considere a seguinte combinação linear

$$\Psi(x, t) = \sum_{u=1}^n a_u \cdot \Psi_u(x, t)$$

Sendo que para todo valor de u (índice pertencente a \mathbb{N}^* para identificar cada uma das soluções), $\Psi_u(x, t)$ será uma solução da equação de Schrödinger

$$\begin{aligned}
(\forall u) \left(i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial \Psi_u(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi_u(x, t)}{\partial x^2} + E_P(x) \cdot \Psi_u(x, t) \right) \\
(\forall u) \left(i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial \Psi_u(x, t)}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi_u(x, t)}{\partial x^2} - E_P(x) \cdot \Psi_u(x, t) = 0 \right)
\end{aligned}$$

em que a última equação teve um rearranjo para facilitar a visualização da demonstração. Substituindo a combinação na equação de Schrödinger tem-se

$$\begin{aligned}
i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} \left[\sum_{u=1}^n a_u \cdot \Psi_u(x, t) \right] + \frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\sum_{u=1}^n a_u \cdot \Psi_u(x, t) \right] - E_P(x) \cdot \\
\cdot \sum_{u=1}^n a_u \cdot \Psi_u(x, t) = 0 \\
i \cdot \hbar \cdot \left[\sum_{u=1}^n a_u \cdot \frac{\partial \Psi_u(x, t)}{\partial t} \right] + \frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \left[\sum_{u=1}^n a_u \cdot \frac{\partial^2 \Psi_u(x, t)}{\partial x^2} \right] - E_P(x) \cdot \\
\cdot \sum_{u=1}^n a_u \cdot \Psi_u(x, t) = 0 \\
\sum_{u=1}^n a_u \cdot \left[i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial \Psi_u(x, t)}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi_u(x, t)}{\partial x^2} - E_P(x) \cdot \Psi_u(x, t) \right] = 0
\end{aligned}$$

Mas como da equação anterior tem-se a expressão dentro dos colchetes é igual a zero, então verifica-se a identidade, confirmando que a combinação linear das soluções também é uma solução.

Se as soluções $\Psi_u(x, t)$ forem ortonormais, ou seja

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_u^*(x, t) \cdot \Psi_v(x, t) dx = \delta_{u,v}$$

em que $\delta_{u,v}$ (função delta de Kronecker) é definido por

$$\delta_{u,v} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} 1, & u = v \\ 0, & u \neq v \end{cases}$$

então

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} \|\Psi(x, t)\|^2 dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\sum_{u=1}^n a_u \cdot \Psi_u(x, t) \right]^* \cdot \left[\sum_{v=1}^n a_v \cdot \Psi_v(x, t) \right] dx = \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{u=1}^n \sum_{v=1}^n a_u^* \cdot a_v \cdot \Psi_u^*(x, t) \cdot \Psi_v(x, t) dx = \\
&= \sum_{u=1}^n \sum_{v=1}^n \left[a_u^* \cdot a_v \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_u^*(x, t) \cdot \Psi_v(x, t) dx \right] = \sum_{u=1}^n \sum_{v=1}^n a_u^* \cdot a_v \cdot \delta_{u,v}
\end{aligned}$$

Mas como $\delta_{u,v}$ tem valor igual a 0 quando $u \neq v$, então todos os termos do duplo somatório em que os valores de u sejam diferentes dos valores de v serão anulados, restando somente os termos em que os valores de u e v coincidam

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \|\Psi(x, t)\|^2 dx = \sum_{u=1}^n a_u^* \cdot a_u = \sum_{u=1}^n \|a_u\|^2$$

Mas como $\|\Psi(x, t)\|^2$ deve ser normalizado para ser interpretado como uma densidade de probabilidade, então

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \|\Psi(x, t)\|^2 dx = \sum_{u=1}^n \|a_u\|^2 = 1$$

Mas como $\|a_u\|^2$ é sempre maior ou igual a 0, e o somatório acima é igual a 1, tem-se

$$(\forall u)(0 \leq \|a_u\|^2 \leq 1)$$

Portanto, a interpretação dada para a combinação linear é de que representa uma probabilidade marginal de uma função mista de probabilidade

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_{\|\Psi\|^2}(u \in N) &= \mathcal{P}_{\|\Psi\|^2}(x \in \mathbb{R}, u \in N) = \int_{x \in \mathbb{R}} \left\| \sum_{u \in N} a_u \cdot \Psi_u(x, t) \right\|^2 dx = \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \left\| \sum_{u \in N} a_u \cdot \Psi_u(x, t) \right\|^2 dx = \sum_{u \in N} \|a_u\|^2
\end{aligned}$$

ou seja, quando as funções de onda $\Psi_u(x, t)$ são ortonormais para o intervalo $(-\infty; +\infty)$, então $\|\sum_{u \in N} a_u \cdot \Psi_u(x, t)\|^2$ será a função de probabilidade

marginal para os estados representados pelos valores de u pertencentes ao conjunto N . O conjunto N é um subconjunto do conjunto $\{u: (u \in \mathbb{N}^*) \wedge (u \leq n)\}$ que contém todos os valores possíveis de estados que a partícula pode assumir. Uma vez que u pertence ao conjunto enumerável N (e por isso é utilizado o operador somatório), $\mathcal{P}_{\|\Psi\|^2}(u \in N)$ será uma função de probabilidade (variável aleatória discreta). Os coeficientes $\|a_u\|^2$ representam a probabilidade de encontrar o sistema no estado representado pelo valor de u .

Os coeficientes a_u podem ser determinados a partir da função de onda do sistema $\Psi(x, t)$ e das funções de onda ortonormais $\Psi_u(x, t)$ das quais se deseja descrever o sistema $\Psi(x, t)$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_u^*(x, t) \cdot \Psi(x, t) dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_u^*(x, t) \cdot \left[\sum_{v=1}^n a_v \cdot \Psi_v(x, t) \right] dx = \\ &= \sum_{v=1}^n \left[a_v \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_u^*(x, t) \cdot \Psi_v(x, t) dx \right] = \sum_{v=1}^n a_v \cdot \delta_{u,v} = a_u \\ a_u &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_u^*(x, t) \cdot \Psi(x, t) dx \end{aligned}$$

A combinação linear pode ser feita levando em consideração um conjunto infinito não enumerável de soluções $\Psi_u^*(x, t)$ ortonormais entre si, formando uma base, sendo representado pelo

$$\Psi(x, t) = \sum_u a_u \cdot \Psi_u(x, t)$$

Os coeficientes a_u continuam sendo determinados pela fórmula acima encontrada.

A combinação linear pode ser representada também por uma integral quando se quer combinar um número não enumerável (ou, número contínuo) de soluções

$$\Psi(x, t) = \lim_{\Delta u \rightarrow 0} \sum_u \underbrace{b_u \cdot \Delta u}_{=a_u} \cdot \Psi_u(x, t) = \int_{u_1}^{u_2} b_u \cdot \Psi_u(x, t) du,$$

$$\Delta u = \frac{u_2 - u_1}{n}$$

Nesse caso b_u representará uma função densidade de probabilidade, uma vez que u pertence a \mathbb{R} . Como as soluções $\Psi_u(x, t)$ serão não convergentes

$$(\forall u \in \mathbb{R}) \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \|\Psi_u(x, t)\|^2 dx = +\infty \right)$$

Deve-se escolher a função densidade de probabilidade b_u de forma que o produto $b_u \cdot \Psi_u(x, t)$ seja convergente e, conseqüentemente, $\|b_u \cdot \Psi_u(x, t)\|^2$ também o seja.

Portanto a condição de ortonormalidade não será válida (pois o caso em que os índices são iguais requer que a integral resulte no valor 1), mas pode-se garantir que a integral do produto $\Psi_u^*(x, t) \cdot \Psi_v(x, t)$ continue a resultar em 0 quando $u \neq v$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_u^*(x, t) \cdot \Psi_v(x, t) dx = \delta(u - v)$$

em que $\delta(u - v)$ é a função delta, definida por

$$\delta(u - v) \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} +\infty, & u = v \\ 0, & u \neq v \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(u - v) du \stackrel{\text{def}}{=} 1$$

A função de probabilidade será definida por

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_{\|\Psi\|^2}(u \in N) &= \mathcal{P}_{\|\Psi\|^2}(x \in \mathbb{R}, u \in N) = \int_{x \in \mathbb{R}} \left\| \int_{u \in N} b_u \cdot \Psi_u(x, t) du \right\|^2 dx = \\
&= \int_{x \in \mathbb{R}} \left[\int_{u \in N} b_u \cdot \Psi_u(x, t) du \right]^* \cdot \left[\int_{v \in N} b_v \cdot \Psi_v(x, t) dv \right] dx = \\
&= \int_{x \in \mathbb{R}} \int_{u \in N} \int_{v \in N} b_u^* \cdot b_v \cdot \Psi_u^*(x, t) \cdot \Psi_v(x, t) dv du dx = \\
&= \int_{u \in N} \int_{v \in N} b_u^* \cdot b_v \cdot \int_{x \in \mathbb{R}} \Psi_u^*(x, t) \cdot \Psi_v(x, t) dx dv du = \\
&= \int_{u \in N} \int_{v \in N} b_u^* \cdot b_v \cdot \delta_{u,v} dv du = \int_{u \in N} b_u^* \cdot b_u du = \int_{u \in N} \|b_u\|^2 du
\end{aligned}$$

portanto $\|b_u\|^2$ é uma função densidade de probabilidade.

4.1.5 Função conjunta de probabilidade

Até o momento foi tratado a interpretação da função de onda $\Psi(x, t)$ como relacionada à probabilidade de se encontrar a partícula em um determinado espaço ($\mathcal{P}_{\|\Psi\|^2}(x \in R; t) = \int_{x \in R} \|\Psi(x, t)\|^2 dx$) e também foi tratado a interpretação dos coeficientes a_k da combinação linear de funções de onda ortogonais ($\Psi(x, t) = \sum_{k \in \bar{n}} a_k \cdot \Psi_k(x, t)$) como sendo a probabilidade de se encontrar um sistema em determinado estado ($\mathcal{P}_{\|\Psi\|^2}(k \in N) = \sum_{k \in N} \|a_k\|^2$). Agora suponha que sejam preparados 100 sistemas, e que a probabilidade de se encontrar o sistema no estado Ψ_1 é de 60%, e de se encontrar no estado Ψ_2 é de 40%. Uma vez feitas as medições, é de se esperar

que 60 sistemas estejam no estado Ψ_1 e 40 no estado Ψ_2 . Mas se agora for medido a probabilidade de encontrar uma partícula num determinado espaço nos 100 sistemas? Uma vez que já se sabe quais sistemas estão no estado Ψ_1 e quais estão em Ψ_2 , basta utilizar o quadrado do módulo para se obter a função densidade de probabilidade para o espaço, assim a probabilidade de se encontrar a partícula do sistema no estado Ψ_1 numa região R do espaço será dada por $\mathcal{P}_{\|\Psi_1\|^2}(x \in R) = \int_{x \in R} \|\Psi_1(x, t)\|^2 dx$ e para o sistema no estado Ψ_2 será dada por $\mathcal{P}_{\|\Psi_2\|^2}(x \in R) = \int_{x \in R} \|\Psi_2(x, t)\|^2 dx$. Suponha que a probabilidade de se encontrar a partícula na região R é de 30% nos sistemas no estado Ψ_1 e de 80% nos sistemas no estado Ψ_2 . Portanto é de se esperar que se encontre a partícula em 18 dos 60 sistemas no estado Ψ_1 e em 32 dos 40 sistemas no estado Ψ_2 .

Para encontrar a função conjunta de probabilidade que permita calcular a probabilidade de uma partícula estar numa região R do espaço e possua algum dos estados representados pelos valores pertencentes ao conjunto N . A probabilidade de uma partícula no estado caracterizado pelo valor de $u = v$ estar numa região R do espaço num determinado momento, é dada por

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{\|\Psi\|^2}(x \in R | u \in \{v\}; t) &= \frac{\mathcal{P}_{\|\Psi\|^2}(x \in R, u \in \{v\}; t)}{\mathcal{P}_{\|\Psi\|^2}(u \in \{v\})} = \\ &= \frac{1}{\|a_v\|^2} \cdot \int_{x \in R} \left\| \sum_{u \in \{v\}} a_u \cdot \Psi_u(x, t) \right\|^2 dx \end{aligned}$$

desde que

$$(\forall v)(\|a_v\|^2 \neq 0)$$

Nesse caso não haverá problemas com a ortonormalidade das funções de onda no conjunto de valores R , pois o somatório interno se reduzirá a somente um termo

$$\sum_{u \in \{v\}} a_u \cdot \Psi_u(x, t) = a_v \cdot \Psi_v(x, t)$$

portanto não haverá combinações entre funções de ondas $\Psi_u(x, t)$ com diferentes valores de u , é como se o sistema tivesse sido medido e fosse encontrado no estado caracterizado pelo valor de u , ou seja, o cálculo da probabilidade será baseada em uma função de probabilidade condicional, assim

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{\|\Psi\|^2}(x \in R | u \in \{v\}; t) &= \frac{1}{\|a_v\|^2} \cdot \int_{x \in R} \|a_v\|^2 \cdot \|\Psi_v(x, t)\|^2 dx = \\ &= \int_{x \in R} \|\Psi_v(x, t)\|^2 dx \end{aligned}$$

Reescrevendo a fórmula da probabilidade condicional tem-se

$$\mathcal{P}_{\|\Psi\|^2}(x \in R, u \in \{v\}; t) = \mathcal{P}_{\|\Psi\|^2}(u \in \{v\}) \cdot \mathcal{P}_{\|\Psi\|^2}(x \in R | u \in \{v\}; t)$$

pelo teorema da probabilidade total, tem-se

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{\|\Psi\|^2}(x \in R, u \in N; t) &= \sum_{v \in N} \mathcal{P}_{\|\Psi\|^2}(u \in \{v\}) \cdot \mathcal{P}_{\|\Psi\|^2}(x \in R | u \in \{v\}; t) = \\ &= \sum_{v \in N} \left[\|a_v\|^2 \cdot \int_{x \in R} \|\Psi_v(x, t)\|^2 dx \right] \end{aligned}$$

Tem-se assim a fórmula para a função conjunta para a variável aleatória posição x e a variável aleatória u que determina em que estado está o sistema.

4.1.6 Variável aleatória momento linear

Até o momento foi tratado a função densidade de probabilidade cuja variável aleatória é a coordenada de posição x , mas através da transformação de Fourier, é possível obter a função densidade de probabilidade cuja variável aleatória é o momento linear p , reescrevendo a função de onda $\Psi(x, t)$ como uma soma de funções de onda $\Psi_K(x, t) = A_K \cdot e^{i \cdot (K \cdot x - \omega \cdot t)}$ para todos os valores

de K pertencentes ao conjunto dos números reais. Portanto a função de onda pode ser reescrita por

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} A_K \cdot e^{i \cdot (K \cdot x - \omega \cdot t)} dK \quad (9)$$

em que K é dado por

$$K = \frac{2 \cdot \pi}{\lambda}$$

sendo λ o comprimento de onda, portanto A_K é uma amplitude de onda associada para cada comprimento de onda. Pela relação de De Broglie, tem-se

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

portanto

$$p = \frac{h}{2 \cdot \pi} \cdot K = \hbar \cdot K$$

Lembrando que a função de onda é dada por

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

e portanto a função densidade de probabilidade é dada por

$$\|\Psi(x, t)\|^2 = \psi^*(x) \cdot e^{\frac{i \cdot E \cdot t}{\hbar}} \cdot \psi(x) \cdot e^{-\frac{i \cdot E \cdot t}{\hbar}} = \|\psi(x)\|^2$$

ou seja, a função densidade de probabilidade não depende de t (como parâmetro)

$$\rho_X(x) = \|\psi(x)\|^2$$

e para $t = 0$, tem-se

$$\Psi(x, 0) = \psi(x) \cdot \underbrace{e^{-\frac{i \cdot E \cdot 0}{\hbar}}}_{=1} = \psi(x)$$

Substituindo $t = 0$ na equação (9), tem-se

$$\begin{aligned} \psi(x) = \Psi(x, 0) &= \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} A_K \cdot e^{i \cdot (K \cdot x - \omega \cdot 0)} dK = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} A_K \cdot e^{i \cdot K \cdot x} dK \end{aligned}$$

Realizando a substituição de variáveis

$$p = \hbar \cdot K \Rightarrow \begin{cases} K = \frac{p}{\hbar} \\ dp = \hbar \cdot dK \Leftrightarrow dK = \frac{dp}{\hbar} \\ K \rightarrow +\infty \Leftrightarrow p \rightarrow +\infty \\ K \rightarrow -\infty \Leftrightarrow p \rightarrow -\infty \end{cases}$$

portanto

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} A_K \cdot e^{i \cdot K \cdot x} dK = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} A_K \cdot e^{i \cdot \frac{p \cdot x}{\hbar}} \cdot \frac{dp}{\hbar}$$

De acordo com a transformação de Fourier, a amplitude A_K é dada por

$$A_K = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \cdot e^{-i \cdot K \cdot x} dx = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \cdot e^{-i \cdot \frac{p \cdot x}{\hbar}} dx$$

ou seja

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x') \cdot e^{-i \cdot \frac{p \cdot x'}{\hbar}} dx' \right] \cdot e^{i \cdot \frac{p \cdot x}{\hbar}} \cdot \frac{dp}{\hbar} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi \cdot \hbar}} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{\left[\frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi \cdot \hbar}} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x') \cdot e^{-i \cdot \frac{p \cdot x'}{\hbar}} dx' \right]}_{=A'_p} \cdot e^{i \cdot \frac{p \cdot x}{\hbar}} dp \end{aligned}$$

em que a expressão entre colchetes é considerada pela transformação de Fourier

como sendo a amplitude A'_p da função de onda $e^{i \cdot \frac{p \cdot x}{\hbar}} = \cos\left(\frac{p \cdot x}{\hbar}\right) + i \cdot \text{sen}\left(\frac{p \cdot x}{\hbar}\right)$,

e portanto para a Mecânica Quântica $\|A'_p\|^2$ é a probabilidade de se encontrar a

partícula no estado definido por tal função de onda. Como A'_p é uma função

dependente de p somente (uma vez que a integração é em x' , portanto “elimina”

a variação por x'), tem-se que $\|A'_p\|^2$ é uma função densidade de probabilidade

para o momento linear, assim, A'_p passará a ser denominada pela função de onda

$\varphi(p)$

$$\varphi(p) = A'_p = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi \cdot \hbar}} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x') \cdot e^{-i \cdot \frac{p \cdot x'}{\hbar}} dx'$$

A função de onda dependente do tempo é dada por

$$\Phi(p, t) = \varphi(p) \cdot e^{-\frac{i \cdot E \cdot t}{\hbar}}$$

A função densidade de probabilidade para o momento linear será dada por

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{\|\varphi\|^2}(p) &= \|\varphi(p)\|^2 = \varphi^*(p) \cdot \varphi(p) = \\ &= \left[\frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi \cdot \hbar}} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x') \cdot e^{-i \frac{p \cdot x'}{\hbar}} dx' \right]^* \cdot \\ &\cdot \left[\frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi \cdot \hbar}} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x'') \cdot e^{-i \frac{p \cdot x''}{\hbar}} dx'' \right] = \\ &= \frac{1}{2 \cdot \pi \cdot \hbar} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x') \cdot e^{i \frac{p \cdot x'}{\hbar}} dx' \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x'') \cdot e^{-i \frac{p \cdot x''}{\hbar}} dx'' \end{aligned}$$

A função de probabilidade será dada por

$$\mathcal{P}_{\|\varphi\|^2}(p \in R') = \int_{p \in R'} \|\varphi(p)\|^2 dp$$

cujo espaço amostral é

$$\Omega = \{w: w \text{ é o momento linear } p \text{ que a partícula pode assumir}\}$$

e variável aleatória definida por

$$\vec{P}: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$$

O momento linear pode assumir tanto valores positivos como negativos. O momento linear p é definido por $m \cdot v$, como a massa m só assume valores positivos, então é a velocidade v que assumirá valores positivos e negativos. A interpretação para valores negativos de v é o mesmo dado na Física Clássica, ou seja, a partícula está viajando no sentido contrário (no caso unidimensional, positivo é definido por viajar para a direita e negativo é viajar para a esquerda, por exemplo).

Note que a variável aleatória momento linear p é obtida através de uma ‘derivada com relação ao tempo (um operador), portanto não se pode utilizar a

técnica de transformação de variáveis aleatórias, pois esta consiste em funções de variáveis aleatórias, e não de operadores.

4.1.7 Valor esperado da posição

O valor esperado da quantidade posição $\vec{r} = x$ (caso unidimensional), é dado por

$$\langle x \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{E}_{\|\Psi\|^2}(x; t) = \int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot \|\Psi(x, t)\|^2 dx$$

em que a variável posição x é a variável aleatória e a variável tempo t é tratada como parâmetro. Portanto o valor esperado da posição x será uma função do tempo t .

4.1.8 Momento linear

A quantidade momento linear é definida na mecânica clássica por $\vec{p} = m \cdot \vec{v}$. Na mecânica quântica será

$$\langle p \rangle \stackrel{\text{def}}{=} m \cdot \langle v \rangle$$

e a partir do valor esperado da quantidade posição x , define-se o valor esperado da velocidade por

$$\langle v \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{d}{dt} \mathcal{E}_{\|\Psi\|^2}(x; t)$$

portanto, o que se define por valor esperado da velocidade é na realidade a derivada do valor esperado da posição $\mathcal{E}_{\|\Psi\|^2}(x; t)$ em relação ao tempo t . Pelo fato de que a densidade de probabilidade $\|\Psi(x, t)\|^2$ é função de duas variáveis independentes (x e t), não faz sentido calcular a derivada $\frac{dx}{dt}$, pois é nula, portanto

$$\mathcal{E}_{\|\Psi\|^2} \left(\frac{dx}{dt}; t \right) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{\frac{dt}{\equiv 0}} \cdot \|\Psi(x, t)\|^2 dx \equiv 0$$

Também não faz sentido o valor esperado de um operador, pois operadores não assumem valores.

Continuando os cálculos, tem-se

$$\langle v \rangle = \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot \|\Psi(x, t)\|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot \frac{\partial}{\partial t} \|\Psi(x, t)\|^2 dx$$

Como calculado anteriormente (na seção **Independência do Tempo para a Probabilidade de Ω**)

$$\frac{\partial}{\partial t} \|\Psi(x, t)\|^2 = \frac{i \cdot \hbar}{2 \cdot m} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[\Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \Psi(x, t) \right]$$

Substituindo na definição de momento, tem-se

$$\begin{aligned} \langle v \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot \frac{i \cdot \hbar}{2 \cdot m} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[\Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \Psi(x, t) \right] dx = \\ &= \frac{i \cdot \hbar}{2 \cdot m} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[\Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \Psi(x, t) \right] dx \end{aligned}$$

Realizando a técnica de integração por partes $\int u \cdot dv = u \cdot v - \int v \cdot du$ e denominando u e dv por

$$u = x$$

$$dv = \frac{\partial}{\partial x} \left[\Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \Psi(x, t) \right] \cdot dx$$

então a diferencial du é obtida realizando-se a operação de derivação $\frac{du}{dx}$

$$\frac{du}{dx} = \frac{d}{dx}(x) = 1$$

$$du = dx$$

e a função v é obtida realizando-se a operação de integração $\int dv$

$$\int dv = \int \frac{\partial}{\partial x} \left[\Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \Psi(x, t) \right] dx$$

$$v = \Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \Psi(x, t)$$

Substituindo tem-se

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} u \, dv &= \\ &= \left[x \cdot \left[\Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \Psi(x, t) \right] \right]_{x \rightarrow -\infty}^{x \rightarrow +\infty} + \\ &- \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \Psi(x, t) \right] dx \end{aligned}$$

Calculando os limites tem-se

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \left\{ x \cdot \left[\Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \Psi(x, t) \right] \right\} = 0$$

Calculando a derivada $\frac{\partial}{\partial x} [\Psi^*(x, t) \cdot \Psi(x, t)]$, tem-se

$$\frac{\partial}{\partial x} [\Psi^*(x, t) \cdot \Psi(x, t)] = \Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} + \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \Psi(x, t)$$

Integrando com relação a x , tem-se

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial}{\partial x} [\Psi^*(x, t) \cdot \Psi(x, t)] dx &= \Psi^*(x, t) \cdot \Psi(x, t) \\ \int \frac{\partial}{\partial x} [\Psi^*(x, t) \cdot \Psi(x, t)] dx &= \\ &= \int \Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} dx + \int \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \Psi(x, t) dx \end{aligned}$$

portanto,

$$\begin{aligned} \int \Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} dx + \int \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \Psi(x, t) dx &= \Psi^*(x, t) \cdot \Psi(x, t) \\ \int \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \Psi(x, t) dx &= \Psi^*(x, t) \cdot \Psi(x, t) - \int \Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} dx \end{aligned}$$

Realizando a integração com limite inferior tendendo a $-\infty$ e limite superior tendendo a $+\infty$, tem-se

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \Psi(x, t) dx = \\
& = [\Psi^*(x, t) \cdot \Psi(x, t)]_{x \rightarrow -\infty}^{x \rightarrow +\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} dx \\
& [\Psi^*(x, t) \cdot \Psi(x, t)]_{x \rightarrow -\infty}^{x \rightarrow +\infty} = 0 \quad \because \quad \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \Psi(x, t) = 0
\end{aligned}$$

portanto,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \Psi(x, t) dx = - \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} dx$$

Substituindo os resultados na integral $\int_{-\infty}^{+\infty} u dv$, tem-se

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} u dv &= 0 - \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \Psi(x, t) \right] dx = \\
&= - \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} dx - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \cdot \Psi(x, t) dx \right] = \\
&= - \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} dx - \left[- \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} dx \right] \right\} = \\
&= -2 \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} dx
\end{aligned}$$

Portanto, o valor esperado da velocidade será

$$\begin{aligned}
\langle v \rangle &= \frac{i \cdot \hbar}{2 \cdot m} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} u dv = \frac{i \cdot \hbar}{2 \cdot m} \cdot \left[-2 \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} dx \right] = \\
&= \frac{-i \cdot \hbar}{m} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} dx
\end{aligned}$$

Usando da identidade $i^{-1} = -i$, tem-se

$$\langle v \rangle = \frac{\hbar}{i \cdot m} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} dx$$

Substituindo na definição de momento linear da mecânica quântica, tem-se

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= m \cdot \langle v \rangle = m \cdot \frac{\hbar}{i \cdot m} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} dx = \\ &= \frac{\hbar}{i} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \cdot \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} dx = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \cdot \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) dx \end{aligned}$$

Portanto, o valor esperado do momento linear é dado por

$$\langle p \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \cdot \underbrace{\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial}{\partial x}}_{=\hat{p}} \Psi(x, t) dx$$

Portanto para se obter o valor esperado do momento linear, basta colocar o operador $\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial}{\partial x}$ (denominado operador momento linear \hat{p}) entre as funções $\Psi^*(x, t)$ e $\Psi(x, t)$

$$\langle p \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \cdot \hat{p} \Psi(x, t) dx$$

ou se for obtido a função densidade de probabilidade do momento linear, então poder-se-á definir o valor esperado do momento linear p da forma como é feita na Estatística, ou seja

$$\langle p \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{E}_{\|\varphi\|^2}(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} p \cdot \|\varphi(p)\|^2 dp$$

4.2 O oscilador harmônico simples

O oscilador harmônico consiste em uma partícula de massa m executando um movimento unidimensional, estando sujeita a uma força elástica descrita pela *lei de Hooke*

$$F(t) = m \cdot \frac{d^2x(t)}{dt^2} = -k \cdot x(t), \quad k \in \mathbb{R}_+^*, \quad m \in \mathbb{R}_+^*$$

o sinal negativo na equação indica que a força $F(t)$ é contrária ao movimento, ou seja, se há um deslocamento da partícula para um sentido, então a força apontará para o sentido contrário. A solução é

$$x(t) = A \cdot \text{sen}(\omega \cdot t) + B \cdot \text{cos}(\omega \cdot t)$$

em que a frequência angular ω (quantidade que se refere à velocidade com que se completa um ciclo) é dada por

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

e as constantes A e B são dadas por

$$A = \frac{1}{\omega} \cdot \left[\frac{dx(t)}{dt} \right]_{t=0}, \quad B = x(0)$$

A energia potencial é dada por

$$E_p(x) = \frac{1}{2} \cdot k \cdot x^2$$

4.2.1 Distribuição de probabilidade do oscilador harmônico simples clássico

Considerando o oscilador harmônico simples dado pela mecânica clássica e adotando

$$A = \frac{1}{\omega} \cdot \left[\frac{dx(t)}{dt} \right]_{t=0} = 0, \quad B = x(0) = x_0 \neq 0$$

ou seja, partindo do repouso e de uma distância $|x_0|$ do ponto de equilíbrio, a equação do oscilador harmônico simples toma a forma

$$x(t) = x_0 \cdot \cos(\omega \cdot t) = x_0 \cdot \cos\left(\sqrt{\frac{k}{m}} \cdot t\right)$$

(o mesmo efeito da condição de repouso também pode ser obtida a partir de uma translação na variável tempo)

Agora suponha que este sistema estivesse num laboratório e dado início num determinado momento, e que houvesse um cronômetro que fora acionado nesse momento. Mas e se alguém entrar no laboratório e avistar o sistema, qual seria a probabilidade de encontra-lo numa posição x ? Nesse caso, o tempo se torna uma variável aleatória que transcorre de maneira contínua e linear. Como o sistema possui um movimento oscilatório, pode-se considerar somente um período, pois a probabilidade do sistema se apresentar na posição $x(t + T)$ - onde T é o período - deve ser a mesma que em $x(t)$, pois possuem a mesma configuração, mas se for considerado somente a posição, então pode-se considerar somente meio período, já que de uma posição $x(T - t)$ para uma subsequente, o sistema migra com uma velocidade de valor idêntico a $x(T + t)$, só que de sentido contrário, em outras palavras, o sistema permanece no intervalo compreendido por x e $x + dx$ a mesma quantidade de tempo quando passa do que quando volta.

Portanto considere o seguinte intervalo de tempo

$$-\frac{1}{2} \cdot \pi \leq t \leq \frac{1}{2} \cdot \pi$$

essas considerações sobre o intervalo a ser adotado é para que a função $x(t)$ seja bijetiva, atendendo a exigência para que se possa aplicar a técnica da transformação de variáveis aleatórias.

Uma vez adotado o intervalo de tempo adequado, agora passa-se a consideração de que o tempo transcorre de maneira contínua e uniforme, levando então a conclusão que a função densidade probabilidade que se amolda no problema de alguém entrar no laboratório e avistar o sistema num determinado tempo é a distribuição uniforme, ou seja

$$\begin{aligned} f(t) = f_{Uni}\left(t; -\frac{1}{2} \cdot \pi, \frac{1}{2} \cdot \pi\right) &\Leftrightarrow f(u) = \frac{1}{\frac{1}{2} \cdot \pi - \left(-\frac{1}{2} \cdot \pi\right)} \cdot \mathcal{J}_{\left[-\frac{\pi}{2}; \frac{\pi}{2}\right]}(u) = \\ &= \frac{1}{\pi} \cdot \mathcal{J}_{\left[-\frac{\pi}{2}; \frac{\pi}{2}\right]}(u) \end{aligned}$$

em que $f_{Uni}(t; a, b)$ é a função densidade de probabilidade uniforme com parâmetros a e b .

Obtendo-se a função inversa $x^{(-1)}(t) = t(x)$, tem-se

$$x(t) = x_0 \cdot \cos\left(\sqrt{\frac{k}{m}} \cdot t\right) \Leftrightarrow t(x) = \sqrt{\frac{m}{k}} \cdot \arccos\left(\frac{x}{x_0}\right)$$

Derivando-se a função inversa $t(x)$ tem-se

$$\frac{dt(x)}{dx} = \sqrt{\frac{m}{k}} \cdot \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{x^2}{x_0^2}}} \cdot \frac{1}{x_0}$$

Utilizando-se da técnica da transformação de variáveis aleatórias, tem-se

$$f_x(u) = \sqrt{\frac{m}{k}} \cdot \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{x_0^2}}} \cdot \frac{1}{x_0} \cdot \frac{1}{\pi} \cdot \mathcal{J}_{[-x_0; x_0]}(u)$$

cujo gráfico é dado a seguir

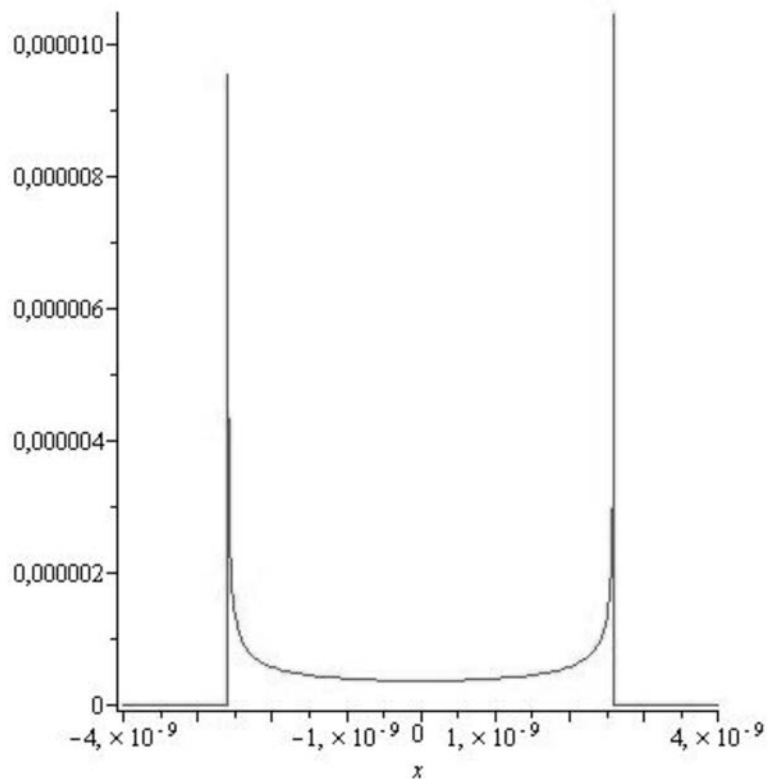


Gráfico 1 Densidade de probabilidade para o oscilador harmônico simples clássico

4.2.2 Solução do oscilador harmônico simples quântico pelo método algébrico

Na literatura encontram-se duas abordagens para se resolver o oscilador harmônico simples quântico. Uma utiliza-se das séries de potências para resolver a equação diferencial. A outra abordagem utiliza-se de uma engenhosa técnica algébrica, usando os operadores de criação e aniquilação. A abordagem que será adota será a técnica algébrica.

Escrevendo a equação de Schrödinger para o oscilador

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

ou, de outra forma

$$\frac{1}{2 \cdot m} \cdot \left[\left(\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{d}{dx} \right)^2 + (m \cdot \omega \cdot x)^2 \right] \psi(x) = E \cdot \psi(x)$$

A ideia concentra-se em reescrever o termo dentro dos colchetes partindo da ideia da seguinte equação para números complexos

$$\begin{aligned} (u + i \cdot v) \cdot (u - i \cdot v) &= u^2 - i \cdot u \cdot v + i \cdot v \cdot u - i^2 \cdot v^2 = \\ &= u^2 + v^2 + i \cdot (v \cdot u - u \cdot v) \end{aligned}$$

mas como u e v são números, então eles comutam

$$u \cdot v = v \cdot u$$

assim chega-se a

$$(u + i \cdot v) \cdot (u - i \cdot v) = u^2 + v^2$$

Porém deve-se lembrar que dentro dos colchetes há o operador d/dx , e operadores geralmente não comutam, como é este caso. Entretanto esse fato não é um impedimento para se poder utilizar a idéia, começando por definir os seguintes operadores

$$\begin{aligned} \hat{a}_- &= \frac{1}{\sqrt{2 \cdot m}} \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{d}{dx} - i \cdot m \cdot \omega \cdot x \right), \\ \hat{a}_+ &= \frac{1}{\sqrt{2 \cdot m}} \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{d}{dx} + i \cdot m \cdot \omega \cdot x \right) \end{aligned}$$

Aplicando o produto $\hat{a}_- \hat{a}_+$ sobre uma função, tem-se

$$\begin{aligned}
(\hat{a}_- \hat{a}_+) f(x) &= \\
&= \frac{1}{\sqrt{2 \cdot m}} \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{d}{dx} - i \cdot m \cdot \omega \cdot x \right) \cdot \frac{1}{\sqrt{2 \cdot m}} \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{d}{dx} + i \cdot m \cdot \omega \cdot x \right) f(x) = \\
&= \frac{1}{2 \cdot m} \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{d}{dx} - i \cdot m \cdot \omega \cdot x \right) \cdot \left[\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{df(x)}{dx} + i \cdot m \cdot \omega \cdot x \cdot f(x) \right] = \\
&= \frac{1}{2 \cdot m} \cdot \\
&\cdot \left\{ \frac{\hbar^2}{i^2} \cdot \frac{d^2 f(x)}{dx^2} + \hbar \cdot m \cdot \omega \cdot \left[\frac{dx}{dx} \cdot f(x) + x \cdot \frac{df(x)}{dx} \right] - \hbar \cdot m \cdot \omega \cdot x \cdot \right. \\
&\cdot \left. \frac{df(x)}{dx} + m^2 \cdot \omega^2 \cdot x^2 \cdot f(x) \right\} = \\
&= \frac{1}{2 \cdot m} \cdot \left\{ \frac{\hbar^2}{i^2} \cdot \frac{d^2 f(x)}{dx^2} + \hbar \cdot m \cdot \omega \cdot f(x) + m^2 \cdot \omega^2 \cdot x^2 \cdot f(x) \right\} = \\
&= \frac{1}{2 \cdot m} \cdot \left(\frac{\hbar^2}{i^2} \cdot \frac{d^2}{dx^2} + \hbar \cdot m \cdot \omega + m^2 \cdot \omega^2 \cdot x^2 \right) f(x)
\end{aligned}$$

descartando a função de teste, usada para achar o produto $\hat{a}_- \hat{a}_+$, tem-se

$$\begin{aligned}
\hat{a}_- \hat{a}_+ &= \frac{1}{2 \cdot m} \cdot \left(\frac{\hbar^2}{i^2} \cdot \frac{d^2}{dx^2} + \hbar \cdot m \cdot \omega + m^2 \cdot \omega^2 \cdot x^2 \right) = \\
&= \frac{1}{2 \cdot m} \cdot \left(\frac{\hbar^2}{i^2} \cdot \frac{d^2}{dx^2} + m^2 \cdot \omega^2 \cdot x^2 \right) + \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega
\end{aligned}$$

Comparando a equação de Schrödinger para o oscilador

$$\frac{1}{2 \cdot m} \cdot \left[\left(\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{d}{dx} \right)^2 + (m \cdot \omega \cdot x)^2 \right] \psi(x) = E \cdot \psi(x)$$

com a equação do produto $\hat{a}_- \hat{a}_+$

$$\hat{a}_- \hat{a}_+ = \frac{1}{2 \cdot m} \cdot \left[\left(\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{d}{dx} \right)^2 + (m \cdot \omega \cdot x)^2 \right] + \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega$$

verifica-se que só diferem por um fator $\frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega$. Reescrevendo a equação para o oscilador harmônico

$$\left(\hat{a}_- \hat{a}_+ - \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega\right) \psi(x) = E \cdot \psi(x)$$

Alterando a ordem dos fatores \hat{a}_+ e \hat{a}_- , e aplicando numa função $f(x)$, tem-se

$$\begin{aligned} (\hat{a}_+ \hat{a}_-) f(x) &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{2 \cdot m}} \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{d}{dx} + i \cdot m \cdot \omega \cdot x \right) \cdot \frac{1}{\sqrt{2 \cdot m}} \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{d}{dx} - i \cdot m \cdot \omega \cdot x \right) f(x) = \\ &= \frac{1}{2 \cdot m} \cdot \left(\frac{\hbar^2}{i^2} \cdot \frac{d^2}{dx^2} - \hbar \cdot m \cdot \omega + m^2 \cdot \omega^2 \cdot x^2 \right) f(x) \end{aligned}$$

descartando a função de teste, usada para achar o produto $\hat{a}_+ \hat{a}_-$, tem-se

$$\begin{aligned} \hat{a}_+ \hat{a}_- &= \frac{1}{2 \cdot m} \cdot \left(\frac{\hbar^2}{i^2} \cdot \frac{d^2}{dx^2} - \hbar \cdot m \cdot \omega + m^2 \cdot \omega^2 \cdot x^2 \right) = \\ &= \frac{1}{2 \cdot m} \cdot \left[\left(\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{d}{dx} \right)^2 + (m \cdot \omega \cdot x)^2 \right] - \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \end{aligned}$$

e assim, também pode-se escrever da seguinte forma a equação de Schrödinger para o oscilador harmônico

$$\left(\hat{a}_+ \hat{a}_- + \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega\right) \psi(x) = E \cdot \psi(x)$$

Aplicando o comutador sobre os operadores \hat{a}_- e \hat{a}_+ , tem-se

$$\begin{aligned} [\hat{a}_-, \hat{a}_+]_- &= \hat{a}_- \hat{a}_+ - \hat{a}_+ \hat{a}_- = \\ &= \left\{ \frac{1}{2 \cdot m} \cdot \left[\left(\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{d}{dx} \right)^2 + (m \cdot \omega \cdot x)^2 \right] + \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \right\} + \\ &- \left\{ \frac{1}{2 \cdot m} \cdot \left[\left(\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{d}{dx} \right)^2 + (m \cdot \omega \cdot x)^2 \right] - \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \right\} = \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega + \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega = \\ &= \hbar \cdot \omega \end{aligned}$$

Agora, mostra-se que se $\psi(x)$ satisfaz a equação de Schrödinger com energia E , então pode-se afirmar que $\hat{a}_+ \psi(x)$ também a satisfaz, mas com energia $(E + \hbar \cdot \omega)$, ou seja

$$\begin{aligned}
\left(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega\right) [\hat{a}_+\psi(x)] &= \hat{a}_+\hat{a}_-\hat{a}_+\psi(x) + \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \cdot \hat{a}_+\psi(x) = \\
&= \left(\hat{a}_+\hat{a}_-\hat{a}_+ + \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \cdot \hat{a}_+\right) \psi(x) = \hat{a}_+\left(\hat{a}_-\hat{a}_+ + \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega\right) \psi(x) = \\
&= \hat{a}_+\left[\hat{a}_-\hat{a}_+\psi(x) + \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \cdot \psi(x)\right] = \\
&= \hat{a}_+\left[\hat{a}_-\hat{a}_+\psi(x) - \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \cdot \psi(x) + \frac{2}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \cdot \psi(x)\right] = \\
&= \hat{a}_+\left[\left(\hat{a}_-\hat{a}_+ - \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega\right) \psi(x) + \hbar \cdot \omega \cdot \psi(x)\right] = \\
&= \hat{a}_+[E \cdot \psi(x) + \hbar \cdot \omega \cdot \psi(x)] = E \cdot \hat{a}_+\psi(x) + \hbar \cdot \omega \cdot \hat{a}_+\psi(x) = \\
&= (E + \hbar \cdot \omega) \cdot \hat{a}_+\psi(x)
\end{aligned}$$

Da mesma forma, se $\psi(x)$ satisfaz a equação de Schrödinger com energia E , então pode-se afirmar que $\hat{a}_-\psi(x)$ também a satisfaz, mas com energia $(E - \hbar \cdot \omega)$, ou seja,

$$\begin{aligned}
\left(\hat{a}_-\hat{a}_+ - \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega\right) \hat{a}_-\psi(x) &= \hat{a}_-\left(\hat{a}_+\hat{a}_- - \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega\right) \psi(x) = \\
&= \hat{a}_-\left[\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \cdot \psi(x) - \hbar \cdot \omega \cdot \psi(x)\right] = \\
&= \hat{a}_-\left[\left(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega\right) \psi(x) - \hbar \cdot \omega \cdot \psi(x)\right] = \\
&= \hat{a}_-[E \cdot \psi(x) - \hbar \cdot \omega \cdot \psi(x)] = E \cdot \hat{a}_-\psi(x) - \hbar \cdot \omega \cdot \hat{a}_-\psi(x) = \\
&= (E - \hbar \cdot \omega) \hat{a}_-\psi(x)
\end{aligned}$$

Aplicando novamente o método, pode-se afirmar que $\hat{a}_+\hat{a}_+\psi(x)$ também satisfaz a equação de Schrödinger, mas com energia $(E + 2 \cdot \hbar \cdot \omega)$, ou seja

$$\begin{aligned}
& \left(\hat{a}_+ \hat{a}_- + \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \right) \hat{a}_+ \hat{a}_+ \psi(x) = \left(\hat{a}_+ \hat{a}_- \hat{a}_+ + \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \cdot \hat{a}_+ \right) \hat{a}_+ \psi(x) = \\
& = \hat{a}_+ \left(\hat{a}_- \hat{a}_+ + \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \right) \hat{a}_+ \psi(x) = \\
& = \hat{a}_+ \left[\left(\hat{a}_- \hat{a}_+ - \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \right) \hat{a}_+ \psi(x) + \hbar \cdot \omega \cdot \hat{a}_+ \psi(x) \right] = \\
& = \hat{a}_+ \left[\left(\hat{a}_+ \hat{a}_- + \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \right) \hat{a}_+ \psi(x) + \hbar \cdot \omega \cdot \hat{a}_+ \psi(x) \right] = \\
& = \hat{a}_+ \left[\left(\hat{a}_+ \hat{a}_- \hat{a}_+ + \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \cdot \hat{a}_+ \right) \psi(x) + \hbar \cdot \omega \cdot \hat{a}_+ \psi(x) \right] = \\
& = \hat{a}_+ \left\{ \hat{a}_+ \left[\left(\hat{a}_- \hat{a}_+ + \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \cdot \right) \psi(x) + \hbar \cdot \omega \cdot \psi(x) \right] \right\} = \\
& = \hat{a}_+ \hat{a}_+ \left\{ \left[\left(\hat{a}_- \hat{a}_+ - \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \cdot \right) \psi(x) + \hbar \cdot \omega \cdot \psi(x) \right] + \hbar \cdot \omega \cdot \psi(x) \right\} = \\
& = \hat{a}_+ \hat{a}_+ \{ [E \cdot \psi(x) + \hbar \cdot \omega \cdot \psi(x)] + \hbar \cdot \omega \cdot \psi(x) \} = \\
& = \hat{a}_+ \hat{a}_+ [E \cdot \psi(x) + 2 \cdot \hbar \cdot \omega \cdot \psi(x)] = (E + 2 \cdot \hbar \cdot \omega) \cdot \hat{a}_+ \hat{a}_+ \psi(x)
\end{aligned}$$

Da mesma forma, pode-se afirmar que $\hat{a}_- \hat{a}_- \psi(x)$ também a satisfaz, mas com energia $(E - 2 \cdot \hbar \cdot \omega)$, ou seja

$$\begin{aligned}
& \left(\hat{a}_- \hat{a}_+ - \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \right) \hat{a}_- \hat{a}_- \psi(x) = \left(\hat{a}_- \hat{a}_+ \hat{a}_- - \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \cdot \hat{a}_- \right) \hat{a}_- \psi(x) = \\
& = \hat{a}_- \left(\hat{a}_+ \hat{a}_- - \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \right) \hat{a}_- \psi(x) = \\
& = \hat{a}_- \left[\left(\hat{a}_+ \hat{a}_- + \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \right) \hat{a}_- \psi(x) - \hbar \cdot \omega \cdot \hat{a}_- \psi(x) \right] = \\
& = \hat{a}_- \left[\left(\hat{a}_- \hat{a}_+ - \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \right) \hat{a}_- \psi(x) - \hbar \cdot \omega \cdot \hat{a}_- \psi(x) \right] = \\
& = \hat{a}_- \left[\left(\hat{a}_- \hat{a}_+ \hat{a}_- - \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \cdot \hat{a}_- \right) \psi(x) - \hbar \cdot \omega \cdot \hat{a}_- \psi(x) \right] = \\
& = \hat{a}_- \left\{ \left[\left(\hat{a}_+ \hat{a}_- - \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \right) \psi(x) - \hbar \cdot \omega \cdot \psi(x) \right] \right\} = \\
& = \hat{a}_- \hat{a}_- \left\{ \left[\left(\hat{a}_+ \hat{a}_- + \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \right) \psi(x) - \hbar \cdot \omega \cdot \psi(x) \right] - \hbar \cdot \omega \cdot \psi(x) \right\} = \\
& = \hat{a}_- \hat{a}_- \{ [E \cdot \psi(x) - \hbar \cdot \omega \cdot \psi(x)] - \hbar \cdot \omega \cdot \psi(x) \} = \\
& = \hat{a}_- \hat{a}_- [E \cdot \psi(x) - 2 \cdot \hbar \cdot \omega \cdot \psi(x)] = (E - 2 \cdot \hbar \cdot \omega) \cdot \hat{a}_- \hat{a}_- \psi(x)
\end{aligned}$$

O operador \hat{a}_+ chama-se operador de criação, pois ele cria um quantum de energia (quantidade discreta de energia) a cada vez que é aplicado. E o operador \hat{a}_- chama-se operador de aniquilação, pois ele aniquila um quantum de energia a cada vez que é aplicado.

Aplicando o operador de aniquilação, recursivamente, chega-se a situação em que a energia começa a se tornar negativa a partir de um ponto, o que não pode existir, e neste momento o mecanismo falha. Assim tem-se um nível que é o mais baixo chamado por $\psi_0(x)$, onde

$$\hat{a}_- \psi_0(x) = 0$$

isto significa que

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\sqrt{2 \cdot m}} \cdot \left[\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{d\psi_0(x)}{dx} - i \cdot m \cdot \omega \cdot x \cdot \psi_0(x) \right] = 0 \\
& \frac{d\psi_0(x)}{dx} = -\frac{m \cdot \omega}{\hbar} \cdot x \cdot \psi_0(x) \Leftrightarrow \frac{d\psi_0(x)}{\psi_0(x)} = -\frac{m \cdot \omega}{\hbar} \cdot x \cdot dx
\end{aligned}$$

$$\int \frac{d\psi_0(x)}{\psi_0(x)} = - \int \frac{m \cdot \omega}{\hbar} \cdot x \cdot dx \Leftrightarrow \ln(\psi_0(x)) = - \frac{m \cdot \omega}{2 \cdot \hbar} \cdot x^2 + C$$

$$\psi_0(x) = A_0 \cdot e^{-\frac{m \cdot \omega \cdot x^2}{2 \cdot \hbar}}$$

Determinando o valor da energia para esse estado tem-se

$$\left(\hat{a}_+ \hat{a}_- + \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \right) \psi_0(x) = E_0 \cdot \psi_0(x)$$

$$\hat{a}_+ \underbrace{\hat{a}_- \psi_0(x)}_{=0} + \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \cdot \psi_0(x) = E_0 \cdot \psi_0(x)$$

$$\frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega \cdot \psi_0(x) = E_0 \cdot \psi_0(x)$$

$$E_0 = \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot \omega$$

Agora simplesmente aplica-se o operador de criação para se encontrar os estados excitados

$$\psi_n(x) = A_n \cdot (\hat{a}_+)^n e^{-\frac{m \cdot \omega \cdot x^2}{2 \cdot \hbar}}, \quad E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \cdot \hbar \cdot \omega,$$

$$A_n = \left(\frac{m \cdot \omega}{\pi \cdot \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \cdot \frac{(-1)^n}{\sqrt{n! (\hbar \cdot \omega)^n}}$$

ou de outra forma

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m \cdot \omega}{\pi \cdot \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2^n \cdot n!}} \cdot \mathfrak{P}_{Her.}(\xi; n) \cdot e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad \xi = \sqrt{\frac{m \cdot \omega}{\hbar}} \cdot x,$$

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

em que $\mathfrak{P}_{Her.}(\xi; n)$ é o polinômio de Hermite, dado por

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathfrak{P}_{Her.}(\xi; 0) = 1 \\ \mathfrak{P}_{Her.}(\xi; n) = (-1)^n \cdot e^{\xi^2} \cdot \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2}) \end{array} \right.$$

e função densidade de probabilidade condicional dada por

$$\mathfrak{P}_{\|\psi\|^2}(x|n) = \|\psi_n(x)\|^2$$

Para o estado com $n = 0$, tem-se

$$\mathcal{f}_{\|\psi\|^2}(x|n=0) = \|\psi_1(x)\|^2 = \sqrt{\frac{m \cdot \omega}{\pi \cdot \hbar}} \cdot 1 \cdot e^{-\frac{m \cdot \omega}{\hbar} \cdot x^2} = \frac{e^{-\frac{1}{2} \cdot \frac{x^2}{\frac{\hbar}{2 \cdot m \cdot \omega}}}}{\sqrt{2 \cdot \pi} \cdot \sqrt{\frac{\hbar}{2 \cdot m \cdot \omega}}}$$

ou seja

$$\mathcal{f}_{\|\psi\|^2}(x|n=1) = \mathcal{f}_{\text{Norm.}}\left(x; 0, \frac{\hbar}{2 \cdot m \cdot \omega}\right) = \mathcal{f}_{\text{Norm.}}\left(x; 0, \frac{\hbar}{2 \cdot \sqrt{m \cdot k}}\right)$$

em que $\mathcal{f}_{\text{Norm.}}(x; \mu, \sigma^2)$ é a função densidade de probabilidade normal, com média μ e variância σ^2 . Como foi visto, através da distribuição normal observa-se o valor mínimo para o princípio da incerteza entre as quantidades posição e momento. Obtendo-se a função densidade de probabilidade da quantidade momento linear (através da transformação de Fourier, como foi visto anteriormente), pode-se comparar o comportamento das duas funções densidades de probabilidade (para posição e para o momento linear) para observar como a variação do parâmetro k , variando desta forma a variância. A função de onda para o momento é dada por

$$\varphi_n(p) = \left(\frac{1}{m \cdot \omega \cdot \pi \cdot \hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \cdot \frac{(-i)^n}{\sqrt{2^n \cdot n!}} \cdot \mathfrak{P}_{\text{Her.}}(\rho; n) \cdot e^{-\frac{\rho^2}{2}}, \quad \rho = \frac{p}{\sqrt{m \cdot \omega \cdot \hbar}},$$

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

com função densidade de probabilidade para $n = 0$ dada por

$$\mathcal{f}_{\|\varphi\|^2}(p|n=0) = \|\varphi_n(p)\|^2 = \sqrt{\frac{1}{m \cdot \omega \cdot \pi \cdot \hbar}} \cdot 1 \cdot e^{-\frac{p^2}{m \cdot \omega \cdot \hbar}} =$$

$$= \frac{e^{-\frac{1}{2} \cdot \frac{p^2}{\frac{m \cdot \omega \cdot \hbar}{2}}}}{\sqrt{2 \cdot \pi} \cdot \sqrt{\frac{m \cdot \omega \cdot \hbar}{2}}}$$

portanto

$$f_{\|\varphi\|^2}(p|n=0) = f_{\text{Norm.}}\left(p; 0, \frac{m \cdot \omega \cdot \hbar}{2}\right) = f_{\text{Norm.}}\left(p; 0, \frac{\sqrt{m \cdot k} \cdot \hbar}{2}\right)$$

A seguir são comparados os gráficos de ambas as densidades de probabilidade

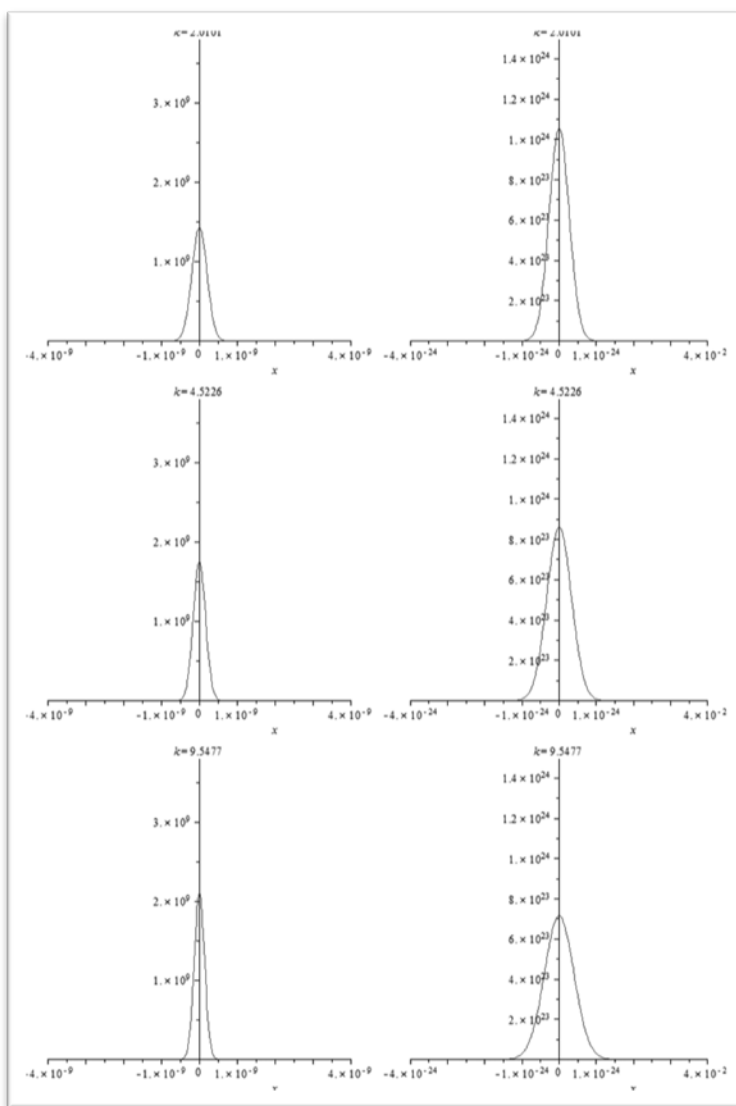


Gráfico 2 Gráficos das funções densidade de probabilidade para o oscilador harmônico simples quântico no espaço de coordenadas (gráficos à esquerda) e no espaço de momentos (gráficos à direita) com valores de k crescentes (de cima para baixo)

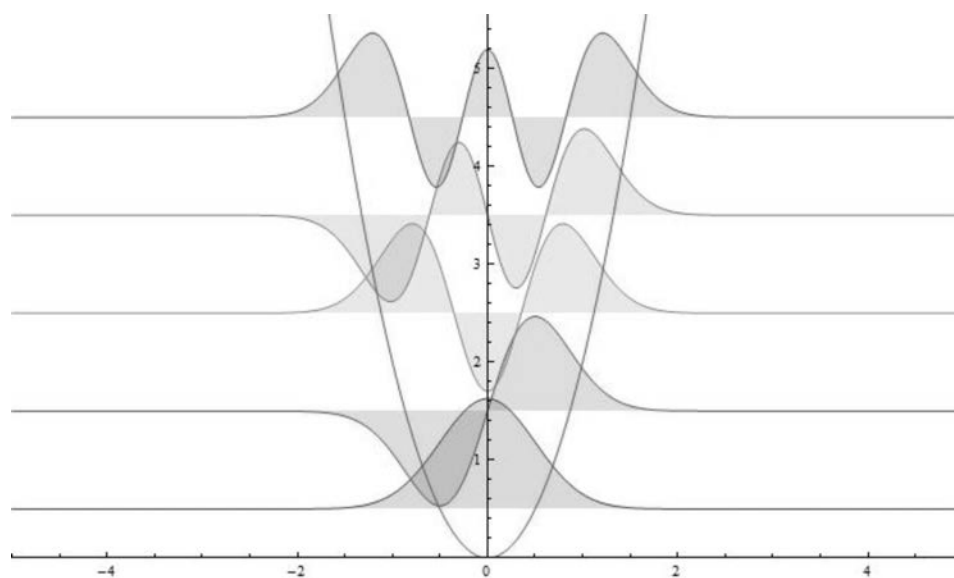


Gráfico 3 Gráfico dos cinco primeiros níveis da função de onda do espaço das coordenadas do oscilador harmônico simples e gráfico da energia potencial (parábola)

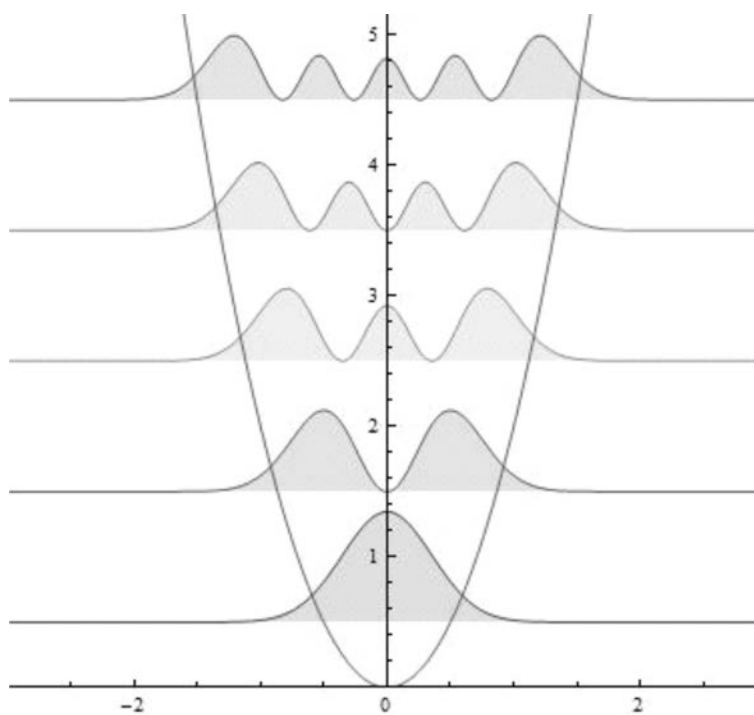


Gráfico 4 Gráfico dos cinco primeiros níveis da função densidade de probabilidade da variável aleatória espaço do oscilador harmônico simples e gráfico da energia potencial (parábola)

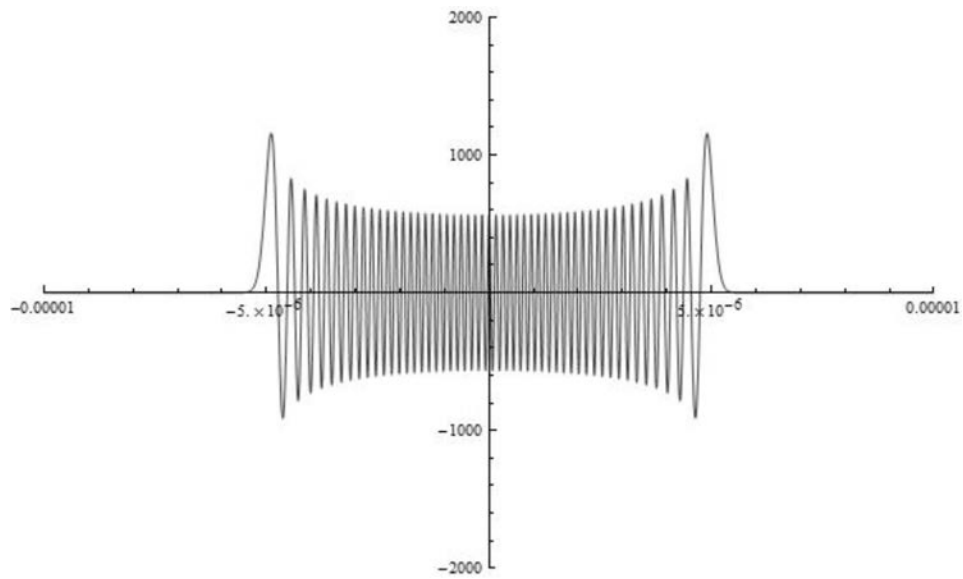


Gráfico 5 Gráfico do centésimo nível da função de onda do espaço das coordenadas do oscilador harmônico simples

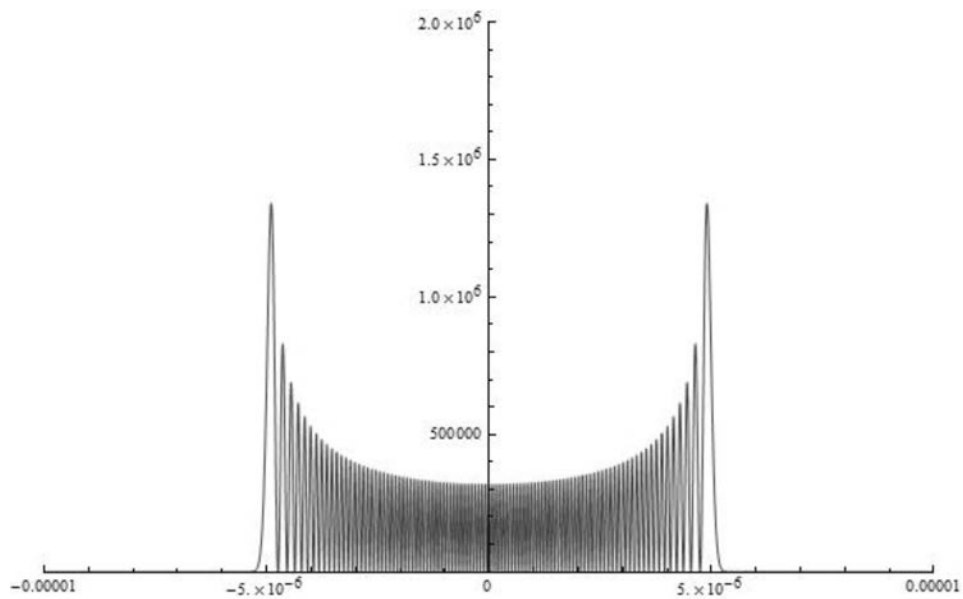


Gráfico 6 Gráfico do centésimo nível da função densidade de probabilidade da variável aleatória posição do oscilador harmônico simples

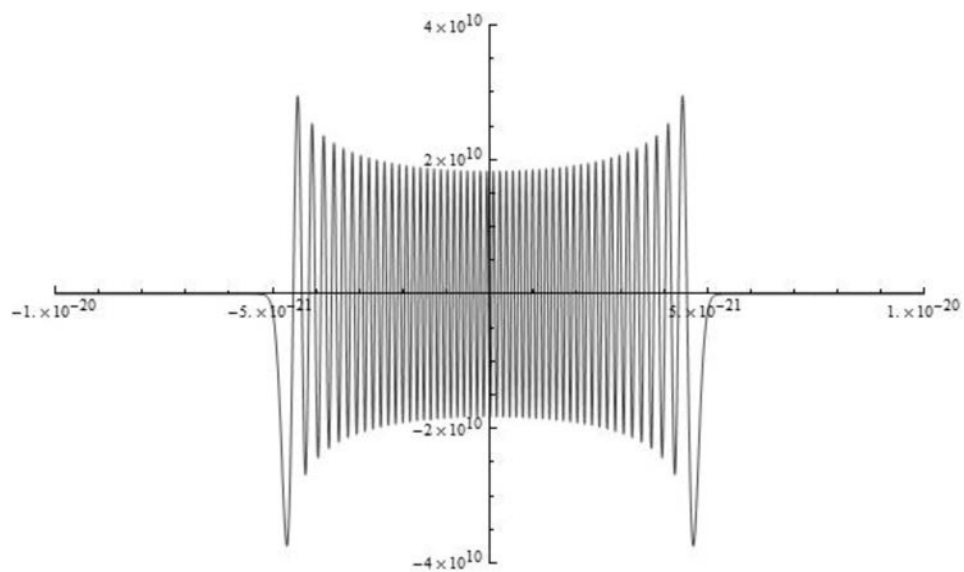


Gráfico 7 Gráfico do centésimo nível da função de onda do espaço dos momentos do oscilador harmônico simples

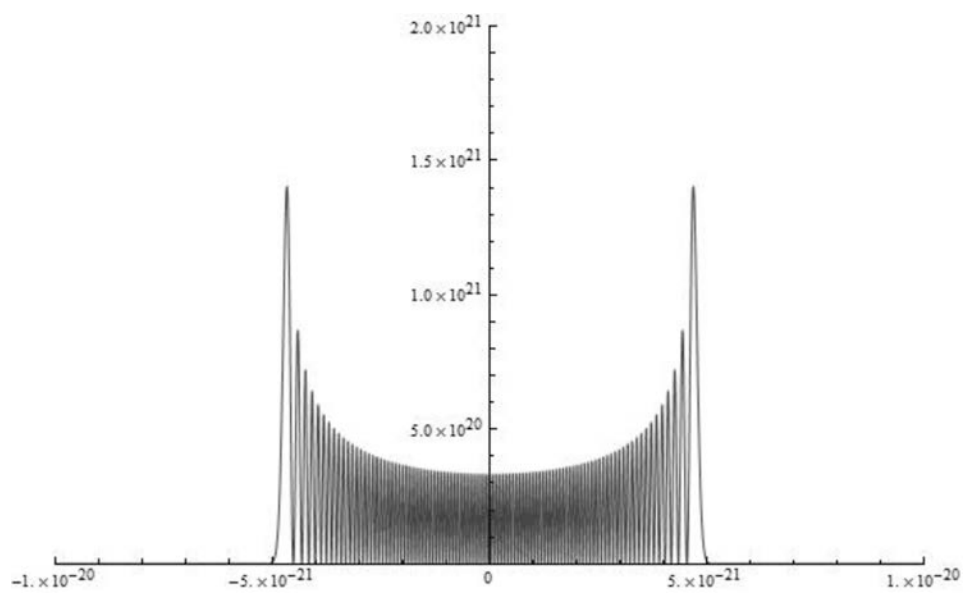


Gráfico 8 Gráfico do centésimo nível da função densidade de probabilidade da variável aleatória momento do oscilador harmônico simples

4.3 O átomo de hidrogênio

Primeiramente utiliza-se do *método de separação de variáveis*, para encontrar a solução da equação de Schrödinger, que se trata de uma equação diferencial parcial. Esse método consiste em substituir a função em questão pelo produto de duas ou mais funções, cada uma das funções será dependente de uma variável, sendo as variáveis independentes entre si. Aplicando na função de onda tem-se

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \cdot f(t)$$

substituindo essa equação na equação de Schrödinger, tem-se

$$i \cdot \hbar \cdot \psi(\vec{r}) \cdot \frac{df(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot f(t) \cdot \nabla^2 \psi(\vec{r}) + E_p(\vec{r}) \cdot \psi(\vec{r}) \cdot f(t)$$

Considerando o potencial $E_p(\vec{r})$ como função somente da posição, e isolando em cada membro as funções dependentes do tempo e da posição

$$i \cdot \hbar \cdot \frac{1}{f(t)} \cdot \frac{df(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{1}{\psi(\vec{r})} \cdot \nabla^2 \psi(\vec{r}) + E_p(\vec{r})$$

Como o primeiro membro está em função de t e o segundo está em função de \vec{r} , tem-se que a igualdade só pode ser satisfeita se ambos os membros forem iguais a uma constante, pois as variáveis são independentes, não se pode ter em nenhum dos membros nenhuma variável, senão ou deixariam de serem independentes (caso em que se tem uma função dependente do tempo no 1º membro e uma dependente da posição no 2º membro) ou não seriam variáveis (caso em que se tem em um membro com uma função dependente de uma das coordenadas e o outro membro igual uma constante). Assim, tem-se

$$\begin{cases} i \cdot \hbar \cdot \frac{1}{f(t)} \cdot \frac{df(t)}{dt} = E \\ -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{1}{\psi(\vec{r})} \cdot \nabla^2 \psi(\vec{r}) + E_P(\vec{r}) = E \end{cases} \quad (10)$$

Reescrevendo a primeira equação do sistema de equações (10) (a equação dependente somente do tempo t) tem-se

$$i \cdot \hbar \cdot \frac{df(t)}{dt} = E \cdot f(t)$$

que é uma equação diferencial de primeira ordem, cuja solução é dada por

$$f(t) = e^{-i \frac{E \cdot t}{\hbar}}$$

Reescrevendo a segunda equação do sistema de equações (10) que é dependente somente das coordenadas espaciais \vec{r} , tem-se

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{1}{\psi(\vec{r})} \cdot \nabla^2 \psi(\vec{r}) + E_P(\vec{r}) = E \quad (11)$$

Normalmente o potencial $E_P(\vec{r})$ é uma função que depende somente da distância da origem, assim, é comum utilizar-se de coordenadas esféricas para se encontrar uma solução para a equação de Schrödinger. O laplaciano ∇^2 , nas coordenadas esféricas, toma a forma

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \cdot \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \cdot \sin \phi} \cdot \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\sin \phi \cdot \frac{\partial}{\partial \phi} \right) + \frac{1}{r^2 \cdot \sin^2 \phi} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}$$

em que r é o comprimento do vetor \vec{r} , ou seja

$$r = \|\vec{r}\|$$

Passando a utilizar as coordenadas esféricas também para a função de onda independente do tempo e realizando o método de separação de variáveis, tem-se

$$\psi(r, \theta, \phi) = f_R(r) \cdot f_Y(\theta, \phi)$$

substituindo essa equação e o laplaciano em coordenadas esféricas em (11), tem-se

$$\frac{-\hbar^2}{2 \cdot m \cdot r^2} \cdot \left\{ f_Y(\theta, \phi) \cdot \frac{d}{dr} \left[r^2 \cdot \frac{df_R(r)}{dr} \right] + \frac{f_R(r)}{\sin \phi} \cdot \frac{\partial}{\partial \phi} \left[\sin \phi \cdot \frac{\partial f_Y(\theta, \phi)}{\partial \phi} \right] + \frac{f_R(r)}{\sin^2 \phi} \cdot \frac{\partial^2 f_Y(\theta, \phi)}{\partial \theta^2} \right\} + E_P(r, \theta, \phi) \cdot f_R(r) \cdot f_Y(\theta, \phi) = E \cdot f_R(r) \cdot f_Y(\theta, \phi)$$

Reescrevendo de forma a isolar toda função em relação à variável r no primeiro membro e no segundo membro funções em relação às variáveis angulares

$$\begin{aligned} & \frac{1}{f_R(r)} \cdot \frac{d}{dr} \left[r^2 \cdot \frac{df_R(r)}{dr} \right] - \frac{2 \cdot m \cdot r^2}{\hbar^2} \cdot [E_P(r, \theta, \phi) - E] = \\ & = \frac{-1}{f_Y(\theta, \phi)} \cdot \left\{ \frac{1}{\sin \phi} \cdot \frac{\partial}{\partial \phi} \left[\sin \phi \cdot \frac{\partial f_Y(\theta, \phi)}{\partial \phi} \right] + \frac{1}{\sin^2 \phi} \cdot \frac{\partial^2 f_Y(\theta, \phi)}{\partial \theta^2} \right\} \end{aligned}$$

então,

$$\frac{1}{f_R(r)} \cdot \frac{d}{dr} \left[r^2 \cdot \frac{df_R(r)}{dr} \right] - \frac{2 \cdot m \cdot r^2}{\hbar^2} \cdot [E_P(r, \theta, \phi) - E] = \ell \cdot (\ell + 1) \quad (12)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{f_Y(\theta, \phi)} \cdot \left\{ \frac{1}{\sin \phi} \cdot \frac{\partial}{\partial \phi} \left[\sin \phi \cdot \frac{\partial f_Y(\theta, \phi)}{\partial \phi} \right] + \frac{1}{\sin^2 \phi} \cdot \frac{\partial^2 f_Y(\theta, \phi)}{\partial \theta^2} \right\} = \\ & = -\ell \cdot (\ell + 1) \end{aligned} \quad (13)$$

A escolha da constante $\ell \cdot (\ell + 1)$ facilitará a resolução das equações.

4.3.1 Equação angular

Aplicando novamente o método de separação de variáveis sobre a equação (13), tem-se

$$\begin{aligned} & f_Y(\theta, \phi) = f_\Theta(\theta) \cdot f_\Phi(\phi) \\ & \frac{1}{f_\Phi(\phi)} \cdot \sin \phi \cdot \frac{d}{d\phi} \left[\sin \phi \cdot \frac{df_\Phi(\phi)}{d\phi} \right] + \ell \cdot (\ell + 1) \cdot \sin^2 \phi = \\ & = -\frac{1}{f_\Theta(\theta)} \cdot \frac{d^2 f_\Theta(\theta)}{d\theta^2} \end{aligned}$$

Usando como constante de separação m^2 (não é a massa m da partícula, a massa está presente na equação radial)

$$\frac{1}{f_{\Phi}(\phi)} \cdot \text{sen } \phi \cdot \frac{d}{d\phi} \left[\text{sen } \phi \cdot \frac{df_{\Phi}(\phi)}{d\phi} \right] + \ell \cdot (\ell + 1) \cdot \text{sen}^2 \phi = m^2 \quad (14)$$

$$\frac{1}{f_{\Theta}(\theta)} \cdot \frac{d^2 f_{\Theta}(\theta)}{d\theta^2} = -m^2 \quad (15)$$

De (15) tem-se a seguinte solução

$$f_{\Theta}(\theta) = e^{i \cdot m \cdot \theta}$$

A equação (14) possui como solução o seguinte polinômio

$$f_{\Phi}(\phi) = A \cdot \mathfrak{P}_{\text{Leg}}(\cos \phi; \ell, m)$$

em que $\mathfrak{P}_{\text{Leg}}(\xi; \ell, m)$ trata-se do polinômio de Legendre associado, descrito por

$$\mathfrak{P}_{\text{Leg}}(\xi; \ell, m) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{(1 - \xi^2)^{\frac{m}{2}}}{2^{\ell} \cdot \ell!} \cdot \frac{d^{m+\ell}}{d\xi^{m+\ell}} [(\xi^2 - 1)^{\ell}], \quad \ell \in \mathbb{N}, \quad m \in \mathbb{N}$$

4.3.2 Equação radial

Fazendo a seguinte substituição em (12)

$$u(r) = r \cdot f_R(r) \quad (16)$$

tem-se

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left[E_P(r) + \frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{\ell \cdot (\ell + 1)}{r^2} \right] \cdot u(r) = E \cdot u(r) \quad (17)$$

que é chamada de equação radial. Observe que m na equação radial representa massa da partícula, enquanto que na equação angular m (letra m no estilo cursivo) representa o número quântico.

A energia potencial para o átomo de hidrogênio é dada por

$$E_P(r) = -\frac{Q_{e^-}}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0} \cdot \frac{1}{r}$$

que representa o campo elétrico, em que Q_{e^-} é a carga elétrica do elétron e^- , ε_0 é a constante da força elétrica. Note que a energia potencial é inversamente proporcional à distância r que separa o elétron do núcleo. Substituindo a equação da energia potencial para o átomo de hidrogênio em (17), tem-se

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left[-\frac{Q_{e^-}}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0} \cdot \frac{1}{r} + \frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{\ell \cdot (\ell + 1)}{r^2} \right] \cdot u(r) = E \cdot u(r)$$

Reescrevendo sob a forma

$$\frac{d^2 u(r)}{d\rho^2} = \left[\frac{1}{4} - \frac{\lambda}{\rho} + \frac{\ell \cdot (\ell + 1)}{\rho^2} \right] \cdot u(r) \quad (18)$$

em que

$$\kappa = \frac{\sqrt{-2 \cdot m \cdot E}}{\hbar}, \quad \rho = 2 \cdot \kappa \cdot r, \quad \lambda = \frac{m \cdot Q_{e^-}^2}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0 \cdot \hbar^2 \cdot \kappa} \quad (19)$$

Fazendo a análise do comportamento assintótico de (18) descobre-se que para $r \rightarrow +\infty$, leva à solução

$$u(\rho) \simeq A \cdot e^{-\frac{\rho}{2}}$$

e para $r \rightarrow 0$, leva à solução

$$u(\rho) \simeq C \cdot \rho^{\ell+1}$$

Definindo a função $u(\rho)$ como

$$u(\rho) = \rho^{\ell+1} \cdot e^{-\frac{\rho}{2}} \cdot v(\rho)$$

e substituindo em (18), chega-se em

$$\rho \cdot \frac{d^2 v(\rho)}{d\rho^2} + (2 \cdot \ell + 2 - \rho) \cdot \frac{dv(\rho)}{d\rho} + (\lambda - \ell - 1) \cdot v(\rho) = 0$$

cuja solução é dada por

$$v(\rho) = \mathfrak{F}_{\text{Lag}}(\rho; \lambda + \ell, 2 \cdot \ell + 1)$$

onde

$$\mathfrak{F}_{\text{Lag}}(\xi; n, k) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{j=0}^n \frac{(-1)^j \cdot (n+k)!}{(n-j)! (k+j)! j!} \cdot \xi^j$$

denominado polinômio de Laguerre associado. Substituindo a solução encontrada na definição da função $u(\rho)$, tem-se

$$u(\rho) = \rho^{\ell+1} \cdot e^{-\frac{\rho}{2}} \cdot \mathfrak{P}_{\text{Lag}}(\rho; \lambda + \ell, 2 \cdot \ell + 1) \quad (20)$$

Entretanto, λ - definido em (19) - deve ser um inteiro, para isso, tem-se que

$$E_n = -\frac{m \cdot Q_{e^-}^4}{8 \cdot \pi^2 \cdot \hbar^2 \cdot \varepsilon_0^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

resultando na quantização da energia. Finalmente, substituindo (20) em (16), obtém-se

$$f_R(r; n, \ell) = e^{-\frac{r}{n \cdot a}} \cdot \left(\frac{2 \cdot r}{n \cdot a}\right)^\ell \cdot \mathfrak{P}_{\text{Lag}}\left(\frac{2 \cdot r}{n \cdot a}; n + \ell, 2 \cdot \ell + 1\right)$$

onde

$$a = \frac{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0 \cdot \hbar^2}{m \cdot Q_{e^-}^2}$$

4.3.3 Normalização

A condição de normalização para a função de onda é dado por

$$\begin{aligned} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^{+\infty} \|\psi(r, \theta, \phi)\|^2 \cdot r^2 \cdot \text{sen } \phi \, dr \, d\theta \, d\phi = \\ = \int_0^{+\infty} \|f_R(r)\|^2 \cdot r^2 \, dr \cdot \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \|f_Y(\theta, \phi)\|^2 \, d\theta \, d\phi = 1 \end{aligned}$$

sendo mais conveniente a normalização individual de $f_R(r)$ e $f_Y(\theta, \phi)$

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} \|f_R(r)\|^2 \cdot r^2 \, dr = 1 \\ \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \|f_Y(\theta, \phi)\|^2 \cdot \text{sen } \phi \, d\theta \, d\phi = 1 \end{aligned}$$

A função angular já normalizada toma a forma

$$f_Y(\theta, \phi; \ell, m) = \varepsilon(m) \cdot \sqrt{\frac{2 \cdot \ell + 1}{4 \cdot \pi} \cdot \frac{(\ell - |m|)!}{(\ell + |m|)!}} \cdot e^{i \cdot m \cdot \theta} \cdot \mathfrak{P}_{\text{Leg}}(\cos \phi; \ell, m),$$

$$\varepsilon(m) = \begin{cases} 1, & m \leq 0 \\ (-1)^m, & m > 0 \end{cases}$$

e a função radial fica da seguinte forma

$$f_R(r) =$$

$$= \sqrt{\left(\frac{2}{n \cdot a}\right)^3 \cdot \frac{(n - \ell - 1)!}{2 \cdot n \cdot [(n + \ell)!]^3}} \cdot e^{-\frac{r}{n \cdot a}} \cdot \left(\frac{2 \cdot r}{n \cdot a}\right)^\ell \cdot \mathfrak{P}_{\text{Lag}}\left(\frac{2 \cdot r}{n \cdot a}; n + \ell, 2 \cdot \ell + 1\right)$$

A função de onda devidamente normalizada para o átomo de hidrogênio é dado por

$$\psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \phi) = f_R(r) \cdot f_Y(\theta, \phi)$$

e a função densidade de probabilidade é dada por

$$\mathfrak{P}_{\|\psi\|^2}(r, \theta, \phi; n, \ell, m) = \|\psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \phi)\|^2$$

com probabilidade dada por

$$\mathcal{P}_{\|\psi\|^2}(r \in R_1, \theta \in R_2, \phi \in R_3 | n, \ell, m) =$$

$$= \int_{\phi \in R_3} \int_{\theta \in R_2} \int_{r \in R_1} \|\psi(r, \theta, \phi)\|^2 \cdot r^2 \cdot \text{sen } \phi \, dr \, d\theta \, d\phi$$

em que r , θ e ϕ são as variáveis aleatórias reais

$$r \geq 0, \quad 0 \leq \theta < 2 \cdot \pi, \quad 0 \leq \phi \leq \pi$$

As variáveis n , ℓ e m (que definem o estado do sistema) podem ser tratadas como aleatórias, mas neste caso serão tratadas como valores já observados, como no caso de probabilidade condicional, quando um determinado evento já ocorreu, ou seja, o estado do sistema já foi determinado,

portanto não será abordado a construção de uma função de probabilidade conjunta para as variáveis n , ℓ e m , portanto considere-as como parâmetros.

A seguir tem-se os gráficos para a densidade de probabilidade do átomo de hidrogênio.

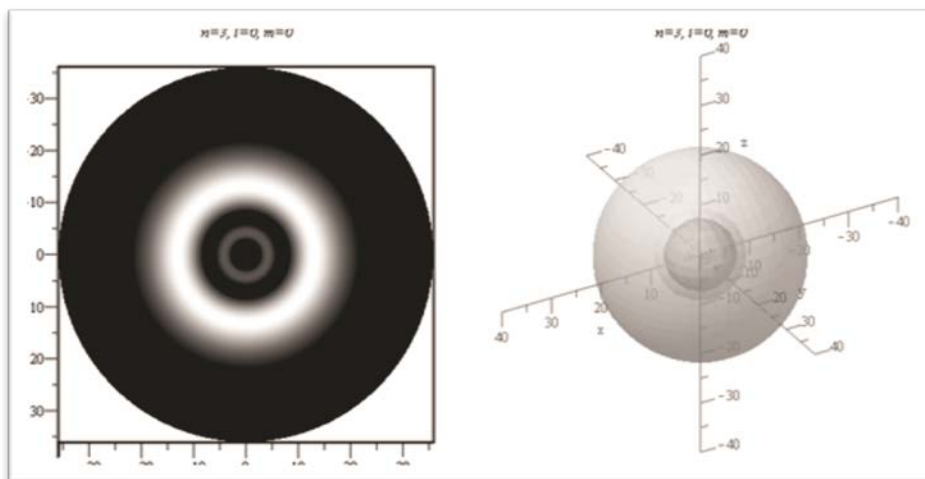


Gráfico 9 Gráficos bidimensional (à esquerda) e tridimensional (à direita) da densidade de probabilidade do orbital do átomo de hidrogênio com números quânticos: $n = 3$, $\ell = 0$ e $m = 0$

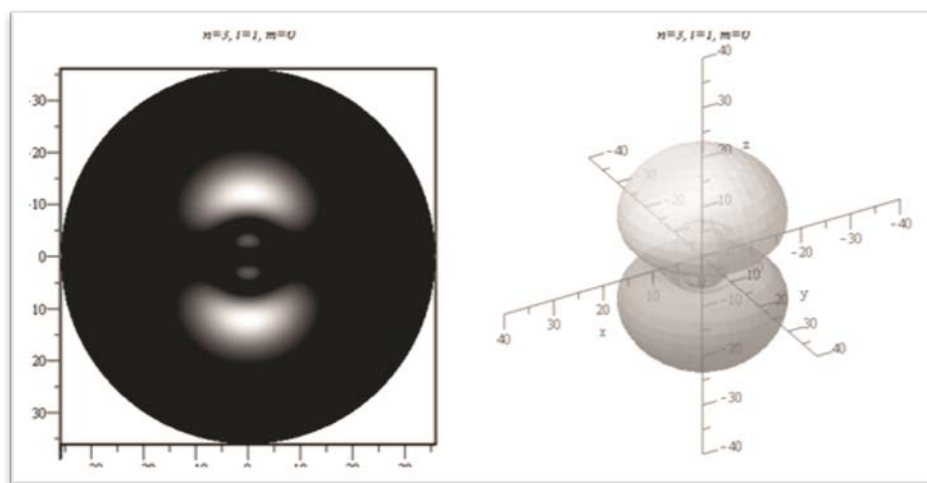


Gráfico 10 Gráficos bidimensional (à esquerda) e tridimensional (à direita) da densidade de probabilidade do orbital do átomo de hidrogênio com números quânticos: $n = 3$, $l = 1$ e $m = 0$

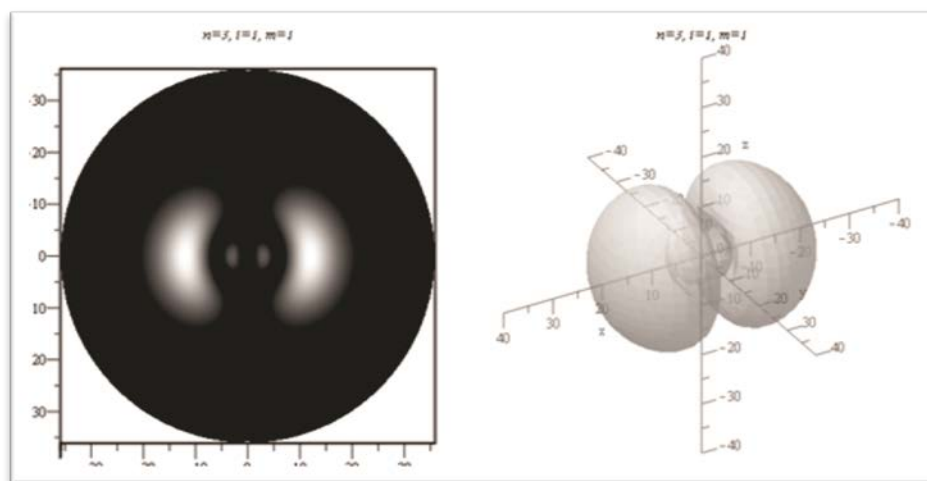


Gráfico 11 Gráficos bidimensional (à esquerda) e tridimensional (à direita) da densidade de probabilidade do orbital do átomo de hidrogênio com números quânticos: $n = 3$, $l = 1$ e $m = 1$

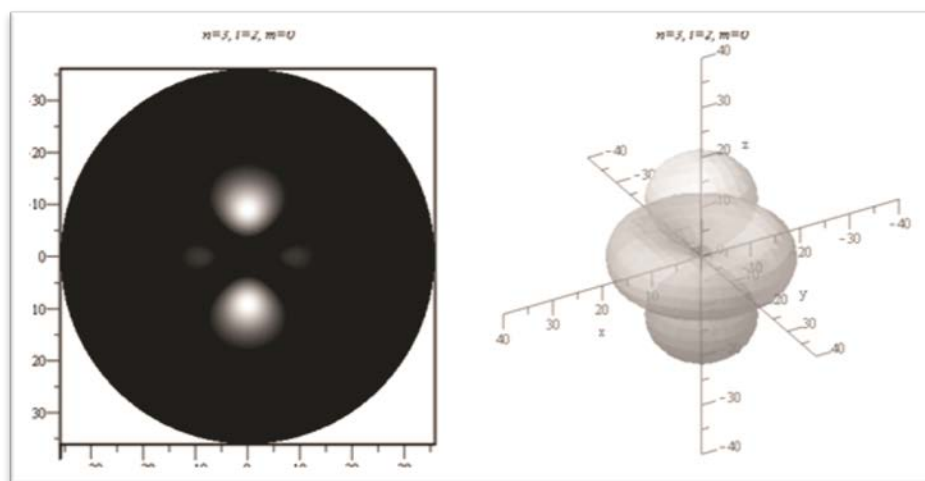


Gráfico 12 Gráficos bidimensional (à esquerda) e tridimensional (à direita) da densidade de probabilidade do orbital do átomo de hidrogênio com números quânticos: $n = 3$, $l = 2$ e $m = 0$

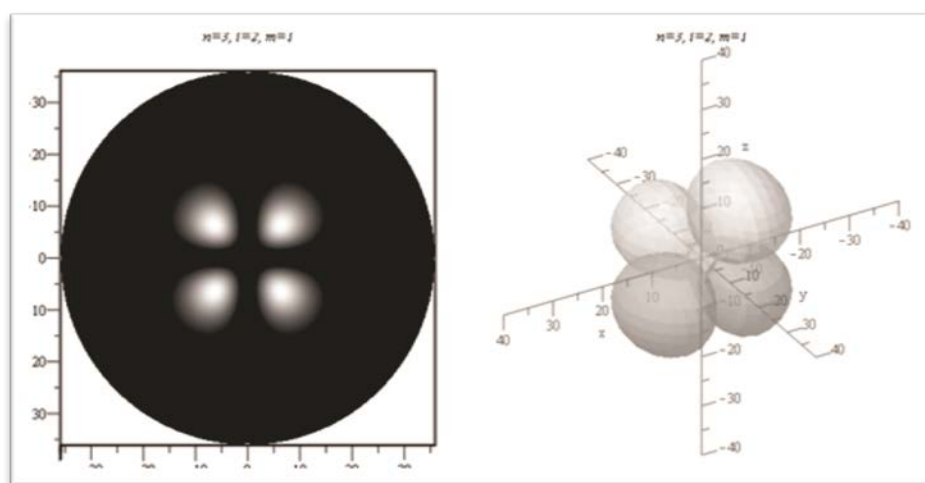


Gráfico 13 Gráficos bidimensional (à esquerda) e tridimensional (à direita) da densidade de probabilidade do orbital do átomo de hidrogênio com números quânticos: $n = 3$, $l = 2$ e $m = 1$

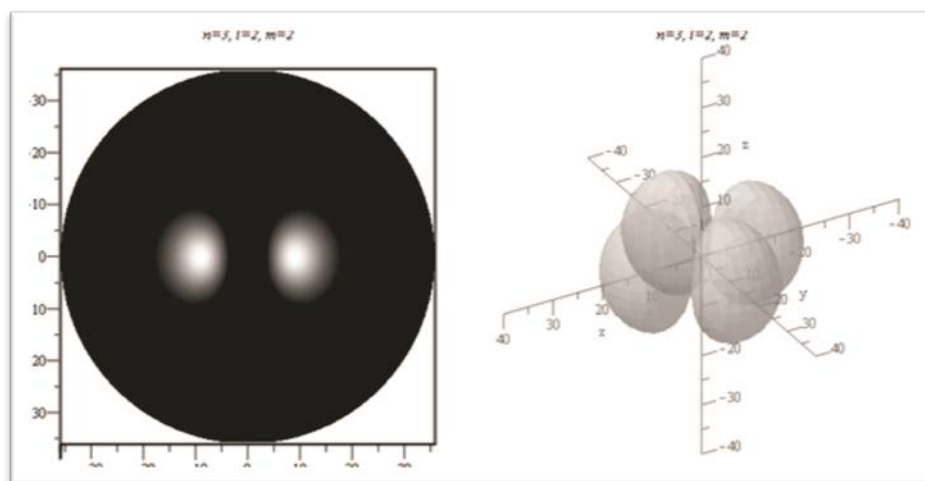


Gráfico 14 Gráficos bidimensional (à esquerda) e tridimensional (à direita) da densidade de probabilidade do orbital do átomo de hidrogênio com números quânticos: $n = 3$, $l = 2$ e $m = 2$

5 CONCLUSÃO

Na literatura encontrada na Mecânica Quântica, frequentemente encontra-se uma abordagem mais física do que estatística, e portanto detalhes como a classificação das variáveis em variáveis aleatórias e em parâmetros, encontradas na Estatística, não são levadas em consideração, o que pode levar a uma confusão com relação ao que é considerado parâmetro ou variável na Física. Um esclarecimento melhor é necessário para se poder utilizar corretamente as propriedades obtidas na Estatística.

Utilizando-se do formalismo encontrado na Estatística, pôde-se encontrar a função conjunta de probabilidade, que possibilita encontrar as probabilidades envolvendo mais de uma variável aleatória a partir de funções de probabilidade marginais. Na literatura de Mecânica Quântica as funções de probabilidade marginais estão presentes, apesar de não estarem explicitamente classificadas como tal, mas não é encontrada a formalização para se encontrar a partir das marginais a função de probabilidade conjunta.

Com relação à definição de valor esperado da quantidade física momento linear, esta diverge da definição de valor esperado na Estatística, porém foi possível demonstrar que é possível reescrever as funções densidade de probabilidade de forma que a variável aleatória posição foi trocada pela variável aleatória momento linear, através de uma transformação de Fourier, possibilitando o cálculo do valor esperado do momento linear da mesma forma como é calculado na Estatística. Esta demonstração foi uma contribuição desta dissertação, pois ela não é encontrada na literatura pesquisada, porém a transformação de Fourier é mencionada, mas sem a demonstração.

Esta formalização encontrada nesta dissertação está longe de abranger toda a Mecânica Quântica, mas trata-se de uma abordagem inicial a este vasto

campo. Esta explicitação dos conceitos nativos da Estatística já tem sido também encontrada em trabalhos recentes de diversos físicos, como em Griffiths (2001), que demonstram não ser necessário um novo cálculo de probabilidades, como haviam propostos alguns outros físicos, visto em Pitowsky (1989) (que apresenta a probabilidade quântica), sendo somente necessário uma melhor formalização da Mecânica Quântica com respeito às definições estatísticas, para que não haja conflitos.

REFERÊNCIAS

ALCÁCER, L. **Introdução à química quântica computacional**. Lisboa: IST Press, 2007. 303p.

ENCICLOPÉDIA Mirador Internacional. São Paulo: Encyclopaedia Britannica do Brasil, 1993. 14 v.

GRIFFITHS, D. J. **Introduction to quantum mechanics**. Englewood Cliffs: Prentice Hall, 1995. 394p.

GRIFFITHS, R. B. **Consistent quantum theory**. Cambridge: Cambridge University, 2001. 408p.

KAMMLER, D. W. **A first course in fourier analysis**. 2nd. ed. Cambridge: Cambridge University, 2007. 864p.

KREYSZIG, E. **Advanced engineering mathematics**. 9th ed. Hoboken: J. Wiley, 2006. 1094p.

LEVINE, I. N. et al. **Química cuántica**. 5. ed. Madri: Prentice Hall, 2005. 714p.

LOOMIS, L. H.; STERNBERG, S. **Advanced calculus**. Boston: J. Bartlett, 1990. 580p.

MAGALHÃES, M. N. **Probabilidade e variáveis aleatórias**. 2. ed. São Paulo: USP, 2006. 428p.

MCMAHON, D. **Quantum mechanics demystified**. New York: McGraw-Hill, 2006. 393p.

MOOD, A. M.; GRAYBILL, F. A.; BOES, D. C. **Introduction to the theory of statistics**. 3rd. ed. New York: McGraw-Hill, 1973. 564p.

PITOWSKY, I. **Quantum probability**: quantum logic. Berlin: Springer-Verlag, 1989. 209p.

WEISSTEIN, E. W. **CRC Concise Encyclopedia of Mathematics**. 2nd. ed. Boca Raton: Chapman & Hall/CRC, 2003. 3242 p.