

# Introdução à Mecânica Clássica e à Mecânica Quântica

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Podemos reescrever novamente esse sistema usando a **função de Hamilton** (ou **hamiltoniana**), que é uma função real sobre o espaço de fases definida por

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

A função

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

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

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

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

**Introdução à mecânica quântica.** Na escala atômica, a posição e o momento são observáveis importantes mas são insuficientes para descrever o estado de uma partícula. Na mecânica quântica, o estado é representado por uma função  $\psi(x)$ , definida sobre o espaço de configurações, chamada **função de onda**:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

onde

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

e

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

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

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

$$p = -i\hbar\nabla.$$

Portanto

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

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

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

Ele atua em uma função por

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

Associado à função  $V(x)$ , consideramos o operador  $V$  definido por

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

Portanto, associado à função  $H(x, p)$  obtemos o operador de Hamilton

$$H = T + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x).$$

Se  $\psi$  é uma função suave, podemos justificar a igualdade

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

e escrever

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

Consideremos agora o problema de minimização

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

Suponha que  $V(x)$  é tal que a constante  $E_0$  exista. Se o ínfimo é um mínimo, isto é, se  $E_0 = \mathcal{E}(\psi_0)$  para algum  $\psi_0 \in L^2(\mathbb{R}^d)$ , então  $E_0$  é chamada a energia do estado fundamental e  $\psi_0$  é chamado o **estado fundamental**. Suponha que a partícula possua um estado fundamental. Então um cálculo simples nos leva à equação

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

Em geral,  $E_0$  e  $\psi_0$  não são a única solução da **Equação de Schrödinger independente do tempo**

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

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

Por fim, consideremos a Equação de Schrödinger

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

Uma boa estratégia para investigar uma equação diferencial linear é primeiro obter soluções específicas e então construir soluções mais complicadas usando

as soluções específicas. Para obter soluções explícitas, muitas vezes é útil procurar soluções de um tipo particular. Vamos usar o método de separação de variáveis e procurar por soluções do tipo

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

Substituindo essa expressão na Equação de Schrödinger, obtemos

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

e

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

onde  $E$  é a constante de separação. As soluções da equação para  $\chi$  são dadas por múltiplos da função

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

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

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

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

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

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

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

onde  $c_1, c_2, c_3, \dots$  são constantes. Quando as autofunções  $\varphi_n$  não formam uma base para  $L^2(\mathbb{R}^d)$ , usa-se uma teoria mais geral para estudar a equação  $H\varphi = E\varphi$ , chamada teoria espectral. Nessa teoria, o **espectro** de  $H$  é o conjunto de “autovalores generalizados” de  $H$ . Essas observações sugerem que as propriedades de  $\psi(x, t)$  estão relacionadas às propriedades do espectro do Hamiltoniano. Portanto, determinar o espectro de  $H$  é uma tarefa essencial na mecânica quântica.