Um Ensaio à Matemática da Mecânica Quântica

An Essay on the Mathematics of Quantum Mechanics

Sebastião Nelson de Araújo Martins Filho *

Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Rio Grande do Sul, Brasil

Resumo: A incapacidade da Mecânica Clássica em explicar alguns fenômenos ocorridos em experimentos científicos que estavam sendo realizados no final do século XIX e início do século XX, propiciou o desenvolvimento de uma nova teoria física. Cientistas estavam percebendo que a nível atômico e subatômico, a Física conhecida até então, estava falhando. A partir disso, novas ideias, postulados e interpretações foram sendo propostos para explicar tais resultados empíricos. Com o passar dos anos, então, surgiu o que hoje conhecemos como Mecânica Quântica; aparentemente, uma teoria separada da mecânica clássica. Todavia, mais posteriormente, foi compreendida como uma extensão desta última. O presente trabalho é uma introdução aos principais conceitos e fórmulas matemáticas usados nessa área da Física, considerando apenas os casos unidimensionais. As ideias apresentadas, em sua maioria, terão um embasamento mais matemático do que empírico. Tentou-se, também, apresentar uma descrição detalhada dos cálculos e equações, de modo a evidenciar praticamente todos os passos realizados. A Mecânica Quântica é uma área significativamente grande da Física, possui expressivo refinamento matemático e várias formas de abordagem. De forma que há uma limitação no número de tópicos que serão apresentados no decorrer do artigo. Contudo, se espera que, com essa introdução, o leitor consiga adquirir uma noção física e matemática suficiente para saber como deve pensar, e quais ferramentas utilizar, ao estudar partículas muito pequenas.

Palavras - Chaves: mecânica quântica; física quântica; física matemática;

Abstract: The inability of Classical Mechanics to explain some phenomena that occurred in scientific experiments that were being carried out in the late 19th and early 20th centuries, led to the development of a new physical theory. Scientists were realizing that at the atomic and subatomic level, hitherto known physics was failing. Thus, new ideas, postulates and interpretations began to be made in order to explain such empirical results. Then over the years, what we now know as Quantum Mechanics emerged; apparently a separate theory from classical mechanics. Later, it was understood as an extension of the latter. The present work is an introduction to the main concepts and mathematical formulas used in this area of Physics, considering only the one-dimensional cases. The ideas presented here, for the most part, will have more mathematical than empirical basis. It was also tried to present a detailed description of the calculations and equations, showing practically all the steps performed. Quantum Mechanics is a significantly large area of Physics, has expressively mathematical refinement and several approaches. Thus there is a limitation of topics to be presented within the article. However, it is hoped that, with this introduction, the reader will be able to acquire enough physical and mathematical notions to know how to think and what tools to use when studying very small particles.

Keywords: quantum mechanics; quantum physics; mathematical physics;

* Endereço para correspondência: snamf1403@hotmail.com (graduando em matemática pura bacharelado)

1. Axioma I (Relação de Planck - Einstein)

A Energia de um Fóton (partícula que compõe a luz) pode ser calculada pela expressão $E = \hbar\omega = h\nu$.

Onde $h = 6,62607004 \times 10^{-34} J \cdot s$ representa a constante de Planck, $\hbar = h/(2\pi)$ representa a constante reduzida de Planck e ω, ν representam as frequências angulares e não angulares da onda eletromagnética associada ao Fóton, respectivamente [1].

2. Teorema I (Relação de De Broglie)

Fótons possuem quantidade de movimento (momento linear), podendo este ser calculado pela fórmula

$$p = \hbar k = \frac{h}{\lambda} \tag{1}$$

$D\bar{e}m.$: Pelo Axioma I, Fótons emitem energia da forma $E = \hbar\omega$. E sabemos pelo Princípio da Equivalência Massa - Energia de Einstein, que toda energia induz uma massa associada, i.e., $E = mc^2$. Em outras palavras, isso quer dizer que a energia da forma $\hbar\omega$ é produzida por uma massa $m = \hbar\omega/c^2$ pelo fato de termos $E = \hbar\omega = mc^2$. Por definição, quantidade de movimento é o produto da massa pela velocidade da partícula. Um Fóton possui velocidade c. Logo, segue que:

$$p = \frac{\hbar\omega}{c^{\cancel{2}}} \cdot \cancel{c} \Rightarrow p = \frac{\hbar\omega}{c} \tag{2}$$

Das relações da mecânica ondulatória, podemos escrever o momento em função do número de onda e do comprimento de onda, já que $k = \omega/c = 2\pi/\lambda$. Como $\hbar = h/(2\pi)$, concluímos que:

$$p = \hbar k = \frac{h}{\cancel{2\pi}} \cdot \frac{\cancel{2\pi}}{\lambda} = \frac{h}{\lambda} \quad \blacksquare \tag{3}$$

Note-se que um Fóton não possui massa de repouso, ou massa inercial, pois ele (o Fóton) só existe quando se propaga com a luz na velocidade c sob uma frequência ν (entenda-se isso como uma extensão do axioma I). Sendo assim, a sua massa é unicamente relativística e seu valor varia conforme a radiação eletromagnética associada [2].

3. Axioma II (Hipótese de De Broglie / Princípio da Dualidade)

- *Toda a matéria apresenta comportamento ondulatório e corpuscular, podendo escolher um ao outro dependendo do experimento específico;* [3]
- *A energia da partícula (*E*) é igual a energia da onda associada, e vale que:* $E = \hbar\omega$; [4]

4. Teorema II (Comprimento de Onda de De Broglie)

O comprimento de onda para a matéria pode ser expresso em: $\lambda = h/m\nu$. [3]

$D\bar{e}m.$: Sabemos que ondas também carregam quantidade de movimento, onde este pode ser definido por: $p = E/\nu_f$. Sendo E a energia da onda e ν_f a sua velocidade de fase [5]. Note-se que:

$$\frac{J}{\left(\frac{m}{s}\right)} = J \cdot \frac{s}{m} = \frac{\frac{Kgm^2}{s^{\cancel{2}}} \cdot \cancel{s}}{m} = \frac{\left(\frac{Kgm^2}{s}\right)}{m} = \frac{Kgm^{\cancel{2}}}{s} \cdot \frac{1}{\cancel{m}} = Kg \cdot \frac{m}{s} \tag{4}$$

Revista Brasileira de Física, Vol. 3, Nº1, e202301030102
www.revistabrasileiradefisica.com | DOI: https://doi.org/10.5281/zenodo.7507996

I.e.: Podemos associar uma massa e uma velocidade à expressão E/v_f, de forma que $mv = E/v_f$.

$$\text{Pelo axioma II}: \; mv = \frac{\hbar\omega}{v_f} \Rightarrow mv = \hbar k \Rightarrow mv = \frac{h}{\cancel{2\pi}} \cdot \frac{\cancel{2\pi}}{\lambda} \Rightarrow mv = \frac{h}{\lambda} \Rightarrow \lambda = \frac{h}{mv} \quad \blacksquare \tag{5}$$

Perceba-se portanto, que quando m tende a nível macroscópico, mv se torna muito maior que h e λ tende a 0. Ou seja, a partícula não mais se comporta como onda.

5. Teorema III (das Velocidades)

Sem potencial, a velocidade da partícula é igual à velocidade de grupo da onda associada (velocidade de um pacote de onda) que, por sua vez, é igual a duas vezes a velocidade de fase ($v = v_g = 2v_f$). [6]

$D\bar{e}m.$: A partir do teorema II, podemos escrever que:

$$\lambda = \frac{h}{mv} \Rightarrow v = \frac{h}{m\lambda} = \frac{2\pi\hbar}{\left(\frac{2\pi}{k}\right) m} = \cancel{2\pi}\hbar \cdot \frac{k}{\cancel{2\pi} m} \Rightarrow v = \frac{\hbar k}{m} \tag{6}$$

E, a partir da Mecânica Hamiltoniana, temos que:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V \tag{7}$$

Consideremos agora o caso particular de uma partícula sem influência de potencial externo. Ou seja, a energia da partícula é puramente cinética. Pelo axioma II, segue que:

$$E = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow p^2 = 2mE = 2m\hbar\omega \tag{8}$$

$$\text{Por } (6): \; p = \hbar k \Rightarrow p^2 = \hbar^{\cancel{2}} k^2 = 2m\cancel{\hbar}\omega \Rightarrow 2m\omega = \hbar k^2 \Rightarrow \omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \tag{9}$$

Portanto, por definição, a velocidade de fase da onda é tal que:

$$v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k^{\cancel{2}}}{2m} \cdot \frac{1}{\cancel{k}} \Rightarrow v_f = \frac{\hbar k}{2m} \tag{10}$$

$$\text{Note} - \text{se que por } (9), \; \text{é verdade que}: \; \omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \tag{11}$$

Calculemos, finalmente, a velocidade de grupo da onda. Também por definição concluímos que:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dk}\left(\frac{\hbar k^2}{2m}\right) = \frac{\cancel{2}k\hbar}{\cancel{2}m} = \frac{\hbar k}{m} \Rightarrow v_g = v = 2v_f \quad \blacksquare \tag{12}$$

6. Teorema IV (Equação de Schrödinger)

Sendo ψ uma função de onda específica, solução de uma equação de onda, vale que:

$$E\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial\psi^2}{\partial x^2} + V\psi \tag{13}$$

Dem. : Assim (de maneira específica), vamos considerar, inicialmente, uma função de onda estacionária unidimensional genérica da seguinte forma: representando uma onda viajando na direção x positiva, e uma outra onda correspondente viajando na direção oposta [7]:

$$\psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)} \tag{14}$$

Diferenciando ψ no tempo, obtemos:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = Ae^{i(kx-\omega t)}(-i\omega) = -i\omega\psi \tag{15}$$

Pela Relação de Planck - Einstein e pelo fato de que $\frac{1}{-i} = i$, temos que:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{-iE\psi}{\hbar} \Rightarrow \frac{\hbar}{-i}\cdot\frac{\partial\psi}{\partial t} = E\psi \Rightarrow i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = E\psi \tag{16}$$

Diferenciando ψ na coordenada espacial, podemos escrever que:

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = Ae^{i(kx-\omega t)}(ik) = ik\psi \tag{17}$$

Por (6) podemos continuar a equação acima da seguinte forma:

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = \frac{ip\psi}{\hbar} \Rightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x} = p\psi \Rightarrow -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x} = p\psi \Rightarrow p = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} = -i\hbar\nabla \tag{18}$$

Da Mecânica Hamiltoniana, sabemos que a energia de um sistema (cinética e potencial) pode ser representada através da Função Hamiltoniana $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$. Substituindo em (16):

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi = \left(\frac{p^2}{2m} + V(x)\right)\psi \tag{19}$$

Elevando (18) ao quadrado, podemos escrever em termos do Operador Del $(\partial/\partial x)$ que:

$$p^2 = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2} \tag{20}$$

Substituindo (20) em (19), segue que:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V\psi \tag{21}$$

Essa última equação é conhecida como a **Equação de Schrödinger Dependente do Tempo.**

Note-se que agora a energia do sistema está concentrada no Operador Hamiltoniano:

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \tag{22}$$

Se interpretarmos a energia na equação (16) também como um Operador Diferencial, e se utilizando da equação (21), podemos dizer que:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V\psi = E\psi \tag{23}$$

Revista Brasileira de Física, Vol. 3, Nº1, e202301030102
www.revistabrasileiradefisica.com | DOI: https://doi.org/10.5281/zenodo.7507996

E (23), por sua vez, é conhecida como a **Equação de Schrödinger Independente do Tempo.**

Em termos de Operadores, finalizamos escrevendo tudo isso em uma forma mais concisa:

$$H\psi = E\psi \quad \blacksquare \tag{24}$$

7. Quantização Canônica

Identificar as grandezas físicas (momento e energia) como Operadores Diferenciais Lineares é a chave para um processo conhecido como Quantização Canônica, que nos permite sair da Mecânica Clássica Hamiltoniana e migrarmos diretamente para e Mecânica Quântica através de um simples passo matemático [8]. Consideremos então a expressão abaixo:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \tag{25}$$

Agora, impomos a correspondência unívoca:

$$x \longmapsto \hat{x} \quad \spadesuit$$

$$p \longmapsto -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} = \hat{p} \quad \clubsuit$$

$$E \longmapsto i\hbar\frac{\partial}{\partial t} = \hat{E} \quad \bigstar$$

Após tal substituição canônica, temos que:

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}}{2m} + \hat{V} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \Leftrightarrow \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \tag{26}$$

Note-se que os operadores da última equação não estão agindo sobre vetor algum. Precisamos multiplicar toda a equação por uma função vetorial para ela poder fazer sentido. Então:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{27}$$

que é a Equação de Schrödinger da Mecânica Quântica.

Lembremos que na mecânica clássica, o Momento e a Energia de uma partícula são grandezas físicas mensuráveis representadas por Funções Reais (ou vetores) em um espaço euclidiano (dimensão finita). Enquanto que, na mecânica quântica, tais grandezas são representadas por Operadores Diferenciais Hermitianos (provaremos a hermiticidade em linhas posteriores) definidos sob um espaço não - euclidiano (um espaço de Hilbert) que agem sobre um vetor de onda complexo (ψ), onde este último está definido sob um espaço funcional, com dimensão infinita. Mais precisamente, sob o espaço vetorial das funções complexas. Além disso, como qualquer quantidade clássica pode ser colocada algebricamente em termos do Momento Linear e da Posição, isso significa que a Velocidade, a Aceleração e outras grandezas físicas também vão passar a ser operadores e não mais vetores com entradas reais (em essência). Mais tarde mostraremos que além de operadores, essas grandezas serão também variáveis aleatórias discretas e contínuas (ou, em dimensões maiores, vetores aleatórios).

Por exemplo:

$$p = mv \Rightarrow \hat{p} = m\hat{v} \Rightarrow \hat{v} = \frac{-i\hbar}{m}\frac{\partial}{\partial x} \;\; e \;\; a = \frac{dv}{dt} \Rightarrow \hat{a} = \frac{d}{dt}(\hat{v}) \Rightarrow \hat{a} = \frac{-i\hbar}{m}\frac{\partial^2}{\partial t\partial x} \tag{28}$$

Revista Brasileira de Física, Vol. 3, Nº1, e202301030102
www.revistabrasileiradefisica.com | DOI: https://doi.org/10.5281/zenodo.7507996

Outro ponto importante para salientar, é que a Equação de Schrödinger é não - relativista, já que, em sua dedução, se usa a definição não - relativística de energia total, i.e.: $E = \frac{p^2}{2m_0} + V$ (o hamiltoniano clássico do sistema). Se quiséssemos uma possibilidade relativista de equação, deveríamos usar $E = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4} + V$. [9]

8. A Solução Temporal da Equação de Schrödinger

Nosso próximo passo será resolver a Equação de Schrödinger. Se trata de uma equação diferencial parcial linear parabólica homogênea de 2ª ordem. Resolveremos ela pelo Método da Separação de Variáveis [1].

Para tanto, consideremos a equação completa:

$$E\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V\psi \tag{29}$$

Considere previamente que $\hat{\mathcal{O}}\psi = \mathcal{O}\psi$, onde $\mathcal{O}$ representa os autovalores do hermitiano $\hat{\mathcal{O}}$.

Supondo $\psi(x,t) = \Phi(x)T(t)$ e dividindo toda a equação acima por $\Phi(x)T(t)$, temos que:

$$\frac{E(\Phi T)}{\Phi T} = \frac{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\Phi T)}{\Phi T} = \frac{\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(\Phi T) + V\Phi T}{\Phi T} \Rightarrow \frac{i\hbar}{T}\frac{dT}{dt} = \frac{\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Phi}{dx^2} + V\Phi}{\Phi} = E \tag{30}$$

Dessa forma, obtemos duas e.d.o.s, uma temporal e outra espacial (respectivamente):

$$i\hbar\frac{dT}{dt} = ET \; ; \; \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Phi}{dx^2} + V\Phi = E\Phi \tag{31}$$

Manipulando-se a equação temporal, segue que:

$$\frac{i}{T}\frac{dT}{dt} = \frac{E}{\hbar} \Rightarrow \frac{1}{T}\frac{dT}{dt} = \frac{-iE}{\hbar} \Rightarrow \frac{dT}{T} = \frac{-iE}{\hbar}dt \tag{32}$$

Integrando-se indefinidamente ambos os lados da igualdade, podemos escrever que:

$$\int\frac{dT}{T} = \int\frac{-iE}{\hbar}dt \Rightarrow \ln(T) + C_1 = \frac{-iE}{\hbar}\int dt \Rightarrow \ln(T) + C_1 = \frac{-iE}{\hbar}(t + C_2) \tag{33}$$

$$\therefore \ln(T) = \frac{-iEt}{\hbar}(t + C_2) - C_1 \tag{34}$$

Ao agregarmos as constantes numa só, se verifica que:

$$\ln(T) = \frac{-iEt}{\hbar} + C \tag{35}$$

Finalmente, aplicando a definição de logarítmo concluímos que:

$$T = e^{\frac{-iEt}{\hbar} + C} = e^{\frac{-iEt}{\hbar}} \cdot e^{C} \Rightarrow T(t) = e^{\frac{-iEt}{\hbar}}T(0) \tag{36}$$

$$\text{Assim}: \psi(x,t) = \Phi(x) \cdot e^{\frac{-iEt}{\hbar}}T(0) \tag{37}$$

Note-se que, como partimos do princípio de que $\psi(x,t) = A \cdot e^{ikx} \cdot e^{-i\omega t}$ e pelo axioma I, $\omega = E/\hbar$, o resultado acima é, deveras, intuitivo e esperado, assim como a escolha do método da resolução da e.d.p..

Revista Brasileira de Física, Vol. 3, Nº1, e202301030102
www.revistabrasileiradefisica.com | DOI: https://doi.org/10.5281/zenodo.7507996

9. A Partícula Livre

Apresentando um exemplo de problema físico quântico, vamos analisar o caso de uma partícula livre [1] (i.e., sem influência de potencial externo ($V(x) = 0$)), movendo-se ao longo do intervalo fechado $[0, a]$. Para tanto, consideremos a equação espacial (31) (uma equação de Sturm - Liouville):

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Phi}{dx^2} = E\Phi \tag{38}$$

Note-se que, *a priori*, ψ é uma função de onda estacionária (nesso caso, unidimensional). Em outras palavras, ψ é uma solução estacionária de uma equação de onda. A partir dessa informação, se reconhece que a sua parte espacial (Φ) pode ser interpretada como um Movimento Harmônico Simples. Isto é, pode ser descrita por uma função senoidal. Destarte, por propriedade da função seno, temos que $\Phi(m\pi) = 0 \ \forall \ m \in \mathbb{N}$.

Se a partícula se move ao longo do intervalo $[0, a]$, estamos então considerando que o período da onda produzida é a.

Sendo assim, precisamos impor as seguintes condições iniciais à última equação descrita (uma equação diferencial ordinária homogênea linear de ordem 2 com coeficientes constantes):

$$(I) \ \Phi(0) = 0 \ ; \ (II) \ \Phi(a) = 0 \tag{39}$$

Reescrevendo-a na forma padrão, obtemos:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Phi}{dx^2} - E\Phi = 0 \ (e.d.o. \ ordem \ 2 \ homo. \ coef. \ const.) \tag{40}$$

Para esse tipo de equação, assumimos então que $\Phi(x) = e^{\alpha x}$. Substituindo-se na e.d.o.:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\left(e^{\alpha x}\right) - E \cdot e^{\alpha x} = 0 \Rightarrow \frac{-\hbar^2}{2m}\alpha^2 e^{\alpha x} - E \cdot e^{\alpha x} = 0 \tag{41}$$

$$e^{\alpha x}\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\alpha^2 - E\right) = 0 \Rightarrow \frac{-\hbar^2}{2m}\alpha^2 = E \Rightarrow \alpha^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow \alpha = \pm\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \Rightarrow \alpha = \pm\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \tag{42}$$

$$\therefore \alpha_1 = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \ e \ \alpha_2 = -\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \tag{43}$$

Pelo Princípio da Superposição para e.d.o.s lin. homo., temos que a solução geral para Φ é:

$$\Phi(x) = Ae^{\alpha_1 x} + Be^{\alpha_2 x} \,\forall A, B \ \in \ \mathbb{C} \Rightarrow \Phi(x) = Ae^{\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}x} + Be^{-\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}x} \tag{44}$$

$$Se \ E < 0 \ então: \ \Phi(x) = Ae^{\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}x} + Be^{-\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}x} \tag{45}$$

Ou, utilizando o fato de que $e^{\beta x} = cosh(\beta x) + senh(\beta x)$, $cosh(\beta x) = cosh(-\beta x)$ e que $-senh(\beta x) = senh(-\beta x)$, podemos escrever a solução geral da e.d.o. em termos das funções hiperbólicas, que costumam ser uma representação de solução mais conveniente:

$$\Phi(x) = A\left[cosh\left(\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}x\right) + senh\left(\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}x\right)\right] + B\left[cosh\left(\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}x\right) - senh\left(\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}x\right)\right]$$

$$\Phi(x) = Acosh\left(\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}x\right) + Asenh\left(\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}x\right) + Bcosh\left(\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}x\right) - Bsenh\left(\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}x\right)$$

Revista Brasileira de Física, Vol. 3, Nº1, e202301030102
www.revistabrasileiradefisica.com | DOI: https://doi.org/10.5281/zenodo.7507996

$$\Phi(x) = \cosh\left(\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}x\right)(A+B) + \mathrm{senh}\left(\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}x\right)(A-B)$$

$$\Phi(x) = C_1\cosh\left(\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}x\right) + C_2\mathrm{senh}\left(\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}x\right) \tag{46}$$

Aplicando-se as condições iniciais, a condição (I) força C_1 a ser nulo. Impondo-se a condição (II), temos que, ou $C_2 = 0$ também (o que não queremos), ou $\mathrm{senh}\left(\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}x\right) = 0$.

Porém, ao contrário da função seno, o seno hiperbólico só é anulado em um único ponto do domínio, o ponto 0. O que significa que o caso $E < 0$ nos leva à solução nula.

Se $E = 0$ então $\Phi(x) = c_1x + c_2$, pois a e.d.o. ficaria simplesmente $\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Phi}{dx^2} = 0$.

Assim, é fácil entender-se que o caso $E = 0$ também nos leva à solução trivial $\Phi(x) = 0\ \forall\ x \in \mathbb{R}$.

Agora, se $E > 0$, por (44) temos que:

$$\Phi(x) = Ae^{\frac{i\sqrt{2mE}}{\hbar}x} + Be^{\frac{-i\sqrt{2mE}}{\hbar}x} \tag{47}$$

Usando a fórmula de Euler $e^{i\theta} = \cos(\theta) + i\mathrm{sen}(\theta)$, bem como o fato de que a função cosseno é par e a função seno é ímpar, podemos escrever Φ em termos das funções trigonométricas:

$$\Phi(x) = A\left[\cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right) + i\mathrm{sen}\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right)\right] + B\left[\cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right) - i\mathrm{sen}\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right)\right]$$

$$\Phi(x) = A\cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right) + Ai\mathrm{sen}\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right) + B\cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right) - Bi\mathrm{sen}\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right)$$

$$\Phi(x) = \cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right)(A+B) + \mathrm{sen}\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right)(Ai - Bi)$$

$$\Phi(x) = \gamma_1\cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right) + \gamma_2\mathrm{sen}\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right) \tag{48}$$

Aplicando-se a condição (I), temos que $\gamma_1 = 0$. Para satisfazer a condição (II), é necessário que o argumento do seno seja 0 (pois não estamos interessados em soluções triviais, i.e., em γ_2 também ser 0). Isso significa que:

$$\mathrm{sen}\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right) = 0 \Rightarrow \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a = n\pi\ \forall\ n \in \mathbb{N} \Rightarrow k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{n\pi}{a} \tag{49}$$

Finalmente, podemos escrever que:

$$\Phi(x) = \gamma_2\mathrm{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right) = C\mathrm{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \tag{50}$$

$$\therefore \Phi(x) = \Phi_n(x) = C\mathrm{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \tag{51}$$

Unindo-a à solução temporal da Equação de Schrödinger, temos então que $\psi(x,t)$ pode ser escrita como os produtos abaixo:

$$\psi(x,t) = \Phi_n(x)T(t) = C\mathrm{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right)e^{\frac{-iEt}{\hbar}}T(0) \tag{52}$$

Revista Brasileira de Física, Vol. 3, Nº1, e202301030102
www.revistabrasileiradefisica.com | DOI: https://doi.org/10.5281/zenodo.7507996

$$\psi(x,t) = \psi_n(x,t) = csen\left(\frac{n\pi x}{a}\right)e^{\frac{-iEt}{\hbar}} \tag{53}$$

Essa última igualdade nos permite escrever as soluções espaciais e temporais como:

$$\Phi_n(x) = csen\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\ ;\ T(t) = e^{\frac{-iEt}{\hbar}} \tag{54}$$

10. Axioma III (da Interpretação Estatística de Born)

A função de onda $\psi(x,t)$ solução da equação de Schrödinger, deve ser normalizada. [6]

Considerando esse axioma, podemos escrever, então, que:

$$||\psi|| = 1 \Rightarrow \sqrt{\langle\psi\,|\,\psi\rangle} = 1 \Rightarrow \langle\psi\,|\,\psi\rangle = 1 \tag{55}$$

onde $\langle\,|\,\rangle$ representa o produto interno entre dois estados, na notação braket.

Sabemos que o produto interno entre duas funções complexas f e g definidas em um domínio real $[a,b]$ pode ser expresso da seguinte forma:

$$\langle f\,|\,g\rangle = \int_a^b f(x)\overline{g(x)}dx \tag{56}$$

onde $\overline{g(x)} = g^*$ denota o complexo conjugado.

Logo, por propriedade dos número complexos:

$$\langle\psi\,|\,\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi\psi^* dx = \int_{-\infty}^{+\infty}|\psi|^2 dx = 1 \tag{57}$$

Veja-se então que esse axioma requer que ψ seja uma função quadrado integrável. Desse modo, é necessário migrarmos para o espaço L^2 (um subespaço do espaço das funções complexas). Com efeito, o produto interno agora é outro. Escrevemos que:

$$\langle f\,|\,g\rangle = \int_a^b \overline{f(x)}g(x)dx \tag{58}$$

Ou seja, dados dois estados ψ_1 e ψ_2, o produto interno entre eles se calcula por:

$$\langle\psi_1\,|\,\psi_2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1^*\psi_2 dx \tag{59}$$

Note-se que a última igualdade da equação (57) ainda é válida. Aliado a isso, temos o fato de que $|\psi|^2 \geq 0\ \forall\ x,t \in \mathbb{R}$. Portanto, podemos concluir que $|\psi|^2$ representa uma função densidade de probabilidade da variável aleatória posição (X). I.e.:

$$\mathbb{P}(x,t) = |\psi(x,t)|^2 \tag{60}$$

nos dá a probabilidade de encontrarmos uma partícula quântica na posição x no instante t.

Ou, de maneira similar:

$$\mathbb{P}[x \in [a,b],t] = \int_a^b |\psi(x,t)|^2\, dx \tag{61}$$

Revista Brasileira de Física, Vol. 3, Nº1, e202301030102
www.revistabrasileiradefisica.com | DOI: https://doi.org/10.5281/zenodo.7507996

Considerando-se esses últimos fatos, implica-se que as outras grandezas físicas também vão passar a ser variáveis aleatórias contínuas (velocidade, aceleração, momento linear, por exemplo) além de operadores. Exceto a Energia, que em breve veremos que será uma variável discreta.

Perceba-se finalmente, que (57) afirma que a probabilidade de encontrarmos uma partícula em algum lugar de seu domínio é 1.

A seguir, vamos mostrar que pode ocorrer de a densidade de probabilidade da posição não depender do tempo, ou não variar com o tempo. Quando ψ satisfaz essa condição, dizemos que ψ é um Estado Estacionário ou um Estado Fundamental (ou ainda, um autoestado). Caso contrário, se $|\psi|^2$ depender do tempo, dizemos que ψ é um Estado não - Estacionário.

11. Estados e Energia Quantizada

Proposição I: *Se* $\psi(x,t) = \Phi(x)T(t)$ *então* $|\psi(x,t)|^2 = |\Phi(x)|^2$.

$\text{Dem.}:$

$$\text{Por (53)},\ \psi(x,t) = c\,sen\left(\frac{n\pi x}{a}\right)e^{\frac{-iEt}{\hbar}}$$

$$|\psi|^2 = \psi\psi^* = \left[c\,sen\left(\frac{n\pi x}{a}\right)e^{\frac{-iEt}{\hbar}}\right]\left[\overline{c}\,sen\left(\frac{n\pi x}{a}\right)e^{\frac{iEt}{\hbar}}\right] = |c|^2 sen^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)e^{\frac{-iEt}{\hbar}+\frac{iEt}{\hbar}}$$

$$|\psi|^2 = |c|^2 sen^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)e^0 = |c|^2 sen^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

$$\therefore |\psi(x,t)|^2 = |\Phi(x)|^2 \quad \blacksquare \tag{62}$$

É comum também definirmos Estado Estacionário como sendo a expressão de ψ em um produto de duas funções, uma espacial e outra temporal, sem necessidade de sofrerem aplicação do princípio da superposição de e.d.p.s lineares homogêneas.

Proposição II (Princípio da Quantização da Energia):

Uma partícula livre de potencial imersa em um sistema quântico estacionário só pode assumir energias definidas sob um conjunto discreto de valores em $\mathbb{R}^+$. [1]

Obs: Lembremos que, na Mecânica Clássica, a energia de uma partícula pode assumir qualquer valor em $\mathbb{R}^+$ (“E" é definida sob um conjunto contínuo de valores).

$\text{Dem.}:$

$$\text{Por (49)},\ \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{n\pi}{a}$$

$$\text{Isolando E, segue que}: \sqrt{2mE} = \frac{n\pi\hbar}{a} \Rightarrow 2mE = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{a^2} \Rightarrow E = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

$$\therefore E = E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \tag{63}$$

$$\text{Definindo o “quantum" (ou “quanta") de energia como } E_f := \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2},\ \text{podemos escrever}:$$

$$E = E_n = n^2 E_f \quad \blacksquare \tag{64}$$

Revista Brasileira de Física, Vol. 3, Nº1, e202301030102
www.revistabrasileiradefisica.com | DOI: https://doi.org/10.5281/zenodo.7507996

Isso significa que os valores de energia que a partícula irá assumir são todos múltiplos inteiros não negativos de uma energia fundamental E_f. De fato, o conjunto $\{E_n \,|\, n \in \mathbb{N}\}$ é discreto com relação a reta real.

O número natural n, indica em qual estado excitado de energia tal partícula se encontra, i.e., o valor E_k significa que a função de onda quântica está no k - ésimo estado excitado de energia. Para a partícula mudar de um estado para outro, ela precisa perder ou ganhar "pacotes" inteiros de energia (fótons), onde cada energia que está armazanada nesses pacotes é um valor que é múltiplo natural do estado energético fundamental. Em particular, uma partícula no estado fundamental ($n = 1$) possui a energia de um único fóton.

Uma interpretação matemática pertinente pode ser feita notando-se que os valores de energia assumidos pela partícula correspondem aos autovalores associados as autofunções Φ_n. Perceba-se ainda que os autovalores de energia são reais; o que está de acordo com o fato de que o Operador Energia ($\hat{E}$) é Hermitiano.

Proposição III: *Se $\psi(x,t) = c_k\psi_k + c_p\psi_p$ (ψ está em estado de superposição), onde ψ_k e ψ_p são estados estacionários distintos, então $\psi(x,t)$ é um estado não - estacionário.* [10]

Em outras palavras, essa proposição afirma que combinação linear de estados estacionários não produz um estado estacionário.

$D\bar{e}m.$: Consideremos novamente $V(x) = 0$ e $c_k, c_p \in \mathbb{R}$. Se as constantes forem complexas, a demonstração pode acabar na terceira linha.

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

$$|\psi|^2 = \left[c_k\left(\Phi_k e^{\frac{-iE_k t}{\hbar}}\right) + c_p\left(\Phi_p e^{\frac{-iE_p t}{\hbar}}\right)\right]\cdot\left[\overline{c_k}\left(\Phi_k e^{\frac{iE_k t}{\hbar}}\right) + \overline{c_p}\left(\Phi_p e^{\frac{iE_p t}{\hbar}}\right)\right]$$

$$|\psi|^2 = |c_k|^2\Phi_k^2 + |c_p|^2\Phi_p^2 + c_k\overline{c_p}\Phi_k\Phi_p e^{\frac{i(E_p - E_k)t}{\hbar}} + \overline{c_k}c_p\Phi_k\Phi_p e^{\frac{i(E_k - E_p)t}{\hbar}}$$

$$|\psi|^2 = c_k^2\Phi_k^2 + c_p^2\Phi_p^2 + c_k c_p\Phi_k\Phi_p\left(e^{\frac{i(E_p - E_k)t}{\hbar}} + e^{\frac{i(E_k - E_p)t}{\hbar}}\right)$$

$$Utilizando - se\ do\ fato\ de\ que\ e^{i\theta} + e^{-i\theta} = 2\cos(\theta)\ segue\ que$$

$$|\psi|^2 = c_k^2\Phi_k^2 + c_p^2\Phi_p^2 + 2c_k c_p\Phi_k\Phi_p\cos\left[\frac{(E_p - E_k)\,t}{\hbar}\right] = |\psi(x,t)|^2(x,t) \quad \blacksquare \tag{65}$$

12. A Constante de Normalização

Estudando uma solução estacionária da Equação de Schrödinger onde uma partícula livre se move ao longo do intervalo $[0, a]$, por (57) e (62) podemos escrever que [1]:

$$\int_0^a |\Phi(x)|^2\, dx = 1 \Rightarrow \int_0^a |c|^2 sen^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\, dx = 1 \Rightarrow |c|^2\int_0^a sen^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\, dx = 1 \tag{66}$$

Resta-nos resolver a integral. Comecemos por fazer a substituição:

$$u = \frac{n\pi x}{a} \Rightarrow \frac{du}{dx} = \frac{n\pi}{a} \Rightarrow du = \frac{n\pi}{a}dx \Rightarrow dx = \frac{du}{\left(\frac{n\pi}{a}\right)} \Rightarrow dx = \frac{du}{1}\cdot\frac{a}{n\pi} \Rightarrow dx = \frac{a}{n\pi}du$$

$$\therefore \int sen^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx = \frac{a}{n\pi}\int sen^2(u)du \tag{67}$$

Recorremos agora para a fórmula de redução:

$$\int sen^m(u)du = \frac{m-1}{m}\int sen^{m-2}(u)du - \frac{cos(u)sen^{m-1}(u)}{m}$$

Aplicando-a para $m = 2$, segue que:

$$\int sen^2(u)du = \frac{1}{2}\int du - \frac{cos(u)sen(u)}{2} = \frac{u}{2} - \frac{cos(u)sen(u)}{2}$$

A constante final foi omitida na última integral porque estamos interessados na primitiva da função integrando, visto que depois calcularemos uma integral definida.

Substituindo o resultado final em (67), temos que:

$$\int sen^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx = \frac{a}{n\pi}\cdot\left[\frac{u}{2} - \frac{cos(u)sen(u)}{2}\right] = \frac{au}{2n\pi} - \frac{a\,cos(u)sen(u)}{2n\pi}$$

Revertendo-se a substituição à variável x, obtemos:

$$\int sen^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx = \frac{\cancel{a}\left(\frac{\cancel{n\pi} x}{\cancel{a}}\right)}{2\cancel{n\pi}} - \frac{a\cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right)sen\left(\frac{n\pi x}{a}\right)}{2n\pi} = \frac{x}{2} - \frac{a\cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right)sen\left(\frac{n\pi x}{a}\right)}{2n\pi}$$

$$\therefore \int sen^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx = \frac{x}{2} - \frac{a\cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right)sen\left(\frac{n\pi x}{a}\right)}{2n\pi} \tag{68}$$

Aplicando-se os limites de integração:

$$\int_0^a sen^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx = \frac{a}{2} - \frac{a\cos\left(\frac{n\pi a}{a}\right)sen\left(\frac{n\pi\cancel{a}}{\cancel{a}}\right)}{2n\pi} - 0 = \frac{a}{2} - 0$$

$$\therefore \int_0^a sen^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx = \frac{a}{2} \tag{69}$$

Substituindo-se (69) em (66), se verifica que:

$$\frac{1}{2}a|c|^2 = 1 \Rightarrow |c|^2 = \frac{2}{a} \Rightarrow |c| = \sqrt{\frac{2}{a}} \Rightarrow c = \pm\sqrt{\frac{2}{a}} \tag{70}$$

Escolhendo-se c negativo ou c positivo não altera em absoluto o significado físico do sistema quântico. Por simplicidade e conveniência, escolhamos $c = \sqrt{\frac{2}{a}}$.

Assim, (54) se transforma em:

$$\Phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}sen\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \tag{71}$$

Também por (54):

$$\psi(x,t) = \psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}}sen\left(\frac{n\pi x}{a}\right)e^{\frac{-iEt}{\hbar}} \tag{72}$$

Revista Brasileira de Física, Vol. 3, Nº1, e202301030102
www.revistabrasileiradefisica.com | DOI: https://doi.org/10.5281/zenodo.7507996

Contudo, observe-se que já sabemos a expressão para os autovalores de energia, através de (63). Então podemos substituí-los na parte temporal da equação acima, de modo que:

$$\psi(x,t) = \psi_n(x,t) = \Phi_n(x)T_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}sen\left(\frac{n\pi x}{a}\right)e^{\frac{-in^2\pi^2\hbar t}{2ma^2}} \tag{73}$$

A partir de então, invocando novamente o princípio da superposição, a equação de Schrödinger para uma partícula livre é satisfeita pela forma genérica abaixo:

$$\boxed{\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\psi_n = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\sqrt{\frac{2}{a}}sen\left(\frac{n\pi x}{a}\right)e^{\frac{-in^2\pi^2\hbar t}{2ma^2}}} \tag{74}$$

S.p.g., isso nos permite dizer que a solução geral da parte espacial de Ψ pode ser interpretada matematicamente como uma expansão em Série de Fourier Seno de uma função ímpar f no intervalo $[0,a]$. I.e.:

$$\Psi(x) = f(x) = \sum_{n=1}^{+\infty}\sqrt{\frac{2}{a}}c_n sen\left(\frac{n\pi x}{a}\right),\ em\ que,\ pela\ teoria\ de\ Fourier, \tag{75}$$

$$\sqrt{\frac{2}{a}}c_n = \frac{2}{a}\int_0^a f(x)sen\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx.\ Multiplicando-se\ em\ ambos\ os\ lados\ por\ \sqrt{\frac{2}{a}}, \tag{76}$$

$$c_n = \sqrt{\frac{2}{a}}\int_0^a f(x)sen\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx \Rightarrow c_n = \int_0^a f(x)\Phi_n(x)\,dx \tag{77}$$

No espaço vetorial das funções, c_n está representando o produto interno de f com Φ_n.

13. Teorema V (da Hermiticidade dos Operadores)

Se $\hat{A}$ é um operador quântico, então $\hat{A}$ é Hermitiano.

$D\bar{e}m.$: Consideremos, inicialmente, as duas equações de autovalores abaixo [11]:

$$(I)\ \hat{A}\psi = \alpha\psi\ ;\ (II)\ \left(\hat{A}\psi\right)^* = \bar{\alpha}\psi^* = \alpha\psi^* \tag{78}$$

Propomos que os autovalores do operador sejam reais pois queremos que as quantidades físicas, quando medidas, retornem um número real, e não um número imaginário, por exemplo.

Agora, multipliquemos à esquerda: (I) por ψ^* e (II) por ψ. Assim:

$$(III)\ \psi^*\hat{A}\psi = \psi^*\alpha\psi\ ;\ (IV)\ \psi\left(\hat{A}\psi\right)^* = \psi\alpha\psi^* \tag{79}$$

$$\therefore \psi^*\hat{A}\psi = \psi\left(\hat{A}\psi\right)^*.\ Integrando\ em\ ambos\ os\ lados: \tag{80}$$

$$\int_{\mathbb{R}}\psi^*\hat{A}\psi\,dx = \int_{\mathbb{R}}\psi\left(\hat{A}\psi\right)^*dx \tag{81}$$

Note-se que o complexo conjugado de $\hat{A}\psi$ produz uma nova função. I.e.: vale a comutatividade:

$$\int_{\mathbb{R}}\psi^*\hat{A}\psi\,dx = \int_{\mathbb{R}}\left(\hat{A}\psi\right)^*\psi\,dx \tag{82}$$

Revista Brasileira de Física, Vol. 3, Nº1, e202301030102
www.revistabrasileiradefisica.com | DOI: https://doi.org/10.5281/zenodo.7507996

$$\text{Logo, por (59)}: \ \langle \psi \,|\, A\psi \rangle = \langle A\psi \,|\, \psi \rangle \tag{83}$$

Portanto, $\hat{A}$ é hermitiano. Lembre-se que, para operadores autoadjuntos (hermitianos), as definições abaixo são equivalentes:

$$\langle \psi \,|\, A\phi \rangle = \langle A\psi \,|\, \phi \rangle \Leftrightarrow \langle \psi \,|\, A\psi \rangle = \langle A\psi \,|\, \psi \rangle \quad \blacksquare \tag{84}$$

Esse teorema implica na ortogonalidade de duas autofunções quânticas com diferentes autovalores. I.e.: autofunções distintas de operadores hermitianos são ortogonais.

$$\psi_1 \neq \psi_2 \Rightarrow \langle \psi_1 \,|\, \psi_2 \rangle = 0 \Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^* \psi_2 \, dx = 0 \tag{85}$$

14. Teorema VI (do Valor Esperado das Grandezas Físicas)

Se A é um operador quântico, então seu valor esperado no estado ψ pode ser obtido por

$$E\,[A] = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* A\psi \, dx = \langle \psi | A | \psi \rangle \,, \ \text{na escrita braket} \tag{86}$$

$\text{D}\bar{\text{e}}\text{m.}$: S.p.g., a solução geral da Equação de Schrödinger pode ser escrita como segue.

$$\Psi = \psi = \sum_{n=1}^{+\infty} c_n \psi_n = \sum_{n=1}^{+\infty} \tilde{\psi}_n \tag{87}$$

Comecemos a prova desse teorema invocando o fato de que a esperança matemática do produto de duas variáveis aleatórias define um produto interno [12]. I.e.:

$$E\,[XY] = \langle X \,|\, Y \rangle \tag{88}$$

Como todo observável (operador quântico) assume também a forma de um vetor aleatório, podemos escrever o valor esperado de A da seguinte forma:

$$\langle A \,|\, I \rangle = E\,[AI] = E[A] = \langle A \rangle \tag{89}$$

onde I nesse caso está representando a matriz identidade.

Agora, façamos uso do produto interno de Frobenius [13].

$$\text{Para A e B sendo matrizes complexas}: \langle A \,|\, B \rangle := \mathrm{Tr}\left(B^\dagger A\right) \tag{90}$$

$$\text{de modo que}: \langle A \,|\, I \rangle = \mathrm{Tr}\left(I^\dagger A\right) = \mathrm{Tr}\,(IA) = \mathrm{Tr}\,(A) = E[A] \tag{91}$$

Para calcularmos o traço de A, usaremos a definição de traço para um operador [14].

$$\text{Se } \{e_j\}_{j\in\Lambda} \text{ for uma base arbitrária}: \mathrm{Tr}(A) := \sum_{j\in\Lambda} \langle Ae_j \,|\, e_j \rangle \tag{92}$$

onde A está definido em um espaço de Hilbert.

A seguir, vamos usar o conjunto $\{\tilde{\psi}_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ como uma base para o espaço vetorial das soluções da Equação de Schrödinger $\{\Psi_i\}_{i\in\mathbb{N}}$. Veja-se que $\{\tilde{\psi}_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ gera $\{\Psi_i\}_{i\in\mathbb{N}}$. E note-se que o fato das autofunções de $\{\psi_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ serem duas a duas ortogonais implica que $c_k\psi_k$ e $c_p\psi_p$ também o são, pois: $\langle c_k\psi_k \,|\, c_p\psi_p \rangle = \overline{c_k} c_p \, \langle \psi_k \,|\, \psi_p \rangle = 0$. Logo, $\{\tilde{\psi}_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ é linearmente independente [15].

Revista Brasileira de Física, Vol. 3, Nº1, e202301030102
www.revistabrasileiradefisica.com | DOI: https://doi.org/10.5281/zenodo.7507996

Assim, como A é hermitiano vale que:

$$E[A] = Tr(A) = \sum_{n=1}^{+\infty} \left\langle \tilde{\psi}_n \mid A\tilde{\psi}_n \right\rangle \tag{93}$$

Continuando, apliquemos a definição de produto interno de (59).

$$E[A] = \sum_{n=1}^{+\infty} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}_n^* A \tilde{\psi}_n \, dx \right) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\sum_{n=1}^{+\infty} \left(\tilde{\psi}_n^* A \tilde{\psi}_n \right) \right] dx \tag{94}$$

$$E[A] = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\tilde{\psi}_1^* A \tilde{\psi}_1 + \tilde{\psi}_2^* A \tilde{\psi}_2 + \tilde{\psi}_3^* A \tilde{\psi}_3 + \ldots \right) \, dx \tag{95}$$

$$E[A] = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[A \left(\tilde{\psi}_1 + \tilde{\psi}_2 + \tilde{\psi}_3 + \ldots \right) \cdot \left(\tilde{\psi}_1^* + \tilde{\psi}_2^* + \tilde{\psi}_3^* + \ldots \right) \right] \, dx \tag{96}$$

Essa última passagem decorre do fato de que o produto interno entre dois estados distintos pertencentes à $\{\tilde{\psi}_n\}$, também é 0. Ao multiplicarmos os termos dentro da integral e somarmos os seus produtos, poderíamos reescrever a integral em uma soma infinita de integrais separadas e, assim, observar que as multiplicações do tipo $\left(A\tilde{\psi}_k\right)\tilde{\psi}_p^*$ vão fazer a integral zerar. Reunimos novamente em uma só integral os termos restantes, e a igualdade acima se verifica. Veja-se que $\left\langle \tilde{\psi}_p \mid A\tilde{\psi}_k \right\rangle = \langle c_p\psi_p \mid Ac_k\psi_k \rangle = \overline{c_p} \langle \psi_p \mid c_k A\psi_k \rangle = \overline{c_p} c_k \langle \psi_p \mid \lambda_k \psi_k \rangle = \overline{c_p} c_k \lambda_k \langle \psi_p \mid \psi_k \rangle = 0$.

Aplicando-se (87) e considerando-se que a soma dos complexos conjugados é o conjugado da soma, (96) é transformada nas seguintes expressões:

$$E[A] = \int_{-\infty}^{+\infty} (A\psi)\, \psi^* \, dx \Rightarrow E[A] = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* A \psi \, dx = \langle \psi | A | \psi \rangle \quad \blacksquare \tag{97}$$

15. Teorema VII (Princípio da Incerteza)

Para A *e* B *sendo observáveis quânticos, vale que* $\sigma_A \sigma_B \geq \frac{1}{2} \left| \left\langle \left[\hat{A}, \hat{B} \right] \right\rangle \right|$.

$\mathrm{D\bar{e}m.}$: Comecemos por definir os seguintes dois operadores:

$$\Delta\hat{A} = \hat{A} - \left\langle \hat{A} \right\rangle \; ; \; \Delta\hat{B} = \hat{B} - \left\langle \hat{B} \right\rangle \tag{98}$$

Pela Desigualdade de Cauchy - Schwarz podemos escrever que:

$$\left\langle \Delta\hat{A} \mid \Delta\hat{A} \right\rangle \cdot \left\langle \Delta\hat{B} \mid \Delta\hat{B} \right\rangle \geq \left| \left\langle \Delta\hat{A} \mid \Delta\hat{B} \right\rangle \right|^2 \tag{99}$$

$$\text{Por (88) obtemos } \left\langle \Delta\hat{A}^2 \right\rangle \cdot \left\langle \Delta\hat{B}^2 \right\rangle \geq \left| \left\langle \Delta\hat{A}\Delta\hat{B} \right\rangle \right|^2 \tag{100}$$

O próximo passo será encontrar $\left\langle \Delta\hat{A}^2 \right\rangle$ e $\left\langle \Delta\hat{B}^2 \right\rangle$. Usando-se as definições de (98):

$$\Delta\hat{A}^2 = \hat{A}^2 - 2\hat{A}\left\langle \hat{A} \right\rangle + \left\langle \hat{A} \right\rangle^2 \Rightarrow \left\langle \Delta\hat{A}^2 \right\rangle = \left\langle \hat{A}^2 - 2\hat{A}\left\langle \hat{A} \right\rangle + \left\langle \hat{A} \right\rangle^2 \right\rangle \tag{101}$$

Fazendo-se uso das propriedades do valor esperado, temos que:

$$\left\langle \Delta\hat{A}^2 \right\rangle = \left\langle \hat{A}^2 \right\rangle - \left\langle 2\hat{A}\left\langle \hat{A} \right\rangle \right\rangle + \left\langle \left\langle \hat{A} \right\rangle^2 \right\rangle = \left\langle \hat{A}^2 \right\rangle - 2\left\langle \hat{A}\left\langle \hat{A} \right\rangle \right\rangle + \left\langle \hat{A} \right\rangle^2 \tag{102}$$

Revista Brasileira de Física, Vol. 3, Nº1, e202301030102
www.revistabrasileiradefisica.com | DOI: https://doi.org/10.5281/zenodo.7507996

$$\left\langle \Delta\hat{A}^2 \right\rangle = \left\langle \hat{A}^2 \right\rangle - 2\left\langle \hat{A} \right\rangle \left\langle \hat{A} \right\rangle + \left\langle \hat{A} \right\rangle^2 = \left\langle \hat{A}^2 \right\rangle - 2\left\langle \hat{A} \right\rangle^2 + \left\langle \hat{A} \right\rangle^2 \tag{103}$$

$$\left\langle \Delta\hat{A}^2 \right\rangle = \left\langle \hat{A}^2 \right\rangle - \left\langle \hat{A} \right\rangle^2 \tag{104}$$

De maneira integralmente análoga:

$$\left\langle \Delta\hat{B}^2 \right\rangle = \left\langle \hat{B}^2 \right\rangle - \left\langle \hat{B} \right\rangle^2 \tag{105}$$

Destarte, por definição, os valores esperados de $\Delta\hat{A}^2$ e $\Delta\hat{B}^2$ são as variâncias de $\hat{A}$ e $\hat{B}$. Em termos do desvio padrão, podemos dizer que:

$$\sigma_A^2 = \left\langle \Delta\hat{A}^2 \right\rangle \;\; ; \;\; \sigma_B^2 = \left\langle \Delta\hat{B}^2 \right\rangle \tag{106}$$

$$\text{Substituindo } (106) \text{ } em \text{ } (100): \;\; \sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left| \left\langle \Delta\hat{A}\Delta\hat{B} \right\rangle \right|^2 \tag{107}$$

Agora, precisamos encontrar uma expressão para $\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}$. Perceba-se que:

$$\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} = \frac{\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}}{2} - \frac{\Delta\hat{B}\Delta\hat{A}}{2} + \frac{\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}}{2} + \frac{\Delta\hat{B}\Delta\hat{A}}{2} \tag{108}$$

$$\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} = \frac{1}{2}\left(\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} - \Delta\hat{B}\Delta\hat{A}\right) + \frac{1}{2}\left(\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} + \Delta\hat{B}\Delta\hat{A}\right) \tag{109}$$

Invoquemos, a seguir, duas funções matemáticas binárias de uma álgebra não - comutativa: o comutador [,] e o anticomutador { , } de dois operadores em um espaço de Hilbert.

$$\forall\, X, Y \in \mathcal{H}: \;\; [X, Y] = XY - YX \;\; e \;\; \{X, Y\} = XY + YX \tag{110}$$

Aplicando-se tais definições em (109), segue que:

$$\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} = \frac{1}{2}\left[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\right] + \frac{1}{2}\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\} \tag{111}$$

Vejamos, ainda, que, também utilizando as definições:

$$\left[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\right] = \Delta\hat{A}\Delta\hat{B} - \Delta\hat{B}\Delta\hat{A} = \left(\hat{A} - \left\langle \hat{A} \right\rangle\right)\left(\hat{B} - \left\langle \hat{B} \right\rangle\right) - \left(\hat{B} - \left\langle \hat{B} \right\rangle\right)\left(\hat{A} - \left\langle \hat{A} \right\rangle\right)$$

$$\left[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{A}\left\langle \hat{B} \right\rangle - \left\langle \hat{A} \right\rangle \hat{B} + \left\langle \hat{A} \right\rangle \left\langle \hat{B} \right\rangle - \left(\hat{B}\hat{A} - \hat{B}\left\langle \hat{A} \right\rangle - \left\langle \hat{B} \right\rangle \hat{A} + \left\langle \hat{B} \right\rangle \left\langle \hat{A} \right\rangle\right)$$

$$\left[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} \cancel{- \hat{A}\left\langle \hat{B} \right\rangle} \cancel{- \left\langle \hat{A} \right\rangle \hat{B}} \cancel{+ \left\langle \hat{A} \right\rangle \left\langle \hat{B} \right\rangle} - \hat{B}\hat{A} \cancel{+ \hat{B}\left\langle \hat{A} \right\rangle} \cancel{+ \left\langle \hat{B} \right\rangle \hat{A}} \cancel{- \left\langle \hat{B} \right\rangle \left\langle \hat{A} \right\rangle}$$

$$\left[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \Rightarrow \left[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\right] = \left[\hat{A}, \hat{B}\right] \tag{112}$$

Substituindo (112) em (111), obtemos:

$$\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} = \frac{1}{2}\left[\hat{A}, \hat{B}\right] + \frac{1}{2}\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\} \tag{113}$$

Aplicando-se a esperança matemática em ambos os lados da equação acima, temos:

$$\left\langle \Delta\hat{A}\Delta\hat{B} \right\rangle = \frac{1}{2}\left\langle \left[\hat{A}, \hat{B}\right] \right\rangle + \frac{1}{2}\left\langle \{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\} \right\rangle \tag{114}$$

Revista Brasileira de Física, Vol. 3, Nº1, e202301030102
www.revistabrasileiradefisica.com | DOI: https://doi.org/10.5281/zenodo.7507996

O nosso próximo passo é usar as seguintes propriedades: o comutador entre dois operadores hermitianos é antihermitiano e o anticomutador é hermitiano.

Vejamos abaixo que hermitianos possuem valor esperado real pela propriedade da simetria conjugada do produto interno.

$$E[A] = \langle \psi \,|\, A\psi \rangle = \langle A\psi \,|\, \psi \rangle = \overline{\langle \psi \,|\, A\psi \rangle} = \overline{E[A]} \Rightarrow E[A] \in \mathbb{R} \tag{115}$$

A seguir, vejamos também que antihermitianos possuem valor esperado puramente imaginário. O resultado segue da definição de matriz antihermitiana e das propriedades do produto interno e do conjugado transposto.

$$E[X] = \langle X\psi \,|\, \psi \rangle = \left\langle \psi \,|\, X^{\dagger}\psi \right\rangle = \langle \psi \,|\, -X\psi \rangle = -\langle \psi \,|\, X\psi \rangle = -\overline{\langle X\psi \,|\, \psi \rangle} = -\overline{E[X]} \Rightarrow E[X] \in \mathcal{I} \tag{116}$$

$$\text{Isto implica que}: \ \frac{1}{2}\left\langle \left[\hat{A}, \hat{B}\right] \right\rangle = \frac{1}{2}(\alpha i) \tag{117}$$

Então $\left\langle \Delta\hat{A}\Delta\hat{B} \right\rangle = \frac{1}{2}\left\langle \left[\hat{A}, \hat{B}\right] \right\rangle + \frac{1}{2}\left\langle \{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\} \right\rangle$ é um número complexo da forma:

$$\left\langle \Delta\hat{A}\Delta\hat{B} \right\rangle = \frac{1}{2}\left\langle \{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\} \right\rangle + \frac{1}{2}\alpha i = \frac{1}{2}\left\langle \{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\} \right\rangle + \frac{1}{2}\left\langle \left[\hat{A}, \hat{B}\right] \right\rangle \tag{118}$$

$$\text{Logo}, \ \left|\left\langle \Delta\hat{A}\Delta\hat{B} \right\rangle\right|^2 = \frac{1}{4}\left|\left\langle \{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\} \right\rangle\right|^2 + \frac{1}{4}\left|\left\langle \left[\hat{A}, \hat{B}\right] \right\rangle\right|^2 \tag{119}$$

Usamos o fato de que se $z = a + bi$ for um número complexo, $|z|^2 = a^2 + b^2 = |a|^2 + |bi|^2$.

$$\text{Portanto, por (107)}: \ \sigma_A^2\sigma_B^2 \geq \frac{1}{4}\left|\left\langle \{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\} \right\rangle\right|^2 + \frac{1}{4}\left|\left\langle \left[\hat{A}, \hat{B}\right] \right\rangle\right|^2 \tag{120}$$

$$\textit{Então é verdade que}: \ \sigma_A^2\sigma_B^2 \geq \frac{1}{4}\left|\left\langle \left[\hat{A}, \hat{B}\right] \right\rangle\right|^2 \tag{121}$$

Aplicando-se a raiz quadrada em ambos os lados da desigualdade:

$$\sigma_A\sigma_B \geq \frac{1}{2}\left|\left\langle \left[\hat{A}, \hat{B}\right] \right\rangle\right| \quad \blacksquare \tag{122}$$

A desigualdade acima é conhecida como o *Princípio da Incerteza Generalizado* [6]. Quanto menor for a incerteza na medida de uma grandeza, maior será a incerteza na medida da outra.

Um caso particular desse resultado é o famoso *Princípio da Incerteza de Heisenberg* [6], que analisa os casos posição - momento linear. Aplicando-se a fórmula geral vista acima, podemos prová-lo:

$$\sigma_x\sigma_p \geq \frac{1}{2}|\langle[\hat{x}, \hat{p}]\rangle| \tag{123}$$

Primeiramente, precisamos encontrar o valor de $[\hat{x}, \hat{p}]$. Para fazer isso, utilizaremos uma função de teste f pra ser aplicado o operador de derivação do momento. Por ($\spadesuit$) e ($\clubsuit$) segue que:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} \Rightarrow [\hat{x}, \hat{p}]\,f = \hat{x}\hat{p}f - \hat{p}\hat{x}f = x\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)f - \left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)(xf) \tag{124}$$

$$[\hat{x}, \hat{p}]\,f = -i\hbar x\frac{df}{dx} + i\hbar\frac{d(xf)}{dx} = -i\hbar x\frac{df}{dx} + i\hbar\left(x\frac{df}{dx} + f\right) = \cancel{-i\hbar x\frac{df}{dx}} \cancel{+ i\hbar x\frac{df}{dx}} + i\hbar f \tag{125}$$

$$\therefore [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \tag{126}$$

Revista Brasileira de Física, Vol. 3, Nº1, e202301030102
www.revistabrasileiradefisica.com | DOI: https://doi.org/10.5281/zenodo.7507996

Lembrando-se do fato de que a esperança matemática de uma constante é a própria constante:

$$\sigma_x\sigma_p \geq \frac{1}{2}\left|\langle i\hbar\rangle\right| \Rightarrow \sigma_x\sigma_p \geq \frac{1}{2}\left|i\hbar\right| \Rightarrow \sigma_x\sigma_p \geq \frac{\hbar}{2} \quad \blacksquare \tag{127}$$

O princípio da incerteza aponta mais uma diferença entre as mecânicas. Repare-se que, enquanto na mecânica clássica temos uma matemática determinista, na mecânica quântica temos uma matemática probabilística (não - determinista). Não podemos calcular com precisão todos os valores de todas as grandezas físicas relacionadas à partícula.

16. Axioma IV (do Colapso da Função de Onda)

Uma partícula em estado de superposição não possui quantidades físicas bem definidas. Todavia, ao realizar-se uma medição experimental, a partícula apresentará necessariamente características de apenas um dos autoestados. [10]

Teorema VIII: A probabilidade de uma quantidade física de uma partícula em sobreposição de n autoestados colapsar para um autovalor λ_k é igual ao quadrado do módulo da constante de sobreposição da função de onda ψ_k $(k, n \in \mathbb{N} \mid k \leq n)$.

Dizemos, nesse caso, que ψ *colapsou para* ψ_k.

$\mathrm{D\bar{e}m.}$: Consideremos uma partícula num estado ψ, tal que $\psi = \tilde{\psi}_1 + \tilde{\psi}_2 = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$. Provaremos para o caso $n = 2$ por conveniência. Para n autoestados distintos, a prova se dá de maneira integralmente análoga e valem-se os mesmos argumentos (em especial, o argumento da ortonormalidade). Suponhamos que queremos analisar uma grandeza A. Podemos escrever [16]:

$$E[A] = \int_{\mathbb{R}} \left[(c_1\psi_1 + c_2\psi_2)^* A\,(c_1\psi_1 + c_2\psi_2)\right] dx$$

$$\text{Das propriedades do conjugado, temos que}: \; E[A] = \int_{\mathbb{R}} \left[\left(\bar{c}_1\psi_1^* + \bar{c}_2\psi_2^*\right) A\,(c_1\psi_1 + c_2\psi_2)\right] dx$$

$$E[A] = \int_{\mathbb{R}} \left[\left(\bar{c}_1\psi_1^* + \bar{c}_2\psi_2^*\right)\cdot(c_1A\psi_1 + c_2A\psi_2)\right] dx = \int_{\mathbb{R}} \left[\left(\bar{c}_1\psi_1^* + \bar{c}_2\psi_2^*\right)\cdot(c_1\lambda_1\psi_1 + c_2\lambda_2\psi_2)\right] dx$$

$$E[A] = \int_{\mathbb{R}} \left(\bar{c}_1c_1\lambda_1\psi_1^*\psi_1 + \bar{c}_1c_2\lambda_2\psi_1^*\psi_2 + \bar{c}_2c_1\lambda_1\psi_2^*\psi_1 + \bar{c}_2c_2\lambda_2\psi_2^*\psi_2\right) dx$$

$$E[A] = \bar{c}_1c_1\lambda_1\int_{\mathbb{R}} \psi_1^*\psi_1\,dx + \bar{c}_1c_2\lambda_2\int_{\mathbb{R}} \psi_1^*\psi_2\,dx + \bar{c}_2c_1\lambda_1\int_{\mathbb{R}} \psi_2^*\psi_1\,dx + \bar{c}_2c_2\lambda_2\int_{\mathbb{R}} \psi_2^*\psi_2\,dx$$

$$\text{Da ortonormalidade dos autoestados, obtemos}: \; E[A] = \bar{c}_1c_1\lambda_1\cdot 1 + 0 + 0 + \bar{c}_2c_2\lambda_2\cdot 1$$

$$\therefore \boxed{E[A] = \lambda_1|c_1|^2 + \lambda_2|c_2|^2} \tag{128}$$

Como a esperança matemática de uma variável aleatória, por definição, é a soma dos produtos dos valores possíveis pelas respectivas probabilidades, o resultado segue.

Temos, finalmente, que $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$.

Costuma-se chamar constantes de sobreposição como *Amplitudes de Probabilidades*.

Com este teorema, podemos facilmente depreender que o valor esperado de uma grandeza A em um autoestado $\psi = \psi_k$ é igual ao seu próprio autovalor λ_k. $\blacksquare$

17. Tempo Clássico e Probabilidade Quântica

Axioma V (do Princípio da Correspondência): *As quantidades quantizadas dos observáveis tendem ao limite clássico quando os estados energéticos do sistema tendem ao infinito.*

Vamos mostrar a seguir, através de dois problemas [8], uma importante relação entre o mundo clássico e quântico. Será um exemplo da aplicabilidade do presente axioma. Consideremos também o caso particular em que estamos trabalhando até aqui: uma partícula livre de potencial, presa numa caixa de comprimento L, que se move ao longo do intervalo da reta real ($[0, L]$). Além disso, quando a partícula bate nas paredes da caixa (situadas nas posições $x = 0$ e $x = L$) ela troca o sentido do movimento. Propomos, ainda, que $F = 0$, para que sua velocidade seja constante.

A versão clássica da situação é a seguinte: fixado um intervalo $[a, b] \subset [0, L]$, qual a quantidade de tempo gasta pela partícula dentro desse intervalo? Ou seja, quanto tempo a partícula fica em $[a, b]$? A resposta é razoavelmente simples. Se a velocidade é constante, então podemos aplicar uma cinemática escalar básica e escrever que:

$$v = \frac{\Delta L}{t} \Rightarrow t = \frac{|b-a|}{v} \tag{129}$$

Em seguida, suponhamos que desejássemos uma situação mais elaborada. Do tempo total gasto pela partícula ao percorrer o trajeto de $x = 0$ até $x = L$, qual a parcela de tempo gasta em $[a, b]$? Novamente, pela hipótese da velocidade constante, temos que:

$$t = \frac{\frac{|b-a|}{v}}{\frac{L}{v}} \Rightarrow t = \frac{|b-a|}{\cancel{v}} \cdot \frac{\cancel{v}}{L} \Rightarrow \boxed{t = \frac{|b-a|}{L}} \tag{130}$$

Podemos interpretar esse resultado de forma probabilística: a última fração escrita é a probabilidade de encontrarmos a partícula no intervalo $[a, b]$, decorrido um tempo qualquer após o início de seu movimento.

Passemos, a seguir, para a versão quântica do problema: desejamos saber qual a probabilidade de encontrarmos a partícula no intervalo $[a, b]$ utilizando a descrição matemática da mecânica quântica de Schrödinger. Porém, vamos adicionar duas hipóteses ao problema: consideraremos apenas níveis extremamente altos de energia, ou seja, quando os estados excitados de energia (n) tendem ao infinito positivo e, ainda, que a partícula está sendo descrita por um estado de onda puro.

Por (61), (62) e (71), temos que:

$$\mathbb{P}_n\left(x \in [a, b]\right) = \int_a^b \frac{2}{L} sen^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = \frac{2}{L}\int_a^b sen^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx \tag{131}$$

$$\text{Por } (68): \int sen^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = \frac{x}{2} - \frac{L cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) sen\left(\frac{n\pi x}{L}\right)}{2n\pi} \tag{132}$$

Quando $n \to \infty$, (132) se resume em:

$$\int sen^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = \frac{x}{2} \tag{133}$$

Aplicando-se os limites de integração, concluímos que:

$$\int_a^b sen^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = \frac{b}{2} - \frac{a}{2} = \frac{|b-a|}{2}, \text{ pois estamos considerando } b > a \tag{134}$$

Revista Brasileira de Física, Vol. 3, Nº1, e202301030102
www.revistabrasileiradefisica.com | DOI: https://doi.org/10.5281/zenodo.7507996

$$\therefore \mathbb{P}_{n\to\infty}\left(x \in [a,b]\right) = \frac{\cancel{2}}{L} \cdot \frac{|b-a|}{\cancel{2}} \Rightarrow \boxed{\mathbb{P}_{n\to\infty}\left(x \in [a,b]\right) = \frac{|b-a|}{L}} \tag{135}$$

Em outras palavras, tais cálculos, realizados com tempo e probabilidade, nos mostram que para estados excitados de energia significativamente altos, a distribuição de probabilidade de uma partícula quântica (por enquanto, livre) se aproxima de uma distribuição uniforme clássica.

18. Teorema IX (da Evolução Temporal dos Valores Esperados)

Seja A *um observável quântico,* $\langle A \rangle$ *o seu valor esperado,* H *o hamiltoniano quântico do sistema e* $[P, Q]$ *o comutador dos operadores* P *e* Q *respectivamente, então vale que:* [17]

$$\frac{d\left\langle \hat{A} \right\rangle}{dt} = \frac{\left\langle [\hat{A}, \hat{H}] \right\rangle}{i\hbar} + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle \tag{136}$$

$\mathfrak{Dem.}$: Decorre do que já sabemos:

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* A \psi \, dx \Rightarrow \frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* A \psi \, dx \tag{137}$$

Pela regra de Leibniz da comutatividade da derivada sobre a integral, temos que:

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial t}\left(\psi^* A \psi\right) dx \tag{138}$$

A seguir, aplicando-se em sequência a regra do produto na derivada temporal, obtemos:

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{\partial \psi^*}{\partial t}\left(A\psi\right) + \psi^* \frac{\partial}{\partial t}\left(A\psi\right)\right] dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{\frac{\partial \psi^*}{\partial t}\left(A\psi\right) + \psi^* \left[\frac{\partial A}{\partial t}\left(\psi\right) + A\frac{\partial \psi}{\partial t}\right]\right\} dx$$

Da linearidade da integral, escrevemos que:

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\left(A\psi\right) dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \frac{\partial A}{\partial t}(\psi) dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* A \frac{\partial \psi}{\partial t} dx$$

Identificando-se a segunda integral como um valor esperado, se verifica que:

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\left(A\psi\right) dx + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* A \frac{\partial \psi}{\partial t} dx \tag{139}$$

Recorrendo-se à Equação de Schrödinger, segue que:

$$\hat{H}\psi = \hat{E}\psi \Rightarrow H\psi = i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} \Rightarrow \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{H\psi}{i\hbar} \tag{140}$$

Como a derivada do conjugado é o conjugado da derivada, podemos dizer que:

$$\frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \left[\frac{1}{i\hbar} \cdot \left(H\vec{\psi}\right)\right]^* = -\frac{\psi^* H^\dagger}{i\hbar}, \text{ por propriedade do conjugado hermitiano} \tag{141}$$

E como H é um operador autoadjunto, vale que:

$$\frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\psi^* H}{i\hbar} \tag{142}$$

Revista Brasileira de Física, Vol. 3, Nº1, e202301030102
www.revistabrasileiradefisica.com | DOI: https://doi.org/10.5281/zenodo.7507996

Substituindo (142) em (139), temos que:

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt} = -\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\psi^* H}{i\hbar}A\psi dx + \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^* A\frac{H\psi}{i\hbar}dx \tag{143}$$

Unindo as duas integrais numa só, concluímos:

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \int_{-\infty}^{+\infty}\left(\psi^* A\frac{H\psi}{i\hbar} - \frac{\psi^* H}{i\hbar}A\psi\right)dx + \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle = \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(AH - HA)\psi\, dx + \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle \tag{144}$$

$$\therefore\ \frac{d\langle A\rangle}{dt} = \frac{\langle[A, H]\rangle}{i\hbar} + \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle \quad \blacksquare \tag{145}$$

19. Corolário I (de Ehrenfest)

Os valores esperados dos observáveis quânticos obedecem às leis da mecânica clássica. [18]

$\mathrm{D\bar{e}m.}$: Segue diretamente do teorema anterior que:

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = \frac{\langle[p, H]\rangle}{i\hbar} + \left\langle\frac{\partial p}{\partial t}\right\rangle \tag{146}$$

Axioma VI: *A menos de uma condição física impositiva, observáveis (operadores) quânticos não evoluem no tempo (formalismo matemático de Schrödinger).*

$$\Rightarrow \frac{d\langle p\rangle}{dt} = \frac{\langle[p, H]\rangle}{i\hbar} \tag{147}$$

Pela definição de valor esperado quântico, podemos seguir com:

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*[p, H]\psi\, dx \tag{148}$$

Porém, perceba-se que, algebricamente, temos o seguinte:

$$\left(pH = \frac{p^3}{2m} + pV\ ;\ Hp = \frac{p^3}{2m} + Vp\right) \Rightarrow [p, H] = pH - Hp = \cancel{\frac{p^3}{2m}} + pV - \cancel{\frac{p^3}{2m}} - Vp = pV - Vp = [p, V]$$

Portanto, podemos escrever que:

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*[p, V]\psi\, dx \tag{149}$$

Realizando-se a substituição $p = -i\hbar\nabla$ e aplicando-se a definição de comutador, obtemos:

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(pV - Vp)\psi\, dx = \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(-i\hbar\nabla V + Vi\hbar\nabla)\psi\, dx \tag{150}$$

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = \frac{1}{\cancel{i\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(-\cancel{i\hbar})(\nabla V - V\nabla)\psi\, dx = -\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(\nabla V - V\nabla)\psi\, dx \tag{151}$$

Da linearidade do operador de integração, segue que:

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = -\left[\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(\nabla V)\psi\, dx - \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(V\nabla)\psi\, dx\right] = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(V\nabla)\psi\, dx - \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(\nabla V)\psi\, dx$$

Revista Brasileira de Física, Vol. 3, Nº1, e202301030102
www.revistabrasileiradefisica.com | DOI: https://doi.org/10.5281/zenodo.7507996

Aplicando-se a regra do produto em ∇ sobre $V\psi$, temos que:

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(V\nabla)\psi\, dx - \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\nabla V\psi + V\nabla\psi)\, dx \tag{152}$$

Novamente, apliquemos a linearidade da integral, e obteremos:

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = \cancel{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(V\nabla)\psi\, dx} - \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\nabla V)\psi\, dx - \cancel{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(V\nabla)\psi\, dx} \tag{153}$$

$$\therefore \frac{d\langle p\rangle}{dt} = \langle -\nabla V\rangle = \langle F\rangle \quad \blacksquare \tag{154}$$

20. O Valor Esperado da Posição e da Energia Cinética da Partícula Livre

A seguir, calcularemos os valores esperados da posição [19] e da energia cinética de uma partícula livre se movendo ao longo do intervalo da reta $[0, a]$. Vamos considerar também que ela está sendo descrita por um autoestado de onda ψ.

Por definição, o valor esperado de uma variável aleatória contínua (o caso da posição, inicialmente) é a integral definida do produto dos valores assumidos pela densidade de probabilidade. Então, por (62) e (71) temos que:

$$E[X] = \int_0^a x\,|\Phi(x)|^2\, dx = \frac{2}{a}\int_0^a x\,\mathrm{sen}^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx \tag{155}$$

Resta-nos resolver a integral.

$$\mathrm{sen}^2(\theta) = \frac{1-\cos(2\theta)}{2} \Rightarrow \int x\,\mathrm{sen}^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = \frac{1}{2}\int x\left[1-\cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)\right] dx$$

$$\int x\,\mathrm{sen}^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = \frac{1}{2}\int\left[x - x\cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)\right] dx = \frac{1}{2}\left[\int x\, dx - \int x\cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) dx\right]$$

$$\int x\,\mathrm{sen}^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = \frac{1}{2}\left[\frac{x^2}{2} - \int x\cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) dx\right]$$

Fazendo-se uma integração por partes na expressão acima, segue que:

$$\int u\,dv = uv - \int v\,du\ ;\ u = x,\ du = dx,\ dv = \cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) dx,\ v = \int \cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) dx$$

$$\int x\,\mathrm{sen}^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = \frac{1}{2}\left\{\frac{x^2}{2} - \left[x\int\cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) dx - \int\int\cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) dx dx\right]\right\}$$

Considerando-se que: $\int \cos(ky)dy = \mathrm{sen}(ky)/k + C$:

$$\int x\,\mathrm{sen}^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = \frac{1}{2}\left\{\frac{x^2}{2} - \left[x\frac{\mathrm{sen}\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)}{\frac{2n\pi}{a}} - \int\frac{\mathrm{sen}\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)}{\frac{2n\pi}{a}} dx\right]\right\}$$

$$\int x\,\mathrm{sen}^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = \frac{1}{2}\left\{\frac{x^2}{2} - \frac{a}{2n\pi}\left[x\,\mathrm{sen}\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) - \int \mathrm{sen}\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) dx\right]\right\}$$

Revista Brasileira de Física, Vol. 3, Nº1, e202301030102
www.revistabrasileiradefisica.com | DOI: https://doi.org/10.5281/zenodo.7507996

Considerando-se também que: $\int sen(ky)dy = -cos(ky)/k + C$:

$$\int xsen^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx = \frac{1}{2}\left\{\frac{x^2}{2} - \frac{a}{2n\pi}\left[xsen\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) + \frac{acos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)}{2n\pi}\right]\right\} + C$$

Aplicando-se os limites de integração, obtemos:

$$\int_0^a xsen^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx = F(a) - F(0)$$

$$F(a) = \frac{1}{2}\left\{\frac{a^2}{2} - \frac{a}{2n\pi}\left[\cancelto{0}{asen(2n\pi)} + \frac{\cancelto{1}{acos(2n\pi)}}{2n\pi}\right]\right\} = \frac{1}{2}\left[\frac{a^2}{2} - \frac{a}{2n\pi}\left(\frac{a}{2n\pi}\right)\right]$$

$$F(a) = \frac{1}{2}\left(\frac{a^2}{2} - \frac{a^2}{4n^2\pi^2}\right) = \frac{a^2}{4} - \frac{a^2}{8n^2\pi^2}\ ;\ F(0) = \frac{1}{2}\left[-\frac{a}{2n\pi}\left(\frac{a}{2n\pi}\right)\right] = \frac{1}{2}\left(\frac{-a^2}{4n^2\pi^2}\right) = -\frac{a^2}{8n^2\pi^2}$$

$$\therefore \int_0^a xsen^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx = \frac{a^2}{4}\cancel{-\frac{a^2}{8n^2\pi^2}}\cancel{+\frac{a^2}{8n^2\pi^2}} = \frac{a^2}{4}$$

$$\therefore E[X] = \frac{2}{\cancel{a}}\cdot\frac{a^{\cancel{2}}}{4} \Rightarrow \boxed{E[X] = \frac{a}{2}} \tag{156}$$

Para o nosso segundo cálculo, vejamos que por (22), $\hat{K} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$.

$$\text{Por (97)}:\ E[K] = \int_0^a \psi^*\hat{K}\psi\, dx = \int_0^a \psi^*\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\psi\, dx$$

$$\text{E por (73)}:\ E[K] = \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}}sen\left(\frac{n\pi x}{a}\right)e^{\frac{in^2\pi^2\hbar t}{2ma^2}}\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\sqrt{\frac{2}{a}}sen\left(\frac{n\pi x}{a}\right)e^{\frac{-in^2\pi^2\hbar t}{2ma^2}}dx$$

$$E[K] = \frac{-\hbar^2}{\cancel{2}m}\frac{\cancel{2}}{a}\int_0^a sen\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)sen\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\ dx = \frac{-\hbar^2}{ma}\int_0^a sen\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)sen\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\ dx$$

Calculemos agora a derivada espacial segunda:

$$\frac{d}{dx}\left(sen\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\right) = \frac{n\pi}{a}cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \Rightarrow \frac{d^2}{dx^2}\left(sen\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\right) = \frac{n\pi}{a}\left(\frac{-n\pi}{a}\right)sen\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

$$\therefore \frac{d^2}{dx^2}\left(sen\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\right) = \frac{-n^2\pi^2}{a^2}sen\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

Substituindo-se na integral da esperança da energia cinética (K):

$$E[K] = \left(\frac{-\hbar^2}{ma}\right)\cdot\left(\frac{-n^2\pi^2}{a^2}\right)\int_0^a sen^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\ dx = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{ma^3}\int_0^a sen^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\ dx$$

$$\text{Por (69)}:\ E[K] = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{ma^3}\cdot\frac{a}{2} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2 a}{2ma^3} \Rightarrow E[K] = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

$$\Rightarrow \boxed{E[K] = \frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2} \tag{157}$$

21. Considerações Finais

Na prova da Equação de Schrödinger, começamos assumindo que ψ é uma onda estacionária. E no axioma II, postulamos que a energia da partícula é igual à energia da onda associada. Equivocadamente, poderíamos concluir, com essas duas hipóteses, que a energia da onda e da partícula seria 0, por se tratar de uma onda estacionária. Todavia, nesse tipo de onda, o que é nulo é o Fluxo Médio de Energia (o transporte total de energia). Porém, isso não significa que a energia será 0 em todos os pontos da onda. Em pontos e/ou em espaços específicos, pode haver energia confinada (armazenada) cujo valor difere de 0.

Mais um comentário pertinente ao assunto deste trabalho. Perceba-se que a Equação de Onda Clássica é Hiperbólica, mas a Equação de Schrödinger (Equação de Onda Quântica) é Parabólica. A Equação de Schrödinger é uma equação de onda, mas não uma equação de onda clássica.

Ainda, em resumo ao princípio da dualidade onda - corpúsculo: elétrons se comportam como ondas não - eletromagnéticas. E ondas eletromagnéticas (luz) se comportam como um conjunto finito de fótons e vice-versa. Nesse sentido, decorre desses fatos que a energia de uma onda eletromag. pode, então, também ser calculada pela fórmula $E = nh\nu, n \in \mathbb{N}$, onde n representa a quantidade de fótons da onda.

Note-se finalmente, que o axioma VI requer considerarmos que o valor esperado da velocidade $(\langle \frac{d\hat{x}}{dt} \rangle)$, da aceleração $(\langle \frac{d\hat{v}}{dt} \rangle)$ e do momento $(m < \hat{v} >)$, seja 0.

Agradecimentos

Ao leitor.

Aos meus mestres: professor Sandro, Raphael e Michel, pela inspiração e ensinamentos.

Aos meus irmãos Junior e Marcelo, pela ajuda na formatação do trabalho.

Aos meus pais, por todo o apoio que me deram ao longo de minha vida.

A todos que, de uma forma ou de outra, contribuíram para a construção da física quântica que conhecemos nos dias de hoje.

"A matemática é o alfabeto que Deus usou para escrever o universo." (Galileu Galilei)

Referências

[1] Hannabuss K. An introduction to quantum theory. Oxford: Clarendon Press; 1997. 380 p.

[2] On the origin of photon mass, momentum, and energy in a dielectric medium [Invited]. Optical Materials Express [Internet]. 2021 [citado 22 abr 2022];11(8):8. Disponível em: https://url.gratis/cCLmjv

[3] Belich Junior H. Física moderna [Internet]. Vitória: Breno Serafini Barboza; 2012 [citado 22 abr 2022]. 94 p. Disponível em: https://acervo.sead.ufes.br/arquivos/fisica-moderna.pdf

[4] Baldiotti. Portal uel [Internet]. Mecânica e a óptica geométrica; 2012 [citado 22 abr 2022]. Disponível em: http://www.uel.br/pessoal/baldiotti/2FIS026-21-11-2012.pdf

[5] S. Peskin C. Wave momentum [Internet]; 2010 [citado 22 abr 2022]. Disponível em: https://www.math.nyu.edu/~peskin/papers/wave_momentum.pdf

[6] J Griffiths D. Mecânica quântica. 2a ed. São Paulo: Afiliada; [data desconhecida]. 356 p.

[7] Cresser J. http://physics.mq.edu.au/ [Internet]. The schrödinger wave equation; 2005 [citado 22 abr 2022]. Disponível em: https://url.gratis/61CwTv

[8] Amaral B, Tavares Baraviera A, O Terra Cunha M. Mecânica quântica para matemáticos em formação. Impa [Internet]. 2011 [citado 22 abr 2022]:226. Disponível em: https://impa.br/wp-content/uploads/2017/04/28CBM_12.pdf

[9] Gao S. philarchive [Internet]. Derivation of the schrödinger equation; 2010 [citado 22 abr 2022]. Disponível em: https://philarchive.org/archive/GAODOT

[10] Sá Martins J. [Video], Princípio da superposição; 6 set 2011 [citado 22 abr 2022]; [13 min, 46 s]. Disponível em: https://www.youtube.com/watch?v=4CXT9m6VTUY

[11] M Hanson D, Harvey E, Sweeney R, Julia Zielinski T. Chemistry LibreTexts [Internet]. Properties of quantum mechanical systems; 21 abr 2022 [citado 22 abr 2022]. Disponível em: https://url.gratis/p8NYCH

[12] Figuerosa-O'Farril J. School of mathematics [Internet]. Mathematics for informatics 4a; 15 fev 2012 [citado 22 abr 2022]. Disponível em: https://url.gratis/NfZLv1

[13] W Koczkodaj W, Smarzewski R, Szybowski J. On orthogonal projections on the space of consistent pairwise comparisons matrices. Arxiv [Internet]. 18 fev 2020 [citado 22 abr 2022];1:24. Disponível em: https://arxiv.org/pdf/2002.06607.pdf

[14] Mastroeni M. An axiomatic formulation of quantum mechanics [Internet]. Nova Iorque: Ithaca College; 2009 [citado 22 abr 2022]. 44 p. Disponível em: https://url.gratis/ximrPx

[15] Gustavo Cordeiro L. Matemática da UFSC [Internet]. Ortogonalidade e gram – schmidt; [citado 22 abr 2022]. Disponível em: https://url.gratis/5JszLp

[16] Sherrill D. The Sherril Group [Internet]. Eigenfunctions and eigenvalues; 15 ago 2006 [citado 22 abr 2022]. Disponível em: https://url.gratis/bMCHTS

Revista Brasileira de Física, Vol. 3, Nº1, e202301030102
www.revistabrasileiradefisica.com | DOI: https://doi.org/10.5281/zenodo.7507996

[17] Babasaheb bhimrao ambedkar university [Internet]. Equations of motion; [citado 22 abr 2022]. Disponível em: https://www.bbau.ac.in/dept/Physics/TM/Quantum%20Mechanics-I_PHM103_DoP_5_II.pdf

[18] Fitzpatrick R. Ehrenfest's theorem [Internet]; 20 jul 2010 [citado 22 abr 2022]. Disponível em: https://farside.ph.utexas.edu/teaching/qmech/Quantum/node36.html

[19] Colby college [Internet]. Expectation values – particle in a box; [citado 22 abr 2022]. Disponível em: https://www.colby.edu/chemistry/PChem/notes/PBExpect.pdf