Postulados da mecânica quântica

Por simplicidade matemática vamos descrever sobre os postulados da mecânica quântica (MQ) usando o formalismo proposto por Schrödinger

1-) Descrição do estado de um sistema

O estado de um sistema quântico é descrito por uma função de onda $\psi(\vec{r},t)$ complexa. A função de onda e sua derivada em relação a posição é contínua, unívoca e finita (ou quadrado integrável). Se em um dado instante t fizermos uma medida para localizar a posição de uma partícula no sistema físico, a probabilidade de encontrá-la entre $\vec{r}$ e $\vec{r}+d\vec{r}$ é dada por:

$$\rho(\vec{r},t) = \psi^*(\vec{r},t)\,\psi(\vec{r},t) = |\psi(\vec{r},t)|^2 \qquad (1)$$

Como a probabilidade de encontrar a partícula em todo espaço é 1, então.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\vec{r},t)\,d\vec{r} = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\vec{r},t)|^2\,dr = 1 \qquad (2)$$

A função de onda que obedece a condição (2) é dito como normalizada

2) Descrição de uma Quantidade Física.

2º Postulado: O operador quântico.

Cada quantidade física A mensurável é descrito por um operador $\hat{A}$, o qual atua sobre a função de onda. Este operador é um observável.

a) Operador relativo ao momento ($\hat{p}$)

Em uma dimensão o operador momento é descrito por:

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \qquad (3)$$

Quando o operador momento é aplicado sobre a função de onda $\psi(x,t) = A e^{i(kx-wt)}$ plana de uma partícula livre, ele reproduz

$$\hat{p}\,\psi(x,t) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (A e^{(ikx-iwt)}$$

$$\hat{p}\,\psi(x,t) = \hbar k\,\psi(x,t) \qquad (4)$$

onde $\hbar k$ é o momento da partícula livre.

Proposto por De Broglie. Quando o operador é aplicado sobre uma função de onda, em geral não se obtem diretamente o valor da grandeza física, como na equação (4). Quando o operador é aplicado sobre uma função de onda e reproduz a função de onda multiplicando por uma constante, dizemos que a função de onda é uma auto função do operador quântico.

Em 3 dimensões o operador momento é descrito na forma:

$$\hat{P} = -i\hbar\nabla \qquad (5)$$

Onde ∇ é um operador diferencial em coordenadas cartezianas:

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z}$$

5) Operador Energia ($\hat{E}$)

O operador energia é representado por:

$$\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \qquad (6)$$

Quando o operador energia é aplicado sobre a função de onda da partícula livre, se reproduz

$$\hat{E}\,\psi(\vec{r},t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} A e^{i(kx-\omega t)}$$

$$\hat{E}\,\psi(\vec{r},t) = \hbar\omega\, \psi(\vec{r},t) . \qquad (7)$$

A função de onda da partícula livre também é uma autofunção do operador energia com autovalor é dado por:

$$E = \hbar\omega \qquad (8)$$

que também está de acordo com a teoria de de Broglie.

d) Operador de energia cinética $(\hat{T})$

O operador de energia cinética é descrito em termos do operador momento por:

$$\hat{T} = \frac{1}{2m}\hat{\vec{p}}\cdot\hat{\vec{p}}$$

Usando (3) vem:

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} \qquad (9)$$

Ou em 3-D

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \qquad (10)$$

3) A medida de uma grandeza física

3º Postulado: Valor esperado de uma grandeza física.

O único resultado possível de uma medida de uma quantidade física, A é o auto valor do observável $\hat{A}$ correspondente.

Sendo a função de onda $\psi(\vec{r},t)$ normalizada

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\vec{r},t)|^2 d\vec{r} = 1$$

O valor esperado da medida de uma grandeza física $\langle A \rangle$ associado ao operador $\hat{A}$ é dado por:

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\vec{r},t)\,\hat{A}\,\psi(\vec{r},t)\,d\vec{r} \qquad (11)$$

4º Evolução temporal de um sistema físico.

4º Postulado: A equação de Schrodinger.

A evolução temporal de uma função de onda $\psi(\vec{r},t)$ em um sistema físico é descrita por uma equação diferencial proposta por Erwin Schrodinger.

$$\hat{H}\,\psi(\vec{r},t) = \hat{E}\,\psi(\vec{r},t) \qquad (12)$$

Onde $\hat{H}$ é o operador Hamiltoniano que descreve a energia total do sistema.

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} \qquad (13)$$

Sendo $\hat{V}$ o operador de energia potencial. Usando (11) e (6) em 12, obtemos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r},t) + \hat{V}\,\psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) \qquad (14)$$

A equação acima é uma equação diferencial de derivadas parciais que tem para cada potencial uma infinidade de soluções. As soluções para cada potencial é limitada pelas condições de contorno que $\psi(\vec{r},t)$ e $\partial\psi(\vec{r},t)/\partial\vec{r}$ devem obedecer, bem como pela condição de normalização.