

SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS E NATURAIS PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA

Raimundo Otoni Melo Figueiredo

Função part-wave: uma proposta para solução da equação de Schrödinger ante a dualidade onda-partícula

Orientador: Prof. Marcus Pinto da Costa da Rocha, Dr

Belém 2008 Raimundo Otoni Melo Figueiredo

Função part-wave: uma proposta para solução da equação de Schrödinger ante a dualidade onda-partícula

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação Matemática e Estatística do Instituto de Ciências Exatas e Naturais da UFPA, para a obtenção do grau de Mestre em Matemática Aplicada, sob a orientação do Prof. Dr. Marcus Pinto da Costa da Rocha. Como co-orientador o Prof. Dr. Benedito Tadeu Ferreira de Moraes.

> Belém 2008

SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL DO PARÁ UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS E NATURAIS PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA

Função part-wave: uma proposta para solução da equação de Schrödinger ante a dualidade onda-partícula

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação Matemática e Estatística do Instituto de Ciências Exatas e Naturais da UFPA, para a obtenção do grau de Mestre em Matemática, sob a orientação do Prof. Dr. Marcus Pinto da Costa da Rocha. Como co-orientador o Prof. Dr. Benedito Tadeu Ferreira de Moraes. Área de concentração: Matemática Aplicada

Data de aprovação: ___/___/

Conceito:

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Marcus Pinto da Costa da Rocha (Orientador) Universidade Federal do Pará – UFPA/PPGME

Prof. Dr. Valcir João da Cunha Farias Universidade Federal do Pará – UFPA/PPGME

Prof. Dr. Benedito Tadeu Ferreira de Moraes Centro Federal de Educação Tecnológica do Pará-CEFET/PA

À Deus, minha mãe, meus filhos e minha família. razões da minha existência.

AGRADECIMENTOS

À minha mãe que sempre me incentivou a continuidade de meus estudos.

Aos meus filhos pela força e por serem o motivo de eu sempre procurar dar o exemplo de persistência na busca dos meus sonhos.

À minha esposa pelo apoio, pelo incentivo e compreensão nas minhas horas difíceis.

Ao meu orientador pelo apoio e compreensão nas dificuldades encontradas no desenvolvimento do trabalho.

Ao meu co-orientador pela contribuição significativa para a conclusão desta dissertação.

Aos meus professores do PPGME pela contribuição para a melhoria de minha qualificação profissional e pessoal.

Ao corpo administrativo do PPGME que sempre me trataram com respeito e durante a minha permanência neste programa.

Aos meus colegas de turma com quem passei bons momentos de convivência.

Aos meus amigos e amigas do CEFET/PA pela força, amizade e pelo incentivo dado durante a realização deste trabalho.

À Profa. Rita Gil pelo apoio, incentivo e contribuição para este trabalho.

Ao Prof. Carlos Mota, por ter sempre me incentivado a buscar uma melhor qualificação pessoal e profissional.

SUMÁRIO

RESUMO	. 8
ABSTRACT	. 9
LISTADE ILUSTRAÇÕES	10
1. INTRODUÇÃO	11

2. AS BASES FÍSICAS DA TEORIA QUÂNTICO-ONDULATÓRIA

2.1. OS POSTULADOS DE DE BROGLIE E DE EINSTEIN	13
2.2. A FUNÇÃO DE ONDA $\psi(x,t)$ ASSOCIADA A UMA PARTÍCULA 2.3. VELOCIDADE DE PROPAGAÇÃO DE UMA ONDA	15 1 6
2.4. VELOCIDADE DO GRUPO DE ONDAS ASSOCIADO À PARTÍCULA	ΕM
MOVIMENTO	. 17
2.5. DESCRIÇÃO DO MOVIMENTO EM TERMOS DE UMA FUNÇÃO DE ONDA	21
2.6. O PRINCÍPIO DA INCERTEZA	23
2.7. VIBRAÇÕES DE UMA CORDA PRESA NOS EXTREMOS	. 26
2.8. A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER DEPENDENTE DO TEMPO	. 29
2.9. EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER INDEPENDENTE DO TEMPO	. 31
2.10. PROPRIEDADES DAS FUNÇÕES DE ONDA E AUTOFUNÇÕES	. 33
2.11. O POSTULADO DE MAX BORN	. 35
2.12. VALORES ESPERADOS E A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER COMO L	JMA
DE AUTOVALOR	37

3. O FORMALISMO MATEMÁTICO DA MECÂNICA EQUAÇÃO QUÂNTICA

3.1. O ESPAÇO DE HILBERT	42
3.2. DEFINIÇÃO DE PRODUTO INTERNO	43
3.3. PROPOSIÇÃO	44
3.4. O ESPAÇO $L^2_C([0,1])$	45
3.5. O ESPAÇO L ² (C)	45
3.6. O TEOREMA ESPECTRAL	47
3.7. ESPAÇO DAS FUNÇÕES DE ONDA ASSOCIADAS À PARTÍCULAS (F)	48
3.8. ESTRUTURA DO ESPAÇO F DAS FUNÇÕES DE ONDA	49
3.9. PRINCIPAIS PROPRIEDADES DO PRODUTO ESCALAR	49
3.10. OPERADORES LINEARES SOBRE O ESPAÇO VETORIAL F	50

3.11. O CARÁTER ESTATÍSTICO DAS FUNÇÕES DE ONDA	51
3.12. PROPRIEDADES DA FUNÇÃO DENSIDADE DE PROBABILIDADE	.52

4. UMA PROPOSTA PARA SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER ANTE A DUALIDADE ONDA-PARTÍCULA

4.1.7	4.1. A INTERPRETAÇÃO DA TEORIA QUÂNTICA					54		
4.2. A DUALIDADE ONDA-PARTÍCULA					54			
4.3.	А	NOVA	PROPOSTA	MATEMÁTICA	PARA	А	INTERPRETAÇÃO	DA
DUA	LID	ADE						55

CONSIDERAÇÕES FINAIS	3
----------------------	---

FERÊNCIAS

RESUMO

Este estudo é sobre a interpretação da teoria quântica a partir da hipótese formulada por de Broglie, em 1924 sobre a dualidade onda-partícula, tendo como guestões norteadoras: a) Quais as discussões quanto à interpretação da forma como a teoria quântica se relaciona com os fenômenos, utilizando uma função " Ψ ", complexa, para definir os estados dos objetos guânticos e o guadrado do módulo de Ψ para calcular a probabilidade de localizar uma partícula, como o elétron, numa determinada região do espaço? 2) Quais as formas como são ministrados os cursos de mecânica quântica introdutória nas universidades? Quanto ao objetivo geral que pretendemos alcançar é: 1) Desenvolver uma alternativa matemática para a explicação do comportamento dual, através de um ente denominado função "part-wave", que satisfaça a equação de Schrödinger. O estudo foi desenvolvido dentro de uma abordagem dos seguintes tópicos: 1) As relações de de Broglie-Einstein; 2) A teoria ondulatória de Schrödinger da Mecânica Quântica; 3) A interpretação de Max Born para a função de onda; 4) Proposição da função "part-wave" ante à dualidade ondapartícula. Os autores que subsidiaram o estudo foram: Eisberg(1979), Tannoudji, Diu e Laloë (1977), lleana e Marco(2001) e outros. Os resultados mostram que é possível obter uma proposta didática que venha contribuir para melhorar o aprendizado dos conteúdos de mecânica quântica em cursos introdutórios de mecânica quântica.

Palavras chave: Dualidade, partwave, partícula, onda.

ABSTRACT

This study is about the interpretation of the quantum theory starting from the hypothesis formulated for of Broglie, in 1924 on the duality wave-particle, tends as subjects norteadoras: 1) Which the discussions with relationship to the interpretation in the way how the quantum theory links with the phenomena, using a function " Ψ ", complex, to define the states of the guantum objects and the square of the module of Ψ to calculate the probability of locating a particle, as the electron, in a certain area of the space? 2) Which the forms how the courses of introductory quantum mechanics are supplied in the universities? With relationship to the general objective that intended to reach it is: 1) To develop a mathematical alternative for the explanation of the dual behavior, through a being denominated function " part-wave ", that satisfies the equation of Schrödinger. The study was developed inside of an approach of the following topics: 1) The relationships of of Broglie-Einstein; 2) The waves theory of Schrödinger of the Quantum Mechanics; 3) Max Born interpretation for the wave function; 4) Proposition of the function " part-wave " before to the duality wave-particle. The authors that subsidized the study were: Eisberg(1979), Tannoudji, Diu e Laloë (1977), Ileana e Marco(2001) and other. The results show that is possible to obtain a didactic proposal that comes to contribute to improve the learning of the contents of quantum mechanics in introductory courses of quantum mechanics.

Words key: Duality, part-wave, particle, wave.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura	 Comportamento da onda de uma partícula livre definido no eixo x 	15
Figura associa	 2 – Representação esquemática de uma função de onda e sua partíc ida (Eisberg)[9] 	ula 15
Figura	3 – Representação gráfica do "batimento" para duas ondas	20
Figura	4 - Pacote de ondas associado à partícula com velocidade de grupo g	23
Figura	5 - Processo de superposição de ondas planas	24
Figura	6 - Vibrações de uma corda de comprimento L presa nos extremos	26
Figura	7.a - representa a evolução da função de onda e da partícula na direção x.3	36
Figura	7.b - é a curva da probabilidade de localizar a partícula entre x e x+dx	36
Figura	8 – Esquema da experiência da dupla fenda. Os gráficos representam amplitude do sinal detectado quando uma única fenda é aberta e quan ambas as fendas são abertas (adaptado de Lectures on Physics de Feynman[10])	n a ndo R. 54

1. INTRODUÇÃO

A hipótese formulada por de Broglie, em 1924 sobre a dualidade ondapartícula, tem sido alvo de grandes discussões quanto à sua interpretação, justamente pela forma como a teoria se relaciona com os fenômenos, utilizando uma função " Ψ ", complexa, para definir os estados dos objetos quânticos e o quadrado do módulo de Ψ para calcular a probabilidade de localizar uma partícula, como o elétron, numa determinada região do espaço. O princípio da Incerteza, de Heisenberg, pareceu dar uma resposta satisfatória quanto à dificuldade de entendimento dos processos de medidas de partículas atômicas e subatômicas, mas acentuou ainda mais a crise de entendimento sobre o determinismo e o indeterminismo no estudo da física. O paradoxo EPR, o gato de Schrödinger, a experiência de dupla fenda ainda hoje são alvos de especulações quanto à natureza física desses processos. Detalhes dessa problemática são evidenciados na dissertação de mestrado de Pedro Sérgio Rosa, com o título "Louis de Broglie e as ondas de matéria", pela UNICAMP, Campinas, SP, 2004[1].

Atrelados aos problemas de interpretação pelos quais vem passando a teoria quântica estão a forma como são ministrados os cursos de mecânica quântica introdutória nas universidades.

Foram estes problemas que nos levaram a elaboração da presente proposta, fundamentada também pelo artigo de lleana e Marco, *"Uma Revisão da Literatura sobre Estudos Relativos ao Ensino da Mecânica Quântica Introdutória"*[2], cuja pesquisa classifica os artigos encontrados em três grupos: artigos sobre concepções dos estudantes a respeito de conteúdos de Mecânica Quântica, trabalhos com críticas aos cursos introdutórios de Mecânica Quântica e estudos contendo propostas de novas estratégias didáticas. Com base nessa pesquisa e nas concepções que nelas são verificadas para o ensino e aprendizagem da mecânica quântica, considerando sua importância para os dias atuais, elaboramos uma proposta de estratégia didática acerca da interpretação físico-matemática da dualidade onda-partícula através de uma função denominada part-wave, que é solução da equação de Schrödinger, em cursos de graduação voltados para a formação de professores nas áreas de matemática, física e química. Assim, o trabalho ficou distribuído em três Capítulos. No primeiro, mostra-se de forma sintetizada: 1) A argumentação matemática utilizada por de Broglie quanto à natureza da onda associada ao elétron; 2) A similaridade da equação de onda das cordas vibrantes com a equação de Schrödinger; 3) A quantização das grandezas físicas – a energia e o momento – que revelam que a equação de Schrödinger é uma equação de autovalores[3]; 4) A interpretação probabilística de Max Born para a mecânica quântica[4].

No segundo, expomos a base matemática – o Espaço de Hilbert[5] – sobre a qual as características da função de onda relativa ao elétron estão assentados.

No terceiro, apresenta-se uma proposta de estratégia didática acerca da interpretação físico-matemática da dualidade onda-partícula. A idéia pressupõe que a dualidade onda-partícula pode ser compreendida através de uma função matemática que antes de qualquer medida física possui característica dual, que é "quebrada" somente quando medidas ou observações são realizadas, na direção de uma ou da outra categoria quântica. Dessa forma, é possível explicar a dualidade sem qualquer necessidade de negar a existência de uma realidade objetiva e independente do observador.

2. AS BASES FÍSICAS DA TEORIA QUÂNTICO-ONDULATÓRIA

No campo das complexas evidências experimentais, discutido em artigos científicos e publicações diversas por físicos e teóricos da física quântica, demonstra-se que tanto a matéria quanto a radiação têm comportamento dual. Nessa direção, as partículas de sistemas microscópicos se movem de acordo com princípios e leis que regem algum tipo de movimento ondulatório. Do mesmo modo, a radiação em determinadas circunstâncias se comporta como uma partícula em movimento.

Einstein [6], em seus estudos científicos sobre o efeito fotoelétrico, conseguiu identificar e demonstrar a natureza dual da radiação. Posteriormente, os trabalhos de de Broglie[1,7] estabeleceram importantes avanços científicos no campo da física quântica, ao demonstrarem, ser extensiva para a matéria o sentido da dualidade, universalizando o que parece ser um princípio fundamental da natureza.

Para o caso de uma partícula microscópica, portanto, devido ao seu caráter dual certos aspectos de seu comportamento são evidenciados pelo comportamento de uma função de onda $\psi(x,t)$, obedecendo aos postulados de de Broglie e de Einstein.

2.1 OS POSTULADOS DE DE BROGLIE E DE EINSTEIN:

Em 1905, Einstein propôs que a energia radiante é quantizada em pacotes concentrados, que mais tarde vieram a ser chamados fótons. Este cientista relacionou a energia (E) dos fótons à freqüência (ν) da luz, conforme mostrado na Equação (01).

$$\mathsf{E} = \mathsf{h}_{\mathcal{V}} \tag{01}$$

Onde, h é a constante de Planck.

Entretanto, pelos princípios relativísticos[8] esses fótons deveriam ter uma energia, E, calculada a partir da Equação (02).

$$\mathsf{E} = \mathsf{pc} \tag{02}$$

onde, p é o momento da partícula e c, a velocidade da luz.

Por outro lado, segundo de Broglie, cada fóton teria um momento associado conforme a Equação (03).

$$p = \frac{h}{\lambda}$$
(03)

onde, λ é o comprimento de onda da onda associada à partícula.

Nesse ponto é oportuno ressaltar que de Broglie, por volta de 1924, intuiu que a natureza era simétrica, ou seja, a Eq.(03) seria uma fórmula absolutamente geral, aplicável tanto para partículas materiais quanto para fótons. Em sua hipótese o comportamento de um elétron (ou qualquer outra partícula microscópica) é governado por um "pacote de onda" que se desloca junto com o elétron, com momento dado pela Equação (04):

$$mv = \frac{h}{\lambda}$$
(04)

Onde: m é a massa da partícula e v, sua velocidade.

Dessa forma, o movimento de uma partícula material de momento p está associado uma onda-piloto de comprimento de onda - λ , conforme a Equação (05).

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$
(05)

2.2. A FUNÇÃO DE ONDA Ψ(x,t) ASSOCIADA A UMA PARTÍCULA

Se a dualidade onda-partícula era eminente, então qual seria a função de onda que representaria o movimento da partícula? E qual seria a sua velocidade? Por exemplo, para localizar uma partícula livre a função de onda utilizada no formalismo matemático pode ser do tipo:

$$\Psi(\mathbf{x},t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$$

No entanto, conforme se pode observar pela ilustração da Figura 1, o comportamento desta função está definido sobre o eixo x. Assim, como localizar uma partícula utilizando esse tipo de função?



Figura 1- Comportamento da onda de uma partícula livre definido no eixo x

A hipótese é de que a onda de matéria está na forma de um pacote de ondas. Então, à medida que o tempo passa, o pacote, certamente, deve se mover ao longo do eixo x com a mesma velocidade da partícula. Portanto, a solução deve estar na superposição de ondas, ou seja, a função de onda $\Psi(x,t)$ que representa a onda de de Broglie, é representada pela Figura 2.



Figura 2 – Representação esquemática de uma função de onda e sua partícula associada (Eisberg)[9].

2.3. VELOCIDADE DE PROPAGAÇÃO DE UMA ONDA

A velocidade de propagação, v, de uma onda com comprimento de onda λ e freqüência *v* é dada pela Equação (06).

$$\mathbf{v} = \lambda \mathbf{v} \tag{06}$$

Se chamarmos V_B a velocidade da onda de de Broglie, então sua velocidade será dada conforme a Equação (07).

$$V_{\rm B} = \lambda v \tag{07}$$

Porém, se se usa a Equação (05), tem-se a expressão da Equação (08).

$$V_{\rm B} = \frac{h}{m {\rm v}} . v \tag{08}$$

No entanto, como se sabe v é a freqüência da onda associada a uma partícula de momento p e energia total E, já mostrada pela Equação (01). Logo, se a partícula está se movendo com velocidade não relativística v, em uma região de energia potencial zero, então pode-se escrever a Equação (09).

$$mc^2 = hv \tag{09}$$

Desse modo, pode-se também obter a freqüência na forma da Equação (10) e,

$$v = \frac{mc^2}{h}$$
(10)

ao substituí-la na Equação (08) pode-se escrever a expressão conforme as Equações (11) ou (12).

$$V_{\rm B} = \frac{\hbar}{m v} \frac{m c^2}{\hbar}$$
(11)

ou

$$V_{\rm B} = \frac{c^2}{v} \tag{12}$$

Neste caso, se v é a velocidade da partícula tem-se que v<c. Nesta condição, verifica-se da Equação (12) que $V_B > c$. Esse resultado além de violar a teoria da

relatividade restrita, mostra que a onda de matéria não acompanha a partícula cujo movimento ela controla.

Uma alternativa de solução para esse problema é se imaginar que o movimento de uma onda clássica e o movimento de uma partícula está associado pela superposição, ou "batimento", de duas ou mais ondas monocromáticas.

2.4. VELOCIDADE DO GRUPO DE ONDAS ASSOCIADO À PARTÍCULA EM MOVIMENTO

Considera-se uma onda senoidal de freqüência v e comprimento de onda λ , que tem amplitude constante igual a 1 em todo o espaço, que se move com velocidade uniforme no sentido positivo do eixo x, e é representada pelas funções das Equações (13) ou (14).

$$\Psi(x,t) = sen2\pi(\frac{x}{\lambda} \quad vt)$$
(13)

$$\Psi(x,t) = sen2\pi(kx \quad vt) \tag{14}$$

onde, k é definido como o módulo do vetor de propagação de onda, Equação (15).

$$k \equiv \frac{1}{\lambda} \tag{15}$$

Logo, pode-se considerar que:

- Mantendo-se x fixo em um dado valor, a função oscila senoidalmente no tempo com freqüência v e amplitude igual a 1.
- Mantendo-se t fixo, a função tem uma dependência senoidal em x com comprimento de onda λ ou número de onda k.
- Os zeros da função, que correspondem aos nós da onda que ela representa, se encontram em posições x_n, tal como expresso pelas Equações (16) e (17).

$$2\pi(kx_n - vt) = \pi n,$$
 $n=0,\pm 1,\pm 2,\pm 3,...$ (16)

$$x_n = \frac{n}{2k} + \frac{v}{k}t \tag{17}$$

Todos os pontos da onda estão, portanto, se movendo no sentido positivo do eixo x com velocidade representada pela Equação (18) ou (19).

$$\mathbf{v} = \frac{dx_n}{dt} \tag{18}$$

$$\mathbf{v} = \frac{v}{k} \tag{19}$$

Neste sentido, a velocidade de propagação v de uma onda com comprimento de onda λ e freqüência v é dada pela Equação (06), quando se usar a Equação (15) na expressão da Equação (19).

Ao se analisar agora o fenômeno do "batimento" – ondas que se propagam no mesmo sentido com a mesma amplitude, porém com freqüências ligeiramente diferentes – então, se consideram as seguintes ondas expressas pelas Equações de (20) a (26).

$$\Psi_1(\mathbf{x},t) = \operatorname{sen} 2\pi [\mathbf{k}\mathbf{x} - \mathbf{v}t] \tag{20}$$

$$\Psi_2(\mathbf{x},t) = \operatorname{sen} 2\pi [(\mathbf{k} + d\mathbf{k})\mathbf{x} - (\mathbf{v} + d\mathbf{v})t]$$
(21)

Da superposição das Equações (20) e (21), resulta o que se escreve na Equação (22).

$$\Psi(\mathbf{x},t) = \Psi_1(\mathbf{x},t) + \Psi_2(\mathbf{x},t)$$
(22)

Com o auxílio da identidade matemática conhecida da Equação (23) pode-se, então, escrever a Equação (24).

$$sen A + sen B = 2cos[(A-B)/2].sen[(A+B)/2]$$
 (23)

$$\psi(x,t) = 2\cos 2\pi \left(\frac{dk}{2}x - \frac{dv}{2}t\right) \cdot sen 2\pi \left[\frac{(2k+dk)}{2}x - \frac{(2v+dv)}{2}t\right]$$
(24)

Como dv « 2v e dk « 2k, pode-se Escrever (24) na forma da Equação (25).

$$\psi(x,t) = A(x,t).sen2\pi(kx - vt)$$
⁽²⁵⁾

De onde se escreve a Equação (26).

$$A(x,t) = 2\cos 2\pi \left(\frac{dk}{2}x - \frac{dv}{2}t\right)$$
(26)

A expressão da Equação (25) representa uma onda de freqüência elevada v, sendo modulada por A(x,t) de freqüência dv/2, mais baixa, de forma que $\Psi(x,t)$ tem uma amplitude que varia periodicamente. Tem-se então um grupo de ondas representando o fenômeno do "batimento". A velocidade v das ondas individuais pode ser calculada considerando o segundo fator de $\Psi(x,t)$ e a velocidade g dos grupos pode ser calculada pelo primeiro. Portanto, tem-se a velocidade de fase expressa pela Equação (27) e a velocidade de grupo expressa pela Equação (28).

$$v = \frac{v}{k}$$
 velocidade de fase (27)

$$g = \frac{dv/2}{dk/2} = \frac{dv}{dk} \qquad velocidade \, de \, grupo \tag{28}$$

O gráfico da Figura 3 mostra o fenômeno do "batimento" para duas ondas.



Figura 3: Representação gráfica do "batimento" para duas ondas.

Por outro lado, das relações de de Broglie-Einstein, tem-se as expressões escritas nas formas das Equações (29) a (32).

$$v = \frac{E}{h}$$
(29)

$$k \equiv \frac{1}{\lambda} = \frac{p}{h} \tag{30}$$

Derivando as expressões das Equações (29) e (30), pode-se escrever as Equações (31) e (32)

$$dv = \frac{dE}{h}$$
(31)

$$dk = \frac{dp}{h} \tag{32}$$

Portanto, a velocidade de grupo fica determinada na forma da Equação (33).

$$g = \frac{dv}{dk} = \frac{dE}{dp}$$
(33)

Daí, se conhecida a energia e o momento da partícula respectivamente pelas Equações (34) e (35), segue-se que por derivação destas expressões se obtém a expressão da Equação (36).

$$E = \frac{mv^2}{2}$$
(34)

 $p = mv \tag{35}$

$$\frac{dE}{dp} = \frac{mv \, dv}{m \, dv} = v \tag{36}$$

Finalmente, esse resultado da Equação (36) se comparado com a Equação (33) fornece a Equação (37).

Portanto, a velocidade do grupo de ondas de matéria é exatamente igual à velocidade da partícula cujo movimento ele governa. O que mostra a coerência do postulado de de Broglie.

2.5. DESCRIÇÃO DO MOVIMENTO EM TERMOS DE UMA FUNÇÃO DE ONDA

Pelo teorema de Fourier[10] qualquer movimento periódico pode ser descrito pela somatória de todas as ondas harmônicas que constituem o movimento. Então, pode-se descrever o movimento de um elétron em um átomo em termos de ondas harmônicas de acordo com os postulados da teoria quântica[11]. Os princípios destes postulados, de interesse para este trabalho de dissertação, são tratados a seguir.

Na mecânica clássica o movimento de uma partícula é completamente descrito pela função horária x(t). Assim, em cada instante, o estado da partícula é

completamente caracterizado pela posição x, pela velocidade v e pela energia total E.

No entanto, na mecânica quântica, o estado de uma partícula é descrito por uma função de onda complexa, indicada pelo símbolo $\Psi(x,t)$, que descreve tudo sobre os diversos fenômenos do movimento que se pretende investigar sobre a partícula.

Assim, os conceitos de posição, momento e energia são descritos somente como valores esperados sobre os quais a função de onda e suas derivadas obedecem as propriedades de unicidade, continuidade e de serem finitas, ou seja:

- quanto à posição a probabilidade de localizar a partícula na posição x é uma função proporcional a |Ψ(x,t)|²;
- quanto ao momento o momento está relacionado com a rapidez da variação da função de onda no espaço, (p = h/λ). Quanto mais rápida a função de onda varia no espaço, ou seja, quanto menor for o comprimento de onda, maior será o momento da partícula;
- quanto a energia a energia está relacionada com a freqüência da função de onda (E = hv). Portanto, quanto mais rápida a função de onda varia, no tempo, maior será a energia da partícula.

Considerando os estudos teóricos deste trabalho, abordados até este ponto, os quais são baseados em pesquisas desenvolvidas por renomados e consagrados cientistas, segue-se a seguinte formulação para balizar a proposição didática pretendida na fundamentação da hipótese inicialmente apresentada – como localizar uma partícula no espaço?

Somando-se uma quantidade infinita de ondas, por exemplo, do tipo como se segue:

$$\Psi(\mathbf{x},t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{k} A(\mathbf{k}) \cdot e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega t)} d\mathbf{k}$$
(38)

Em seguida se calculada a transformada de Fourier inversa, para t=0, tem-se:

$$A(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x,0) e^{-ikx} dx$$
(39)

Para uma onda plana do tipo $\Psi(x,0) = e^{ik_0x}$, pode-se escrever:

$$A(k) = \frac{\sqrt{2\pi}}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ix(k-k_0)} dx = \sqrt{2\pi} \,\delta(k-k_0)$$
(40)

A Figura (04) expressa a integral de Fourier para o pacote de ondas associado à partícula.



Figura 4 - Pacote de ondas associado à partícula com velocidade de grupo g

Desta maneira, ficam então estabelecidas as condições necessárias para se localizar uma dada partícula num espaço definido no pacote de ondas.

2.6. O PRINCÍPIO DA INCERTEZA

Em 1925, o físico alemão W. Heisenberg [12] afirmou que não se poderia medir simultaneamente a posição e a velocidade de uma partícula. Para se observar a partícula, então, deve-se incidir um feixe de luz sobre ela. Por outro lado, não se pode usar uma quantidade de luz arbitrariamente pequena. No mínimo deve-se utilizar um quantum de intensidade luminosa (fóton – Lewis, 1926[13]). O que é suficiente para causar uma perturbação na partícula, alterando a sua velocidade de uma maneira que não pode ser prevista.

Para se medir a posição da partícula de forma acurada, ou seja, de modo a minimizar a incerteza inerente a tal procedimento, deve-se utilizar um feixe de luz de pequeno comprimento de onda tais como, a luz ultravioleta, os raios-X ou gama. No entanto, os fótons dessas radiações têm energias maiores do que a da luz visível.

Esta condição, portanto, resulta em maior perturbação sobre a velocidade da partícula. Dessa forma, quanto mais precisa for a medida da posição da partícula, menos precisa será a medida da velocidade e vice-versa.

Baseado nessa conjectura, Heisenberg formulou um dos pilares da mecânica quântica intitulado princípio da incerteza, que prediz: – "a incerteza no momento de uma partícula vezes a incerteza na sua posição é sempre maior ou igual a ħ, como escrito na Equação (41).

(incerteza no momento)x(incerteza na posição)
$$\geq \frac{\hbar}{2}$$
 (41)

Pela superposição de ondas dada pela Equação (24), vem

$$\Psi(\mathbf{x}, \mathbf{t}) = \left[2\mathsf{A}\cos 2\pi \left(\frac{\Delta k}{2}x - \frac{\Delta v}{2}t\right)\right] \cdot \operatorname{sen} 2\pi \left(kx - vt\right)$$
(42)

As três etapas da Figura 5 exibem o processo de superposição.



Figura 5: Processo de superposição de ondas planas

As Figuras 5.a e 5.b representam as ondas antes da superposição. A Figura 5.c mostra a superposição das ondas como representação da partícula associada.

Fazendo t=0, a amplitude é máxima quando x=0 e nula em x= $\Delta x/2$, desde que, ($\Delta k/2$). ($\Delta x/2$)= $\pi/2$, o que resulta simplesmente na Equação (43),

$$\Delta k \Delta x = 2\pi \tag{43}$$

Fazendo x = x_0 = 0, a amplitude se anula para t= $\Delta t/2$, conforme o que se segue,

$$\Delta v.\Delta t = 2\pi \tag{44}$$

A partir dessas relações e das relações de de Broglie-Einstein pode-se mostrar o *princípio da incerteza* obtido por Heisenberg:

$$\Delta \mathbf{p}.\Delta x \ge \frac{\hbar}{2} \tag{45}$$

$$\Delta \mathsf{E}.\Delta t \ge \frac{\hbar}{2} \tag{46}$$

onde, $\Delta p = \hbar \Delta k e \Delta E = \hbar \Delta \omega$.

A relação (45) expressa incertezas nas medidas do momento e da posição da partícula e a relação (46), da energia e do tempo. Ou seja, para que possamos localizar uma partícula em uma certa região Δx deve-se obter uma onda cuja amplitude varie com x e t. Para isso, deve-se superpor várias ondas monocromáticas de diferentes comprimentos de onda ou freqüências.

Uma onda com extensão finita no espaço, ou seja, um único grupo com começo e fim bem definidos, pode ser obtida através da superposição de ondas senoidais com espectro contínuo de comprimentos de onda dentro de uma região $\Delta\lambda$.

A amplitude do grupo será zero fora de uma região de comprimento Δx .

2.7. VIBRAÇÕES DE UMA CORDA PRESA NOS EXTREMOS

O Modelo de de Broglie consiste na onda associada ao elétron confinada em uma determinada região. Classicamente, uma onda confinada pode ser representada como uma corda presa nas extremidades, que ao produzir movimentos estacionários resulta em movimento periódico (com período T = 2L/v, onde L é o comprimento da corda).

Considerando uma partícula em movimento confinada entre paredes, acontece o mesmo fenômeno, ou seja, o bate e reflete. A diferença é que a onda se superpõe ("interfere") com ela mesma depois de ser refletida.

Uma corda vibrante de comprimento L, presa nos extremos, executa um movimento periódico senoidal (harmônico). Portanto, se o movimento da corda não é somente periódico, mas também harmônico, os comprimentos de onda destas ondas harmônicas são discretos.

Observando a Figura 6, que mostra os quatro primeiros modos normais de vibração da corda presa nos dois lados, nota-se que os comprimentos de onda são 2L, L, 2L/3, 2L/4 e que a freqüência v e o comprimento de onda λ são relacionados por V= λv . A velocidade V é constante, onde as vibrações são mais rápidas (freqüência maior) para comprimentos de onda menores (mais curtos).



Figura 6: Vibrações de uma corda de comprimento L presa nos extremos

As figuras 6.a, 6.b, 6.c e 6.d representam ondas de comprimentos λ iguais a 2L, L, 2L/3, 2L/4. Essas ilustrações mostram os comportamentos gráficos de ondas estacionárias regidas na forma da Equação (47).

$$y(x,t) = A.sen[(2\pi/\lambda) x].cos(2\pi v t)$$
(47)

Como o seno é zero em x=0 e x=L, o deslocamento y será zero também nestas posições, para todos os tempos. Isto leva a condição de que os comprimentos de onda podem ser 2L, L, 2L/3, 2L/4 etc. Estes são os únicos comprimentos de onda possíveis que satisfazem a condição que y(x=0,t) = 0 e y(x=L,t) = 0.

As vibrações transversais da corda: y=(x,t) satisfazem à equação das ondas para pequenos deslocamentos, conforme o estabelecido na Equação (48).

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} - \frac{1}{V^2} \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = 0$$
(48)

Onde,

$$V^2 = \frac{T}{\rho}$$

Sendo T a tensão aplicada e ρ a densidade da corda.

A solução da Equação (48) deve satisfazer as condições de contorno

$$y(0,t) = y(L,t) = 0$$
 (49)

Então, propondo a solução (50),

$$y(x,t) = \psi(x)e^{-i\omega t}$$
(50)

A Equação (48) se reduz a Equação (51), na forma:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \mathbf{k}^2\psi = 0 \tag{51}$$

onde,

$$k^2 = \frac{\omega^2}{v^2}$$
(52)

Esta solução (50) satisfaz a Equação (48), se k assumir somente valores estabelecidos a partir da equação (53).

$$\psi(\mathbf{x})=a.sen(k\mathbf{x})$$
 (53)

para $k=n \pi I_{L}$, onde n é um número inteiro. Nesse caso, os valores de k e ω devem corresponder a uma dado valor de n, ou seja,

$$k_{n} = \frac{n\pi}{L} e \omega_{n} = \frac{n\pi}{L} v$$
(54)

Logo, uma solução para a Equação (50) é função do tipo da Equação (55).

$$y_n(x,t) = a_n \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right) e^{-i\omega t}$$
 (55)

Os valores k_n para os quais a Equação (55) admite solução, são chamados autovalores e as soluções correspondentes, são denominadas autofunções.

Para resolver a Equação (55), supomos que y(x, t) é o produto de uma função de x e de uma função de t. As soluções $\psi_n(x)$ assim obtidas, são denominadas ondas estacionárias. Os pontos da corda onde a vibração se anula são tais que $\psi_n(x)=0$, qualquer que seja t: o perfil da onda, isto é, y em função de x, em um dado instante não se desloca ao longo do eixo dos x quando t varia. Como a Equação (55) é linear, se y₁ e y₂ são duas soluções da mesma, uma combinação linear a₁y₁+a₂y₂,

onde a_1 e a_2 são constantes, será também solução. Logo, a superposição de soluções da forma (55) dará uma função como a Equação (56).

$$\mathbf{y}(\mathbf{x},\mathbf{t}) = \sum_{n=0}^{\infty} (a_n \cos \omega_n t + b_n \operatorname{sen} \omega_n t) \operatorname{sen}(\frac{n\pi x}{L})$$

(56)

As condições de contorno impostas pelo problema físico, levam à existência de estados discretos definidos por números inteiros.

Os resultados obtidos até aqui servem para descrever o comportamento de uma partícula confinada. Assim, se existe uma onda associada a uma partícula, esta onda deve ser uma função y(x,t) que satisfaça a Equação de ondas (57):

$$\nabla^2 y - \frac{1}{\mathsf{V}_0^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} y = 0$$
⁽⁵⁷⁾

onde V_0 é a velocidade de fase da onda.

Mas, qual é a forma da onda nos casos mais complexos, como por exemplo, o do elétron gravitando em torno do núcleo do átomo de hidrogênio? Schrödinger resolveu este problema em 1926 quando descobriu a equação diferencial das ondas de de Broglie.

2.8. A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER DEPENDENTE DO TEMPO

Com base no postulado de de Broglie, Erwin Schröedinger, em 1926, desenvolveu uma equação, que descreve o comportamento de qualquer função de onda. Ela é uma equação diferencial parcial que pertence à classe das equações de onda e pode ser decomposta em um conjunto de equações diferenciais ordinárias.

A equação de Schrödinger da mecânica quântica é uma equação diferencial parcial da seguinte forma[15]:

$$\alpha \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x,t) + U(x,t) \Psi(x,t) = \beta \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t)$$
(58)

Essa equação deve possuir as seguintes propriedades:

- deve ser consistente com os postulados de de Broglie Einstein, Equações (01) e (03)
- deve ser consistente com a equação da conservação da energia:

$$E = \frac{p^2}{2m} + \mathbf{U}$$
(59)

Esta equação relaciona a energia total E de uma partícula de massa m com sua energia cinética $\frac{p^2}{2m}$ e sua energia potencial U.

- deve ser linear em Ψ(x,t), ou seja, seΨ₁(x,t) e Ψ₂(x,t) são duas soluções, então qualquer combinação linear arbitrária dessas soluções, c₁Ψ₁(x,t)+c₂Ψ₂(x,t), também é uma solução.
- deve admitir soluções de onda senoidal com comprimento de onda e freqüência constantes.

Portanto, considerando a função da Equação (60)

$$\Psi(\mathbf{x},t) = \mathbf{A}\mathbf{e}^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} \cdot \mathbf{\omega}t)} \tag{60}$$

Onde, k e w são, respectivamente o número de ondas e a freqüência angular do sistema.

Calculando as derivadas temporais e espaciais dessa função de onda, obtémse a Equação (61).

$$\begin{cases} \frac{\partial \Psi(\mathbf{x},t)}{\partial x} = i\mathbf{k}A\mathbf{e}^{i(\mathbf{k}\mathbf{x}-\omega t)} = \frac{i}{\hbar}p\Psi(\mathbf{x},t)\\ \frac{\partial^{2}\Psi(\mathbf{x},t)}{\partial x^{2}} = -\mathbf{k}^{2}A\mathbf{e}^{i(\mathbf{k}\mathbf{x}-\omega t)} = -\frac{p^{2}}{\hbar^{2}}\Psi(\mathbf{x},t)\\ \frac{\partial\Psi(\mathbf{x},t)}{\partial t} = -i\omega A\mathbf{e}^{i(\mathbf{k}\mathbf{x}-\omega t)} = -\frac{i}{\hbar}E\Psi(\mathbf{x},t) \end{cases}$$
(61)

Portanto, a simples substituição do grupo (61) na Equação (58) e após algum algebrismo resulta a Equação (62).

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, \mathbf{t})}{\partial \mathbf{t}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(\mathbf{x}, \mathbf{t})}{\partial x^2} + \mathbf{U}\Psi(\mathbf{x}, \mathbf{t})$$
(62)

Esta é a conhecida Equação de Schrödinger dependente do tempo.

2.9. EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER INDEPENDENTE DO TEMPO

Matematicamente, a solução da Equação de Schrödinger (62) é uma função $\Psi(x,t)$ de duas variáveis: a posição-x e o tempo-t. Nesse caso, podemos expressá-la como uma função-produto do tipo:.

$$\Psi(\mathbf{x}, \mathbf{t}) = \psi(x)\varphi(t) \tag{63}$$

Naturalmente, a substituição desta solução-produto, e após algum algebrismo, desdobra-se a Equação (62) em duas equações diferenciais ordinárias: a Equação (64) e a Equação (65), respectivamente em relação à posição e em relação ao tempo:

$$\frac{1}{\psi(x)} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \mathsf{U}(x)\psi(x) \right] = \mathsf{G}$$
(64)

$$i\hbar \frac{1}{\varphi(t)} \frac{d\varphi(t)}{dt} = G$$
(65)

Em relação ao tempo, a solução é uma função exponencial dada pela Equação (66)

$$\varphi(t) = e^{\alpha t} \tag{66}$$

Onde α é uma constante a determinar através da substituição da Equação (66) na Equação (68), que fornece:

$$\alpha = -\frac{\mathrm{iG}}{\hbar} \tag{67}$$

Logo, a solução em t é resultado da transposição da Equação (67) na Equação (66), que resulta:

$$\varphi(\mathbf{t}) = \mathbf{e}^{-\frac{\mathbf{i}\mathbf{G}}{\hbar}\mathbf{t}} \tag{68}$$

Em termos de senos e cossenos, a Equação (68) fica,

$$\varphi(t) = e^{-\frac{iG}{\hbar}t} = \cos\frac{Gt}{\hbar} - i\sin\frac{Gt}{\hbar}$$
(69)

onde, ω =G/ \hbar , posto que a função possui argumento ω t. Logo, do postulado de Einstein, para ω =2 πv , temos:

Além disso, substituindo este resultado nas equações (64) e (65) obtém-se, respectivamente, as Equações (71) e (72).

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \mathsf{U}(x)\psi(x) = \mathsf{E}\,\psi(\mathsf{x}) \tag{71}$$

$$\varphi(t) = e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$$
(72)

Finalmente, pode-se reescrever a função de onda dada pela solução-produto (63), como apresentado na Equação (73), ou seja

$$\Psi(x,t) = \psi(x) e^{\frac{iE}{\hbar}t}, \qquad (73)$$

A Equação (71) é chamada equação de Schrödinger independente do tempo. Suas soluções independentes do tempo $\psi(x)$ determinam a dependência espacial das soluções $\Psi(x,t)$. Além disso, esta expressão não contém o número imaginário i e, portanto, suas soluções não são necessariamente funções complexas. São ditas autofunções.

Por conveniência, as funções de onda, que são soluções da equação de Schrödinger dependente do tempo, serão aqui representadas por uma letra maiúscula Ψ e as autofunções, que são soluções da equação de Schrödinger independente do tempo, serão representadas por uma letra minúscula ψ .

É oportuno ressaltar o espectro de aplicabilidade da equação de Schrödinger na mecânica quântica. Na química, por exemplo, a aproximação Hartree-Fock[16] utiliza a equação para explicar os orbitais moleculares. Na física nuclear, ela é utilizada para explicar o decaimento alpha e penetração de barreira; na física atômica se obtém a solução do átomo de hidrogênio[17].

As vibrações de rede nas estruturas cristalinas dos sólidos, nas quais se obtém soluções do oscilador harmônico via equação de Schrödinger, também é uma aplicação bastante usual na física da matéria condensada[18]

2.10. PROPRIEDADES DAS FUNÇÕES DE ONDA E AUTOFUNÇÕES

Soluções aceitáveis da equação de Schrödinger, independentes do tempo existem apenas para certos valores da energia total E, como estão apresentadas na Equação (74):

$$E_1, E_2, E_3, \dots, E_n, \dots$$
 (74)

Estas energias são chamadas os autovalores de sua equação. Logo, a cada energia dessas ou a cada autovalor haverá uma autofunção correspondente, que é

uma solução da equação de Schrödinger independente do tempo para o potencial U(x), tais funções podem ser representadas pela Equação (75):

$$\psi_1(\mathbf{x}, \mathbf{t}), \psi_2(\mathbf{x}, \mathbf{t}), \psi_3(\mathbf{x}, \mathbf{t}), \dots, \psi_n(\mathbf{x}, \mathbf{t}), \dots$$
 (75)

Adicionalmente, para cada autovalor há também uma função de onda correspondente à Equação (76),

$$\Psi_{1}(\mathbf{x},t),\Psi_{2}(\mathbf{x},t),\Psi_{3}(\mathbf{x},t),...,\Psi_{n}(\mathbf{x},t),...$$
(76)

que podem assumir a seguinte representação:

$$\psi_1(x) \mathbf{e}^{\frac{\mathbf{i}\mathbf{E}_1 \mathbf{t}}{\hbar}}, \psi_2(x) \mathbf{e}^{\frac{\mathbf{i}\mathbf{E}_2 \mathbf{t}}{\hbar}}, \psi_3(x) \mathbf{e}^{\frac{\mathbf{i}\mathbf{E}_3 \mathbf{t}}{\hbar}}, \dots, \psi_n(x) \mathbf{e}^{\frac{\mathbf{i}\mathbf{E}_n \mathbf{t}}{\hbar}}, \dots$$
(77)

O índice n, que toma valores inteiros sucessivos, é chamado número quântico. Assim, se o sistema é descrito pela função de onda $\Psi_n(x,t)$, diz-se que ele está no estado quântico n.

Cada uma das funções de onda $\Psi_n(x,t)$ é uma solução particular da equação de Schrödinger para o potencial U(*x*). Como essa equação é linear em relação à função de onda, uma combinação linear arbitrária de todas as funções de onda que são soluções da equação de Schrödinger para um potencial particular U(*x*), é também solução. Portanto, pode ser representada conforme a Equação (78):

$$\Psi(\mathbf{x},t) = c_1 \Psi_1(\mathbf{x},t) + c_2 \Psi_2(\mathbf{x},t) + c_3 \Psi_3(\mathbf{x},t) + \dots + c_n \Psi_n(\mathbf{x},t) + \dots = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(\mathbf{x},t)$$
(78)

Não obstante, para ser uma solução aceitável, é necessário que uma autofunção $\psi(x)$ e sua derivada tenham as seguintes propriedades:

1.a) $\psi(x)$ deve ser finita.1.b) $\frac{d\psi(x)}{dx}$ deve ser finita.2.a) $\psi(x)$ deve ser contínua.2.b) $\frac{d\psi(x)}{dx}$ deve ser contínua.

Isto garante que as autofunções sejam funções "bem comportadas" matematicamente. E, então, a partir dessas autofunções, podemos obter grandezas mensuráveis.

Portanto, para uma partícula se movendo sob influência de um potencial independente do tempo U(x), existem soluções aceitáveis para a equação de Schrödinger independente do tempo, somente se a energia das partículas for quantizada, isto é, restrita a um conjunto discreto de energias E_1 , E_2 , E_3 ,...

2.11. O POSTULADO DE MAX BORN

A função de onda da partícula livre deverá ter a forma da Equação (79):

$$\Psi(\mathbf{x}, \mathbf{t}) = \cos(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega \mathbf{t}) + \operatorname{isen}(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega \mathbf{t}).$$
⁽⁷⁹⁾

Essa forma complexa das funções de onda da mecânica quântica é uma característica desejável, visto que torna evidente que não se deve tentar dar às funções de onda uma existência física, da mesma forma que damos às ondas na água. Portanto, não se pode responder o que é esta onda e em que ela se propaga?

As funções de onda são instrumentos de cálculo que têm significado apenas no contexto da teoria de Schrödinger da qual elas fazem parte. Entretanto, o interesse físico no estudo dessas funções deve-se ao fato delas conterem toda a informação que o princípio da incerteza permite que se tenha a respeito da partícula associada.

De acordo com o postulado de Max Born[19], enunciado pela primeira vez em 1926, toda a evolução dos eventos é determinada pelas leis da probabilidade. A ligação básica entre as propriedades da função de onda $\Psi(x,t)$ e o comportamento da partícula associada a um "estado" é expressa em termos da densidade de probabilidade P(*x*,t). Dessa forma, um estado no espaço corresponde uma probabilidade definida que é dada pela onda de de Broglie associada ao estado.

A função de onda $\Psi(x,t)$ representa a onda de de Broglie para a partícula que se move na direção x, com probabilidade P(*x*,t), dada pela Equação (80):

$$P(x,t) = \Psi^{*}(x,t). \ \Psi(x,t) = |\Psi(x,t)|^{2}$$
(80)

onde $\Psi^*(x,t)$ representa o complexo conjugado de $\Psi(x,t)$.

Assim, se no instante t é realizada uma medida de localização da partícula, então a probabilidade de que a partícula seja encontrada em uma coordenada entre x e x+dx é igual a P(x,t)dx.

Por outro lado, como o movimento da partícula está relacionado com a propagação de uma onda associada (onda de de Broglie), estes dois entes devem estar associados no espaço. Isto é, a partícula deve estar em algum local onde as ondas tenham uma amplitude apreciável. Portanto, P(x,t) deve ter um valor apreciável onde $\Psi(x,t)$ tiver um valor apreciável. Estes comportamentos podem ser visualizados conforme as curvas das Figuras 7.a e 7.b.



Figura 7.a - representa a evolução da função de onda e da partícula na direção x.Figura 7.b - é a curva da probabilidade de localizar a partícula entre x e x+dx.

É oportuno salientar que na eletrodinâmica quântica, cada fóton do campo eletromagnético possui uma energia de h*v*, a densidade de energia é, por sua vez, proporcional à densidade de fótons. No caso da mecânica quântica, a intensidade das ondas dá diretamente a densidade de probabilidade, que é, em uma dimensão, a probabilidade por unidade de comprimento de encontrar uma partícula.

Portanto, não há como afirmar que uma partícula em um dado estado de energia seja encontrada em uma posição precisa de uma dada região, em um certo instante, mas apenas as probabilidades relativas de que ela esteja lá, ou seja, na região naquele instante.

A probabilidade total de encontrar em algum local a partícula, descrita pela função de onda, tem que ser igual a 1(um) para que a partícula ali exista. Matematicamente, isto significa.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(\mathbf{x},\mathbf{t})|^2 dx = 1$$
(81)

A interpretação probabilística de $\Psi^*(x,t)$. $\Psi(x,t)$ exige, então, que toda função de onda seja normalizada, ou seja, deva satisfazer a condição estabelecida na Equação (81).

2.12. VALORES ESPERADOS E A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER COMO UMA EQUAÇÃO DE AUTOVALOR

Se uma grandeza G é medida n vezes, onde um valor G_i ocorre n_i vezes, a média, ou valor esperado de G, será dado pela Equação (82):

$$\left\langle G\right\rangle = \frac{\sum_{i=1}^{n} n_i G_i}{n} = \frac{\sum_{i=1}^{n} G_i n_i}{\sum_{i=1}^{n} n_i}$$
(82)

Utilizando a Equação (82), a partir da função de onda associada a uma partícula, pode-se obter informações numéricas detalhadas à respeito da posição da partícula, do momento, da energia e de todas as outras grandezas que caracterizam seu movimento. Podem-se fazer cálculos quantitativos dos termos Δx e Δp no princípio da incerteza.

Considera-se uma partícula e sua onda associada $\Psi(x,t)$. Na medida da posição de uma partícula, há uma probabilidade finita (isto é, diferente de zero) dela ser encontrada para qualquer x, no intervalo de x a x+dx, se a função não se anular neste. Em geral, a função é não nula em uma região extensa do eixo x. Assim, não se pode atribuir à coordenada x um valor bem definido. No entanto, é possível especificar algum tipo de posição média da partícula, da maneira que se segue. Imaginemos que vamos fazer uma medida da posição da partícula no instante t. A

probabilidade de encontrá-la entre x e x+dx deve estar de acordo com o postulado (80) de Born.

Então, imagina-se que ao se repetir a experiência um certo número de vezes em que se registram os valores observados para x, pode-se, então, usar a média dos valores observados para caracterizar a posição da partícula num determinado instante t. Este valor indicado por <x> é o valor esperado da coordenada x da partícula no instante t.

Na forma integral, a expressão (82) para <x> fica representada por

$$\langle x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} x P(x,t) dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} P(x,t) dx} = \int_{-\infty}^{+\infty} x P(x,t) dx$$
(83)

onde, usou-se a condição de normalização (Equação 81).

.

O integrando é exatamente o valor da coordenada x com um peso dado pela probabilidade de se observar esse valor e, por integração, se obter a média dos valores observados.

Neste sentido, substituindo a Equação (80) na Equação (83), obtemos:

$$\langle \mathbf{x} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(\mathbf{x}, t) \mathbf{x} \Psi(\mathbf{x}, t) dx$$
 (84)

É possível fazer várias medidas da posição *x* de uma partícula e observar os desvios x - <x> em relação ao valor esperado <x> por meio da definição de desvio padrão, ou incerteza Δx , definida nos moldes da Equação (85),

$$\Delta \mathbf{x} = \sqrt{\left\langle \left(\mathbf{x} - \left\langle \mathbf{x} \right\rangle \right)^2 \right\rangle}$$
(85)

que pode ser reescrita numa outra forma mais apropriada, a Equação (86), chamada de "dispersão"[20].

$$(\Delta \mathbf{x})^2 = \left\langle \mathbf{x}^2 \right\rangle - \left\langle \mathbf{x} \right\rangle^2, \tag{86}$$

Esta equação revela que $(\Delta x)^2$ está relacionada às flutuações em torno da média. Por outro lado, temos que: 38

$$\left\langle \Delta x^2 \right\rangle \ge 0 \tag{87}$$

pois, $\langle x^2 \rangle \ge \langle x \rangle^2$. Mas, se $\langle x \rangle$ =0, a Equação (86) se transforma simplesmente na Equação (88)

$$\Delta \mathbf{x} = \mathbf{x} \tag{88}$$

Essa construção pode ser estendida para outras grandezas dinâmicas, como momento p e a energia E da partícula, que caracterizam seu estado de movimento. O valor esperado dessas grandezas é sempre dado por expressões do tipo mostrado na Equação (84).

Assim, a expressão para o momento p é escrita na forma da Equação (89), isto é:

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(\mathbf{x}, t) \mathbf{p} \Psi(\mathbf{x}, t) dx$$
 (89)

Nessa integral, o integrando apresenta funções que dependem de x e t. No entanto, o princípio da incerteza, dado pela Equação (45) mostra que p e x não podem ser conhecidos simultaneamente com precisão absoluta. Significa, então, que o momento p da partícula, na mecânica quântica, não poderá ser definido tal qual é sua definição na mecânica clássica.

Ora, como a função $\Psi(x,t)$ evolui no tempo e no espaço, e tem a forma da Equação (79), que representa uma partícula livre, vejamos que informações podemos abstrair de suas derivadas, em relação a x e a t.

Então, reescrevendo a Equação (79) na forma exponencial, tem-se:

$$\Psi(\mathbf{x},t) = \mathbf{e}^{\mathbf{i}(\mathbf{k}\mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\omega}t)} \tag{90}$$

Derivando em relação a x e usando a relação de de Broglie, para a qual $k = \frac{p}{\hbar}$, obtemos a Equação (91), onde:

$$p[\Psi(x,t)] = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} [\Psi(x,t)]$$
(91)

Quanticamente, portanto, a grandeza dinâmica p é representada por um operador diferencial, do tipo mostrado pela Equação (92)

$$\mathsf{p} \leftrightarrow -\mathsf{i}\hbar \frac{\partial}{\partial x} \tag{92}$$

Por outro lado, derivando a Equação (98) em relação a t, tem-se a Equação (93), quando usamos também a relação $\omega = \frac{E}{\hbar}$, isto é:

$$\mathsf{E}[\Psi(x,t)] = \mathsf{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} [\Psi(x,t)] \tag{93}$$

Nesse caso, a grandeza dinâmica E, quanticamente, é representada por um operador diferencial do tipo da Equação (94):

$$\mathsf{E} \leftrightarrow \mathsf{i}\hbar \frac{\partial}{\partial \mathsf{t}} \tag{94}$$

Com esses resultados, podemos reescrever a energia total da partícula em termos dos operadores dados pelas Equações (92) e (94) que resultam na equação (95):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \mathbf{U}(x,\mathbf{t}) = \mathbf{i}\hbar\frac{\partial}{\partial \mathbf{t}}$$
(95)

que pode ser escrita na forma de operadores, como mostra a Equação (96):

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U\right)\Psi(\mathbf{x}, t) = \mathbf{E}\Psi(\mathbf{x}, t)$$
(96)

ou como uma Equação de Autovalores, do tipo:

$$H\Psi(\mathbf{x},t) = E\Psi(\mathbf{x},t) \tag{97}$$

onde, H é o operador hamiltoniano e E, os seus autovalores correspondentes às suas autofunções. O Hamiltoniano do sistema é definido pela Equação (98), como[21]:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U$$
 (98)

Essa é a base da teoria quântica proposta por Schrödinger sobre a qual está direcionado este trabalho de pesquisa. Não obstante, é necessário decantar a matemática que subsidia a teoria, posto que a função de onda $\Psi(x,t)$ é complexa e deve obedecer regras matemáticas que dêem suporte a sua existência, caso contrário, a teoria não terá a devida consistência e nem tampouco representará uma realidade física. Com efeito.

3. O FORMALISMO MATEMÁTICO DA MECÂNICA QUÂNTICA

3.1. O ESPAÇO DE HILBERT

O espaço de Hilbert é um espaço normado, onde a noção central é o produto interno. É a partir do produto interno que se obtém a norma e o conceito de ortogonalidade entre vetores no espaço.

O protótipo de um espaço de Hilbert é o conjunto das funções de quadrado integrável, conforme apresentado na Equação (99):

$$\int \left|\Psi(r)\right|^2 dr < \infty \tag{99}$$

Matematicamente, a razão pela qual a noção de espaço de Hilbert é importante reside no fato de que com ela se pode estender várias noções geométricas intuitivas para espaços de dimensão infinita, como espaços de funções de quadrado integrável.

Espaços de Hilbert encontraram desde cedo um enorme campo de aplicações, particularmente na teoria das equações diferenciais[22], e desenvolveuse daí uma nova área da Matemática denominada Análise Funcional[23]. No entanto, a principal aplicação das noções da teoria dos espaços de Hilbert se deu com o advento da mecânica quântica.

Os registros históricos apontam a feliz coincidência da mecânica quântica ter seus primeiros passos matemáticos desenvolvimentos no Instituto de Física da Universidade de Göttingen, ao lado do Instituto de Matemática onde Hilbert trabalhava[24].

Aqui, mostraremos que o Teorema Espectral, fundamental para o instrumental matemático da teoria quântica, em termos de espaços de Hilbert é coerente com os princípios básicos que todas as teorias físicas devem satisfazer.

3.2. DEFINIÇÃO DE PRODUTO INTERNO

Seja X um espaço vetorial sobre o corpo K.

1. Um produto interno em X é uma aplicação, Equação (100)

$$(\cdot, \cdot)_X : X \times X \to K, (x, y) \mapsto (x, y)_X$$
 (100)

tal que para quaisquer x, y, $z \in X e \alpha$, $\beta \in K$, tem-se as propriedades dadas pela Equação (101):

a)
$$(x, x)_X \ge 0 \ e \ (x, x)_X = 0 \Leftrightarrow x = 0.$$

b) $(\alpha x + \beta y, z)_X = \alpha \ (x, z)_X + \beta \ (y, z)_X.$ (101)
c) $(x, y)_X = \overline{(y, x)}_X.$

O par (X, $(\cdot, \cdot)_X$) chama-se espaço com produto interno ou espaço pré-Hilbertiano.

2. A norma $|\cdot|_X$ em X associada a $(\cdot, \cdot)_X$ é definida por uma expressão na forma da Equação (102), e a métrica associada a $(\cdot, \cdot)_X$ é dada pela Equação (103).

$$|\mathbf{x}|_{\mathsf{X}} = \sqrt{(\mathbf{x}, \mathbf{x})_{\mathsf{X}}}, \ \mathbf{x} \in \mathsf{X}$$
(102)

e a métrica em X associada é

$$d(x, y) = |x - y|_{X} = \sqrt{(x - y, x - y)_{X}}.$$
(103)

3. Um espaço X com produto interno completo no sentido da métrica anterior chamase um espaço de Hilbert. Os espaços de Hilbert serão denotados por H. O espaço Euclidiano R_n é um espaço de Hilbert com produto interno[25], onde:

$$(x, y)_{\mathsf{R}}^{\mathsf{n}} = x_1 y_1 + x_2 y_2 + \ldots + x_{\mathsf{n}} y_{\mathsf{n}}.$$
 (104)

A norma e a métrica associadas a este produto interno são dadas pelas Equações (105) e (106), respectivamente,

$$\left|\mathbf{x}\right|_{\mathsf{R}^{n}}^{2} = \mathbf{x}_{1}^{2} + \mathbf{x}_{2}^{2} + \ldots + \mathbf{x}_{n}^{2}$$
(105)

$$d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = |\mathbf{x} - \mathbf{y}|_{\mathbb{R}^{n}} = \sqrt{(\mathbf{x}_{1} - \mathbf{y}_{1})^{2} + (\mathbf{x}_{2} - \mathbf{y}_{2})^{2} + \dots + (\mathbf{x}_{n} + \mathbf{y}_{n})^{2}}$$
(106)

3.3. PROPOSIÇÃO

Seja (X, $(\cdot,\,\cdot))$ um espaço com produto interno. Então para quaisquer x, z $\in\,$ X tem-se

1. Desigualdade de Cauchy-Schwarz é expressa pela Equação (107).

$$|(\mathbf{x}, \mathbf{y})| \le |\mathbf{x}||\mathbf{y}|.$$
 (107)

2. Desigualdade triangular é expressa pela Equação (108).

$$|x + y| \le |x| + |y|.$$
(108)

3. Regra do paralelogramo é expressa pela Equação (109).

$$|x + y|^{2} + |x - y|^{2} = 2(|x|^{2} + |y|^{2})$$
(109)

4. Identidade de polarização.

Dada uma norma associada a um produto interno, então o produto interno é dado conforme as fases a seguir.

a) produto interno real é expresso pela Equação (110).

$$(x,y) = \frac{1}{4} (|x+y|^2 - |x-y|^2)$$
(110)

b) produto interno complexo é expresso pelas Equações (111), (112) e (113).

$$(x, y) = R(x, y) + J(x, y)i$$
 (111)

$$R(x,y) = \frac{1}{4}(|x+y|^2 - |x-y|^2)$$
(112)

$$J(x,y) = \frac{1}{4}(|x+iy|^2 - |x-iy|^2)$$
(113)

3.4. O ESPAÇO L²_C([0,1])

A norma no espaço C([0, 1]), é expressa pela Equação (114).

$$\left|f\right|_{C([0,1])}^{2} = \int_{0}^{1} \left|f(t)\right|^{2} dt$$
(114)

Considerando as funções complexas, $f:[0,1] \rightarrow C$ contínuas. O espaço resultante $C_{C}([0,1])$ das funções complexas definidas em [0,1] torna-se um espaço com produto interno definido na Equação (115), cuja norma associada é dada por intermédio da Equação (116).

$$(f,g)_{C_{C}([0,1])} = \int_{0}^{1} f(t)g^{*}(t)dt$$
(115)

$$f|_{c_{C}([0,1])}^{2} = \int_{0}^{1} |f(t)|^{2} dt$$
(116)

3.5. O ESPAÇO L²(C)

O espaço L²(C) das sucessões complexas $z = (z_n)_{n=1}^{\infty}$ pode ser estabelecido conforme a Equação (117), tal que,

$$\sum_{1}^{\infty} \left| \mathbf{z}_{n} \right|^{2} < \infty \tag{117}$$

é um espaço de Hilbert com produto interno dado pela Equação (118),

$$(z,w)_{L^{2}(C)} = \sum_{1}^{\infty} z_{n} w_{n}^{*}$$
(118)

A convergência da série resulta da desigualdade de Cauchy-Schwarz para as séries dadas pela Equação (119).

$$\left| (z, w)_{L^{2}(C)} \right| \leq \sum \left| z_{n} \right\| w_{n}^{*} \right| \leq \left(\sum_{n=1}^{\infty} \left| z_{n} \right|^{2} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \left| w_{n}^{*} \right|^{2} \right)^{\frac{1}{2}}$$
(119)

A norma associada ao produto interno, então, é dada pela fórmula:

$$\left|z\right|_{L^{2}(C)}^{2} = \sum_{n=1}^{\infty} \left|z_{n}\right|^{2}$$
(120)

Como L²(C) é um espaço completo para a métrica associada a esta norma,então L²(C) é um espaço de Hilbert.

O espaço L²(C) foi introduzido por D. Hilbert em 1912, mas a definição abstrata de espaço de Hilbert só foi dada em 1927 por J. Von Neumann num artigo sobre mecânica quântica[26].

Por que a descrição da Mecânica Quântica em termos de espaços de Hilbert é coerente com os princípios básicos que todas as teorias físicas devem satisfazer? A chave da resposta a esta questão está no chamado Teorema Espectral. Vamos enuncia-lo no caso de matrizes agindo em espaços de Hilbert de dimensão finita.

3.6. O TEOREMA ESPECTRAL

Se A é uma matriz autoadjunta com autovalores $\lambda_1....\lambda_m$ o teorema espectral afirma que A pode ser escrita na forma

$$A = \lambda_1 P_1 + \dots + \lambda_m P_m = \sum_{K=1}^m \lambda_K P_K$$
(121)

onde P_K são matrizes satisfazendo

$$P_a P_b = \delta_{ab} P_b$$

 $P_a^{\dagger} = P_a$

para todos a e a e

$$\sum_{K=1}^{m} \mathsf{P}_{K} = 1 \tag{122}$$

Note-se que, como A = $\lambda_1 P_1$ +....+ $\lambda_m P_m$, vale para todo vetor normalizado Ψ

$$(\Psi, A \Psi) = \lambda_1(\Psi, P_1\Psi) + \dots + \lambda_m(\Psi, P_m\Psi)$$
(123)

Definindo $p_k = (\Psi, P_K \Psi)$ tem-se dos fatos que $P_k^2 = P_k e P_k^{\dagger} = P_k$

$$p_k$$
 = (Ψ, $P_KΨ$) = (Ψ, $P^2_KΨ$) = (Ψ, $P_k^+P_KΨ$) = ($P_KΨ$, $P_KΨ$) = II $P_KΨ$ II² ≥ 0

Fora isso, pela Equação (122) temos

$$\sum_{K=1}^{m} P_{K} = \sum (\Psi, P_{K}\Psi) = (\Psi, \Psi) = 1$$
(124)

Assim, a Equação (123) significa

$$(\Psi, A \Psi) = \lambda_1 p_1 + \dots + \lambda_m p_m \tag{125}$$

concluindo que a Equação (125) tem a interpretação de uma média sobre o espectro de A ponderada pelas probabilidades (pesos) p_k.

Isso é fundamental para a interpretação probabilística da Mecânica Quântica, fato esse destacado por von Neumann nos primórdios da Física Quântica.

3.7. ESPAÇO DAS FUNÇÕES DE ONDA ASSOCIADAS À PARTÍCULAS (F):

O formalismo matemático da teoria quântica pode ser tratado em termos do espaço de Hilbert, cujos vetores são representados por funções complexas de variável real, ou seja, a mecânica quântica baseia-se no princípio fundamental da existência de um espaço linear $\mathcal{F} = \{\psi\}$ cujos elementos são funções de onda, na notação de Schrödinger.

Os postulados de M. Born, expostos na Seção 1.1, do Capítulo I, quanto à função de onda, seguem rigorosamente essa estrutura dispondo do caráter probabilístico para a determinação das grandezas físicas relacionadas ao movimento da partícula, no qual está associada uma onda.

Esta função deve ser complexa e deve possuir determinadas regularidades: ser de quadrado integrável, definida em todo o espaço, contínua, e infinitamente diferenciável. O conjunto dessas funções é chamado matematicamente de L^2 e possui a estrutura de um espaço de Hilbert. Logo, \mathcal{F} é o conjunto das funções de onda de L^2 , portanto, \mathcal{F} é um subespaço de L^2 .

Adicionalmente, funções complexas de variável real representam vetores do espaço de Hilbert. Porém, nem todas as funções complexas de variável real podem ser vetores de Hilbert. Para que isso ocorra é necessário que a função satisfaça a condição básica do quadrado de seu módulo traduzir uma função probabilidade, estabelecendo, deste modo, a ligação com os resultados experimentais. Assim, só se admitem como vetores em H as funções $\Psi(r,t)$ que possuam uma norma finita.

Na interpretação de Born, a condição da Equação (81) limita as funções admissíveis às que têm a integral finita, pois só essas podem satisfazê-la, por multiplicação de um fator constante ou fator de normação.

3.8. ESTRUTURA DO ESPAÇO F DAS FUNÇÕES DE ONDA

a) F é um espaço vetorial.

O espaço \mathscr{F} satisfaz todos os critérios de um espaço vetorial. Como, por exemplo, se $\Psi_1(r) \in \Psi_2(r) \in \mathscr{F}$, então a combinação dada pela Equação (126) se verifica.

$$\Psi(\mathbf{r}) = \lambda_1 \Psi_1(\mathbf{r}) + \lambda_2 \Psi_2(\mathbf{r}) \in \mathcal{F}$$
(126)

onde λ_1 e λ_2 são dois números complexos quaisquer.

b) \mathcal{F} admite a definição de produto escalar. O número complexo (φ, Ψ) é o produto escalar de $\Psi(r)$ por $\varphi(r)$, o qual, por definição, é igual ao apresentado na Equação(115). Essa integral(127) sempre converge se $\varphi \in \Psi$ pertencem a \mathcal{F} .

$$(\varphi, \Psi) = \int \varphi^*(r) \psi(r) dr \tag{127}$$

3.9. PRINCIPAIS PROPRIEDADES DO PRODUTO ESCALAR

- a) Hermiticidade: $(\phi, \Psi) = (\Psi, \phi)^*$;
- b) Linearidade: $(\phi, \lambda_1 \Psi_1 + \lambda_2 \Psi_2) = \lambda_1(\phi, \Psi_1) + \lambda_2(\phi, \Psi_2);$
- c) Anti-linearidade: $(\lambda_1 \phi_1 + \lambda_2 \phi_2, \Psi) = \lambda^*_1(\phi_1, \Psi) + \lambda^*_2(\phi_2, \Psi)$
- d) Se (ϕ , Ψ)=0, ϕ e Ψ são ditos ortogonais;

e) $(\Psi, \Psi) = \int |\Psi|^2 d^3 r$ é um número real e positivo, sendo igual a zero se e somente se $\Psi \equiv 0$.

f) com um produto escalar pode-se definir $\sqrt{(\psi,\psi)}$, chamada norma de $\Psi(r)$

g) Desigualdade de Schwarz: $|(\psi_1, \psi_2)| \le \sqrt{(\psi_1, \psi_1)} \cdot \sqrt{(\psi_2, \psi_2)}$

h) distância entre funções: d(φ, ψ) = $\sqrt{((\varphi - \psi), (\varphi - \psi))}$

3.10. OPERADORES LINEARES SOBRE O ESPAÇO VETORIAL F

a) Definição 1.

Um operador é, por definição, um ente matemático que atua sobre uma função para produzir outra função. Por exemplo, seja O um operador, f e g duas funções, tais que Of=g.

b) Definição 2.

Um operador linear A, associa cada função $\Psi(r)$ $\mathcal{E}_{\mathcal{F}}$ a outra função $\varphi(r)$, satisfazendo as condições seguintes.

•
$$\varphi(\mathbf{r}) = A \Psi(\mathbf{r});$$

• $A[\lambda_1\Psi_1(r) + \lambda_2\Psi_2(r)] = \lambda_1 A\Psi_1(r) + \lambda_2 A\Psi_2(r)$, para quaisquer $\Psi_1(r), \Psi_2(r) \in \mathcal{F} e \lambda_1, \lambda_2 \in C$.

c) Produto de operadores

Sejam A e B dois operadores lineares. O produto AB é definido tendo como base a equação (128):

$$(AB) \Psi(r) = A[B\Psi(r)]$$
(128)

• Em geral, o produto de operadores não é comutativo, ou seja, AB ≠ BA.

• Chama-se comutador de A e B o operador denotado por [A, B] e definido por:

d) Definição 3.

Um operador linear H é hermitiano se para todo par de funções $\Psi(r)$ e $\varphi(r)$ se cumpre a igualdade da equação (129).

$$\int \psi^*(\mathbf{r})(\mathbf{H}\varphi(\mathbf{r}))d\mathbf{r} = \int (\mathbf{H}\psi(\mathbf{r}))^*\varphi(\mathbf{r})d\mathbf{r}$$
(129)

• Todos os operadores na mecânica quântica são hermitianos.

• São três as principais propriedades dos operadores hermitianos, a saber.

1. Os operadores hermitianos possuem autovalores reais.

2. As autofunções de um operador hermitiano são ou podem ser escolhidas de tal forma que sejam ortogonais.

 As autofunções de um operador linear hermitiano formam um conjunto completo e ortogonal de funções.

3.11. O CARÁTER ESTATÍSTICO DAS FUNÇÕES DE ONDA

A função que governa a distribuição de dados em uma experiência é chamada função densidade de probabilidade. Ela é contínua e é utilizada para representar a distribuição de probabilidade[26].

A probabilidade que um dado qualquer, obtido durante a medida, pertença ao intervalo $[x_1, x_2]$ é dada por intermédio do resultado da Equação (130). Onde f(x) é a função densidade de probabilidade. Nesta expressão x representa a grandeza que está sendo observada.

$$P(x_1, x_2) = \int_{x_1}^{x_2} f(x) dx, \qquad (130)$$

Em uma experiência podemos contar quantos dados estão entre os valores x₁ e x₂. Dividindo essa quantidade pelo total de dados (se este último é suficientemente grande para que flutuações estatísticas tenham pouco efeito) obtém-se a integral de f(x) entre os pontos x₁ e x₂, dada na Equação (130). É dessa forma que se pode conhecer f(x), a função que governa a medida.

A forma da função densidade de probabilidade depende da grandeza medida e das condições experimentais. Além das distribuições contínuas, há também medidas que são governadas por distribuições discretas. Neste caso a função é definida apenas para determinados valores conforme expressa a Equação (131).

$$P(x_1, x_2, ..., x_n) = f(x_1) + f(x_2) + ... + f(x_n)$$
(131)

onde f(x) é a função densidade de probabilidade e P(x₁, x₂,..., x_n) é a probabilidade de um dado qualquer obtido durante a medida assumir os valores x₁, x₂,... ou x_n.

3.12. PROPRIEDADES DA FUNÇÃO DENSIDADE DE PROBABILIDADE

Ao se observar uma grandeza a chance de se obter qualquer medida é 1 (um), ou seja, algum resultado é, certamente, obtido. Isso deve impor alguma condição à função densidade de probabilidade da Equação (131). Assim, a probabilidade de todo o espaço amostral é 1(um).. Logo, pode-se escrever a Equação (132):

$$\sum P(x_1, x_2) = 1$$
(132)

Sendo f uma função contínua, tem-se uma integral conforme a Equação (133).

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx = 1$$
(133)

A função densidade de probabilidade, por ter o significado de densidade, não pode ser negativa, logo se escreve a Equação (134), válida para qualquer valor de x.

$$f(x) \ge 0 \tag{134}$$

Então, estruturada a base matemática pretende-se mostrar que é possível construir uma função complexa, tal qual as funções de onda foram estabelecidas para a mecânica quântica, obedecendo as propriedades do espaço de Hilbert, mas, sobretudo que seja solução da equação de Schrödinger ante a dualidade onda-partícula.

4. UMA PROPOSTA PARA SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER ANTE A DUALIDADE ONDA-PARTÍCULA.

4.1. A INTERPRETAÇÃO DA TEORIA QUÂNTICA

Como proposta didática apresentamos uma análise matemática para a "partwave", que deverá representar qualquer objeto na escala atômica ou subatômica que possua comportamento dual, como por exemplo, um elétron ou um fóton. Essa denominação justifica-se pelo fato de não perdermos de vista que esses objetos podem, em determinadas circunstâncias experimentais, ser considerados partículas ou ondas, e que obedecem ao princípio da complementaridade de Bohr[22].

4.2. A DUALIDADE ONDA-PARTÍCULA

Na teoria quântica, a experiência da dupla fenda, veja figura abaixo, evidencia o comportamento ondulatório das partículas atômicas, como o elétron.



Figura 8 - Esquema da experiência da dupla fenda. Os gráficos representam a amplitude do sinal detectado quando uma única fenda é aberta e quando ambas as fendas são abertas (adaptado de Lectures on Physics de R. Feynman[10]).

O efeito fotoelétrico, interpretado por Einstein comprovou o comportamento corpuscular da radiação. Em seguida de Broglie propôs que tanto a matéria quanto a radiação tem comportamento dual.[02]. No entanto, foram Heisenberg, Born, Jordan e Bohr quem, em 1927-30, mostraram quão essencial era o conceito de probabilidade para a união das descrições ondulatória e corpuscular da matéria e radiação. [03, 97].

Essa é a razão pela qual utilizamos o conceito de probabilidade de Max Born para analisar a função que representa o objeto quântico, mostrando que a mesma é complexa e é solução da equação de Schrödinger.

4.3. A NOVA PROPOSTA MATEMÁTICA PARA A INTERPRETAÇÃO DA DUALIDADE

Considerando as relações (135) de de Broglie e de Einstein, relacionamos as características da onda e da partícula, da seguinte forma:

$$\begin{array}{cccc}
 & & & & \\
 & & & & \\
 & & & & \downarrow & \\
 & v & \mapsto & \mathsf{E} = \mathsf{h}v & \\
 & \lambda & \mapsto & \mathsf{p} = \mathsf{h}/\lambda
\end{array}$$
(135)

- À energia total E, da partícula, está relacionada a freqüência v, da onda.
- Ao momento p, da partícula, está relacionado o comprimento de onda λ, da onda.

Foi de Broglie que propôs associar uma onda ao movimento de uma partícula [02, 87]. Da mesma forma, vamos supor um ente, denominado *"part-wave"*, cujo comportamento segue o mesmo princípio da dualidade. Então, seu movimento poderá ser analisado através de superposição de ondas planas, considerando a interpretação probabilística de Max Born, onde a probabilidade de uma partícula, como o elétron, estar localizada entre x e x+dx, em um instante t, pode ser dada por $\rho(x)dx$.

Portanto, iremos supor que esse objeto quântico esteja localizado em um intervalo que contenha o ponto x_0 , fazendo uma série de medidas de sua posição em torno desse único ponto, de modo a calcular a média <x> desses valores para, finalmente, obter um valor real P para a probabilidade, definida por:

$$\mathsf{P}=\rho(<\mathsf{x}>)\mathsf{d}<\mathsf{x}>\tag{136}$$

Considerando ainda que só é possível localizar uma única *"part-wave"* em torno de $x_0 \in]x, x+\Delta x[$, definimos a densidade de probabilidade, como:



Figura 9 - Intervalo que contém o "part-wave"

Não obstante, observe (figura 9) que para $x=x_0$, teríamos $\Delta x=0$, o que mostra a impossibilidade de se obter um valor numérico para $\rho(x)$, e evidencia a impossibilidade de se obter um valor preciso para a posição.

Porém, considerando a média <x> da coordenada x, em torno de x₀, a probabilidade total P, em (136), é constante e não deverá tender a zero nem mesmo se $\Delta x \rightarrow \infty$. Mas, a densidade de probabilidade, definida em (137), certamente deverá tender a zero e terá um valor considerável quando $\Delta x \rightarrow 0$. Isso implica que esse objeto quântico só poderá ser localizado em uma pequena região onde a densidade assume um valor considerável. No entanto, a probabilidade deverá ser a soma das probabilidades nessa região. Então, para o *"part-wave"* situado em torno de x₀, teremos:

$$\sum_{n} \rho(x_{n}) \Delta \mathbf{x}_{n} = \boldsymbol{\xi}$$
(138)

Transformando a soma em integral, temos:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x) dx = \xi$$
(139)

Para que essa relação seja consistente com o postulado de Max Born, introduzimos a função de Dirac:

$$\int_{x}^{x+dx} \delta(x-\langle x \rangle) dx = \begin{cases} 0, \langle x \rangle \notin]x, x+dx[\\ 1, \langle x \rangle \in]x, x+dx[\end{cases}$$
(140)

Com essas considerações reescrevemos a Equação (141), na forma:

$$\rho(x) = \xi \delta(x - \langle x \rangle) \tag{141}$$

Por outro lado, o comportamento ondulatório do *"part-wave"* sugere que lhe seja associado uma função que obedece certas condições de existência. Então, pelas relações (140) e (141), podemos considerar a seguinte propriedade da função delta:

$$f(\langle x \rangle) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x - \langle x \rangle)dx$$
(142)

onde f(x) é uma função contínua.

Nessa arcabouço, tal função de preservar as regras quânticas estabelecidas para as funções de onda que são definidas na teoria de M. Born[12], onde a função de onda $\Psi(x,t)$ é complexa e precisa ser normalizada, ou seja,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left| \Psi(\mathbf{x}, t) \right|^2 d\mathbf{x} = 1 ,$$

Portanto, se a *"part-wave"* é definida nessas condições, podemos estimar sua localização em alguma região do espaço. Em outras palavras, podemos calcular, através dessa função, a probabilidade de encontrá-la em um pequeno intervalo desse espaço.

Nessa direção, para podermos utilizar a função de onda para o cálculo da probabilidade, consideremos as funções contínuas

$$\Psi_1(\mathbf{x},t), \Psi_2(\mathbf{x},t),..., \Psi_n(\mathbf{x},t),...$$
 (143)

que devem formar um conjunto completo ortonormal, constituindo a base de um espaço de funções. Desse modo, podemos escrever:

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{n=1}^{\infty} \mathbf{C}_n \Psi_n(\mathbf{x}, \mathbf{t})$$
(144)

No entanto, nessa hipótese da *"part-wave"*, essas funções de onda podem ser escritas na forma:

$$\Psi = \cos[k(x - \langle x \rangle) - \omega t] + \gamma \operatorname{sen}[k(x - \langle x \rangle) - \omega t]$$
(145)

onde k = $\frac{2\pi}{\lambda}$ e ω = $2\pi v$.

e pelas relações (135) obtemos p = $\hbar k$ e E = $\hbar \omega$, que substituindo em (145), teremos a função (146):

$$\Psi = \cos \frac{1}{\hbar} [(p - \langle p \rangle)(x - \langle x \rangle) - (E - \langle E \rangle t] + \gamma \sin \frac{1}{\hbar} [(p - \langle p \rangle)(x - \langle x \rangle) - (E - \langle E \rangle) t]$$
(146)

ou, considerando o espaço das posições, na forma da função (147):

$$\Psi(\mathbf{x}, \mathbf{t}) = \cos \frac{1}{\hbar} [\Delta \mathbf{p}(\mathbf{x} - \langle \mathbf{x} \rangle) - \Delta \mathbf{E} \mathbf{t}] + \gamma \operatorname{sen} \frac{1}{\hbar} [\Delta \mathbf{p}(\mathbf{x} - \langle \mathbf{x} \rangle) - \Delta \mathbf{E} \mathbf{t}]$$
(147)

Por outro lado, pela teoria de Schrödinger[09], essa função Ψ deve satisfazer a equação de onda:

$$\alpha \frac{\partial^2 \Psi(\mathbf{x}, \mathbf{t})}{\partial x^2} + \mathbf{U} \Psi(\mathbf{x}, \mathbf{t}) = \beta \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, \mathbf{t})}{\partial \mathbf{t}}$$
(148)

Derivando (147) em relação ao espaço e ao tempo, teremos as Equações (150) e (151):

$$\frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, \mathbf{t})}{\partial \mathbf{x}} = -\frac{\Delta p}{\hbar} \operatorname{sen} \frac{1}{\hbar} [\Delta p(\mathbf{x} - \langle \mathbf{x} \rangle) - \Delta \mathbf{E} \mathbf{t}] + \gamma \frac{\Delta p}{\hbar} \cos \frac{1}{\hbar} [\Delta p(\mathbf{x} - \langle \mathbf{x} \rangle) - \Delta \mathbf{E} \mathbf{t}]$$
(149)

$$\frac{\partial^2 \Psi(\mathbf{x}, \mathbf{t})}{\partial \mathbf{x}^2} = -\frac{\Delta \mathbf{p}^2}{\hbar^2} \cos \frac{1}{\hbar} [\Delta \mathbf{p}(\mathbf{x} - \langle \mathbf{x} \rangle) - \Delta \mathbf{E} \mathbf{t}] - \gamma \frac{\Delta \mathbf{p}^2}{\hbar^2} \sin \frac{1}{\hbar} [\Delta \mathbf{p}(\mathbf{x} - \langle \mathbf{x} \rangle) - \Delta \mathbf{E} \mathbf{t}]$$
(150)

$$\frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, \mathbf{t})}{\partial \mathbf{t}} = \frac{\Delta \mathsf{E}}{\hbar} \operatorname{sen} \frac{1}{\hbar} [\Delta \mathsf{p}(\mathbf{x} - \langle \mathbf{x} \rangle) - \Delta \mathsf{E} \mathbf{t}] - \gamma \frac{\Delta \mathsf{E}}{\hbar} \cos \frac{1}{\hbar} [\Delta \mathsf{p}(\mathbf{x} - \langle \mathbf{x} \rangle) - \Delta \mathsf{E} \mathbf{t}]$$
(151)

Substituindo as Equações (150) e (151) na Equação (148), temos:

$$\begin{bmatrix} -\alpha \frac{\Delta p^{2}}{\hbar^{2}} + U + \beta \gamma \frac{\Delta E}{\hbar} \end{bmatrix} \cos \frac{1}{\hbar} [\Delta p(x - \langle x \rangle) - \Delta Et] + \\ + \left[-\alpha \gamma \frac{\Delta p^{2}}{\hbar^{2}} + U \gamma - \beta \frac{\Delta E}{\hbar} \right] \sin \frac{1}{\hbar} (\Delta p(x - \langle x \rangle) - \Delta Et) = 0$$
(152)

Então, para que seja válida a igualdade na Equação (152), temos:

$$\alpha \frac{\Delta p^2}{\hbar^2} + U + \beta \gamma \frac{\Delta E}{\hbar} = 0$$
(153)

$$\alpha \gamma \frac{\Delta p^2}{\hbar^2} + U \gamma \quad \beta \frac{\Delta E}{\hbar} = 0$$
(154)

Agora, usando as Equações (153) e (154), obtemos a Equação (155):

$$\beta \gamma \frac{\Delta \mathsf{E}}{\hbar} + \beta \frac{\Delta \mathsf{E}}{\gamma \hbar} = 0 \tag{155}$$

Que resulta,

$$\gamma + \frac{1}{\gamma} = 0$$
$$\gamma^{2} = -1$$
$$\gamma = \pm \sqrt{-1}$$
$$\gamma = \pm i$$

Portanto, a função (147) pode ser definida pela função (156):

$$\Psi(\mathbf{x},\mathbf{t}) = \cos\frac{1}{\hbar}[\Delta p(\mathbf{x} - \langle \mathbf{x} \rangle) - \Delta \mathbf{E} \mathbf{t}] + i \operatorname{sen} \frac{1}{\hbar}[\Delta p(\mathbf{x} - \langle \mathbf{x} \rangle) - \Delta \mathbf{E} \mathbf{t}]$$
(156)

que é uma função complexa.

Finalmente, multiplicando a Equação (144) pelo complexo conjugado Ψ_m^* , e integrando, teremos:

$$\int f(x)\Psi_{m}^{*}(\mathbf{x},t)d\mathbf{x} = \int \sum_{n=1}^{\infty} C_{n}\Psi_{m}^{*}(\mathbf{x},t)\Psi_{n}(\mathbf{x},t)d\mathbf{x} = C_{n}$$
(157)

Agora, substituindo (157) em (144), obtemos a equação (158):

$$f(x) = \int f(x') \sum_{n=1}^{\infty} \Psi_{m}^{*}(\mathbf{x}', \mathbf{t}) \Psi_{n}(\mathbf{x}, \mathbf{t}) d\mathbf{x}'$$
(158)

E, comparando (158) com (142), obtemos a Equação (159):

$$\sum_{n=1}^{\infty} \Psi_{m}^{*}(\mathbf{x}', t) \Psi_{n}(\mathbf{x}, t) = \delta(x - x')$$
(159)

Considerando, ainda, as flutuações em torno da média <x>, escrevemos a Equação (160):

$$\sum_{n=1}^{\infty} \Psi_{m}^{*}(<\mathbf{x}>,t)\Psi_{n}(\mathbf{x},t) = \delta(x - <\mathbf{x}>)$$
(160)

E integrando, resulta a equação (161):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(\mathbf{x},t) \cdot \Psi(\mathbf{x},t) d\mathbf{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(\mathbf{x} - \langle \mathbf{x} \rangle)$$
(161)

Logo, as equações (140) e (161) garantem que para que seja possível uma localização de um *"part-wave"* em alguma região do espaço, utilizando uma função de onda complexa, é necessário que se tenha a condição (158):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^{*}(\mathbf{x},t) \cdot \Psi(\mathbf{x},t) d\mathbf{x} = 1 \qquad \text{ou} \qquad \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(\mathbf{x},t)|^{2} d\mathbf{x} = 1$$
(162)

E, para que a equação (162) possa convergir é necessário que a função de onda $\Psi(x,t)$ seja de quadrado integrável, definida em todo o espaço e infinitamente diferenciável, como mostrado em [04].

Dessa forma podemos estabelecer uma relação entre a função de onda complexa e a densidade de probabilidade dada pela Equação (163):

$$\rho(\mathbf{x},t) = \Psi(\mathbf{x},t)\Psi^*(\mathbf{x},t) \tag{163}$$

Então, se no instante t, é feita a localização de um *"part-wave"* associado à função de onda $\Psi(x,t)$, a probabilidade de que ele seja encontrado em uma coordenada no intervalo]x,x+dx[é igual a $\Psi(x,t) \Psi^*(x,t)dx$.

Logo, voltando à Equação (153), para $\gamma = i$, obtemos a Equação (164):

$$-\alpha \frac{\Delta p^2}{\hbar^2} + U + i\beta \frac{\Delta E}{\hbar} = 0$$
(164)

que deve ser consistente com a equação (165):

$$\frac{\mathsf{p}^2}{2m} + \mathsf{U} = \mathsf{E} \tag{165}$$

onde E é a energia total de uma partícula de massa *m*, com energia cinética $\frac{p^2}{2m}$ e energia potencial U.

Assim, para uma função *"part-wave"* com certa precisão em x, e no tempo t, pelo princípio da incerteza de Heisenberg, teremos uma maior incerteza no momento p e na energia E.

Porém, considerando as flutuações em torno da média, temos a equação(166).

$$(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle + \langle p \rangle^2$$
(166)

também chamada de dispersão, que tem a vantagem de não se anular, mesmo quando =0. Então, por (166), da Equação (165) se obtém a Equação (167):

$$\frac{(\Delta \mathbf{p})^2}{2m} + \mathbf{U} = \Delta \mathbf{E}$$
(167)

Comparando (164) e (167), obtemos (168) e (169):

$$\alpha = -\frac{\hbar^2}{2m} \tag{168}$$

$$\beta = i\hbar \tag{169}$$

que substituindo em (148), se obtém a Equação (170):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(\mathbf{x},t)}{\partial \mathbf{x}^2} + \mathbf{U}\Psi(\mathbf{x},t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{x},t)}{\partial t}$$
(170)

que é a chamada Equação de Schrödinger dependente do tempo da mecânica quântica. Isso demonstra que a proposta da *"part-wave"* está de acordo com os postulados da mecânica quântica.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

À revolucionária hipótese de de Broglie concernente ao caráter universal da dualidade onda-partícula acrescentou ainda mais estranhas propriedades aos átomos e moléculas. Estas propriedades podem ser assim resumidas: propriedades ondulatórias dos corpúsculos microscópios e propriedades corpusculares das ondas eletromagnéticas; quantização do momento linear e a explicação da quantização do momento angular do elétron nos estados estacionários.

No entanto, as propriedades acima registradas foram sendo introduzidas no quadro da física clássica como hipóteses "ad hoc". As dificuldades eram grandes porque do ponto de vista da representação matemática e da fenomenologia física, os modelos ondulatórios e corpusculares são mutuamente excludentes. Uma onda "bem definida" (com freqüência precisa) é "algo espalhado" no espaço das distâncias, algo não localizado, portanto incapaz de representar algo localizado como um corpúsculo. Já para representarmos um corpúsculo nesta linguagem, precisamos de um "pulso" ou um "pacote" de ondas que só pode ser obtido pela superposição de infinitas ondas.

Neste trabalho foi apresentada a hipótese da função part-wave, que consiste em representar onda e partícula através de uma função matemática, obedecendo rigorosamente o tratamento dado por M. Born quanto "as suas" funções de onda e definida no espaço L² – um subespaço vetorial do espaço de Hilbert.

A auto-consistência desta hipótese está na verificação e obtenção da equação de Schrödinger, cujas aplicações revelaram-se nos domínios da moderna tecnologia e em pesquisas dentro de várias áreas do conhecimento científico, resistindo a décadas de debates teóricos e testes experimentais.

As perspectivas futuras e preliminares que certamente decorrerão desta conjectura, são:

- i) demonstrar a similaridade entre os espaços duais para a onda e para o elétron no L², usando a função part-wave;
- ii) obter a equivalência matricial através da equação de autovalores, usando a função part-wave;
- iii) aprofundar os estudos estatísticos sobre a função part-wave;

- iv) confrontar todos os resultados físicos obtidos pelo uso da equação de Schrödinger nas diversas áreas de aplicação – química, engenharia etc., usando a função part-wave.
- v) Desenvolver simulações utilizando o MATLAB para mostrar a solução aproximada da Equação de Schrödinger.

REFERÊNCIAS

- [01] ROSA, Pedro Sérgio. Louis de Broglie e as ondas de matéria. 2004. Dissertação (Mestrado em Física) – Instituto de Física, Universidade Estadual de Campinas, Campinas.
- [02] GRECA, Ileana; MOREIRA, Marco. Uma Revisão da Literatura sobre Estudos Relativos ao Ensino da Mecânica Quântica Introdutória. Investigações em Ensino de Ciências. Porto Alegre, 2001. Disponível em http://www.if.ufrgs.br/public/ensino/vol6/n1/v6_n1_a1.htm. Acesso em: 12 de junho de 2007.
- [03] SCHRÖDINGER, E. Collected Papers on Wave Mechanics, Blackie, 1928
- [04] BORN, M., The Mechanics of the Atom, Bell, 1927.
- [05] COHEN, Claude; Bernard Diu, Franck Laloë, *Quantum Mecanics*, , Paris, France, 1977. vol. 1.
- [06] EINSTEIN, A., Ann. Phys. 1905. 17, 132.
- [07] DE BROGLIE, Louis., *La mechanique ondulatoire du photon. Une nouvelle theorie de la lumiere, tome premier*. Paris. 1940, pp. 39.
- [08] EINSTEIN, A. Zur Elektrodynamik bewegter Körper, Ann. d. Phys. 1905. pp. 17, 891.
- [09] EISBERG, Robert Martin, *Fundamentals of Moder Physics*. California, John Wiley & Sons. 1979.
- [10] SPIEGEL, M. R., Schaum's Outline of Theory and Problems of Fourier Analysis. Connecticut. EUA McGraw-Hill. 1976.
- [11] MESSIAH, A. Quantum Mechanics, North-Holland. 1962. Vols. I and II,
- [12] HEISENBERG, W. The Principles of the Quantum Theory, University of Chicago. Press, 1930.
- [13] LEWIS, G.N. Nature. 1926, n° 981, volume 118.
- [14] LAPIDUS, Leon & PINDER, George F. Numerical Solution of Partial Differential Equations in Science and Engineering, New York, JOHN WILEY & SONS,.
- [15] LIBOFF, R.L. Introductory Quantum Mechanics. New York, EUA. Addison-Wesley, Publishing Company. Cornell University, 1999.

- [16] DIAS, J.C. Química Quântica-Fundamentos e Métodos. Lisboa, Portugal. Fundação Calouste Gulbekian, 1978.
- [17] GREINER, W. *Quantenmechanik Teil, Eine Einführung*. Springer-Verlag. Berlin. Heidelberg. 1993.
- [18] Ashcroft/Mermin, Solid State Physiscs. Books/Cole. New York, EUA, 1975.
- [19] SCHIFF, L.I. Quantum Mechanics. McGraw-Hill. Connecticut, EUA, 1949.
- [20] FELLER, W. *An Introduction to Probability Theory and its Applictions*. New York, EUA. Wiley & Sons. 1968.
- [21] MATHEWS, P.T., Introduction to Quantum Mechanics. McGraw-Hill, 1963.
- [22] ZILL, D.G. A first course in differential equations with modeling applications. Los Angeles, EUA. Brooks/Cole. 2001.
- [23] GEL'FAND, I.M; SHILOV, G.E.. Generalized Functions. Academic Press, New York, 1964.
- [24] SCHMEIDLER, W. Linear Operators in Hilbert Space. Academic Press, New York. 1965.
- [25] SOULE, J.L.. *Linear Operators in Hilbert Space*. Gordon and Breach. New York. 1967.
- [26] BASS, J. *Elements of Probability Theory*. Academic Press. New York, EUA. 1966.