

Oscilador Harmônico Simples

- Motivação
- a) espectroscopia molecular,
 - b) cristais e outras estruturas no estado sólido,
 - c) estrutura nuclear,
 - d) teoria de campo,
 - e) ótica,
 - f) mecânica estatística,
 - g) aproximante para qualquer poço quântico,
 - h) etc. Além de ser simples e pedagógico.

Autokets e autovalores de energia

A Hamiltoniana é: $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ com $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \rightarrow k$ (lei de Hooke)

Definimos 2 operadores

$$\begin{cases} a \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{ip}{m\omega} \right) \rightarrow \text{de aniquilação} \\ a^\dagger \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{ip}{m\omega} \right) \rightarrow \text{de criação} \end{cases}$$

Note que a e a^\dagger não são Hermiteanos

Autokets e autovalores de energia

Comecemos, calculando a comutação entre os operadores a e a^\dagger

$$\begin{aligned} [a, a^\dagger] &= \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{ip}{m\omega} \right), \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{ip}{m\omega} \right) \right] = \frac{m\omega}{2\hbar} \left\{ \left[x, -\frac{ip}{m\omega} \right] + \left[\frac{ip}{m\omega}, x \right] \right\} \\ &= -\frac{2im\omega}{2\hbar m\omega} [x, p] = -\frac{i}{\hbar} i\hbar = 1 \quad \therefore \boxed{[a, a^\dagger] = 1} \end{aligned}$$

Definiremos o operador número, por: $N = a^\dagger a$. Note que

$$\begin{aligned} N = a^\dagger a &= \frac{m\omega}{2\hbar} \left(x - \frac{ip}{m\omega} \right) \left(x + \frac{ip}{m\omega} \right) = \frac{m\omega x^2}{2\hbar} + \frac{p^2}{2m\hbar\omega} + \frac{i}{2\hbar} [x, p] = \\ &= \frac{1}{\hbar\omega} \underbrace{\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right)}_H - \frac{1}{2} \quad \therefore \boxed{H = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right)} \end{aligned}$$

Como $[H, N] = 0 \rightarrow$ eles podem ser diagonalizados simultaneamente.

Assim, basta resolver $N|n\rangle = n|n\rangle$ que teremos $H|n\rangle = E_n|n\rangle$.

Comparação direta, fornece o espectro do oscilador em função de n

$$\boxed{E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega}$$

Operadores de criação e de aniquilação

Para apreciar o significado físico de a , a^\dagger , e N , considere as

$$\text{relações de comutação} \quad \left\{ \begin{array}{l} [N, a^\dagger] = [a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger \underbrace{[a, a^\dagger]}_1 + \underbrace{[a^\dagger, a^\dagger]}_0 a = a^\dagger \\ [N, a] = [a^\dagger a, a] = a^\dagger \underbrace{[a, a]}_0 + \underbrace{[a^\dagger, a]}_{-1} a = -a \end{array} \right.$$

$$\text{Assim, temos} \quad \left\{ \begin{array}{l} Na^\dagger|n\rangle = ([N, a^\dagger] + a^\dagger N)|n\rangle = (a^\dagger + na^\dagger)|n\rangle = (n+1)a^\dagger|n\rangle \\ Na|n\rangle = ([N, a] + aN)|n\rangle = (-a + na)|n\rangle = (n-1)a|n\rangle \end{array} \right.$$

$$\text{o que permite concluir} \quad \left\{ \begin{array}{l} a^\dagger|n\rangle \text{ é autoket de } N \text{ com autovalor } n+1 \\ a|n\rangle \text{ é autoket de } N \text{ com autovalor } n-1 \end{array} \right.$$

$$\text{Ou seja, } a^\dagger|n\rangle = c_2|n+1\rangle \text{ e } a|n\rangle = c_1|n-1\rangle$$

Operadores de criação e de aniquilação

Se $\forall n$ considerarmos que os kets $|n\rangle$ são normalizados, temos

$$a|n\rangle = c_1|n-1\rangle \rightarrow \langle n| \underbrace{a^\dagger a}_N |n\rangle = |c_1|^2 \text{ e } \therefore |c_1|^2 = n \quad (\because n \text{ é positivo e real})$$

$$a^\dagger|n\rangle = c_2|n+1\rangle \rightarrow \langle n| \underbrace{aa^\dagger}_{N+1} |n\rangle = |c_2|^2 \text{ e } \therefore |c_2|^2 = n+1$$

$N+1$, pois $[a, a^\dagger] = 1 \rightarrow aa^\dagger = a^\dagger a + 1 = N+1$

O que nos leva a concluir

$$\begin{cases} a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \\ a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \end{cases}$$

Agora aplique o operador a diversas vezes e

obtenha

$$\begin{cases} a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \\ a|n-1\rangle = \sqrt{(n-1)}|n-2\rangle \\ a|n-2\rangle = \sqrt{(n-2)}|n-3\rangle, \text{ etc.} \end{cases}$$

Se n é real positivo, precisa ser inteiro, pois só assim a série é interrompida, ao passar pela situação $a|0\rangle = \sqrt{0}|-1\rangle = 0$, o que evita gerar um ket com autovalor negativo de N .

Operadores de criação e de aniquilação

Como a energia do oscilador harmônico é dada por $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$, e o menor valor de n é zero, concluímos que o estado fundamental do oscilador harmônico simples tem energia $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$.

Supondo conhecido o estado fundamental $|0\rangle$, uma boa forma de obter os outros estados é a partir da relação $a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$, que pode ser

invertida : $|n+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}}a^\dagger|n\rangle$

e usada para obter

$$\begin{cases} |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{1}}a^\dagger|0\rangle \\ |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}a^\dagger|1\rangle = \frac{(a^\dagger)^2}{\sqrt{2}}|0\rangle \\ |3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}a^\dagger|2\rangle = \frac{(a^\dagger)^3}{\sqrt{3!}}|0\rangle, \\ \vdots \\ |n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle, \text{ etc.} \end{cases}$$

onde $|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$ é autoestado de H e N , com autovalores $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ e n , respectivamente.

Operadores de criação e de aniquilação

$$\text{das definições } \begin{cases} a \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{ip}{m\omega} \right) \\ a^\dagger \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{ip}{m\omega} \right) \end{cases} \quad \text{obtemos } \begin{cases} x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger) \\ p = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (-a + a^\dagger) \end{cases}$$

$$\text{como } \begin{cases} \langle n' | a | n \rangle = \langle n' | \sqrt{n} | n - 1 \rangle = \sqrt{n} \delta_{n', n-1} \\ \langle n' | a^\dagger | n \rangle = \langle n' | \sqrt{n+1} | n + 1 \rangle = \sqrt{n+1} \delta_{n', n+1} \end{cases}$$

$$\text{temos } \begin{cases} \langle n' | x | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n} \delta_{n', n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{n', n+1}) \\ \langle n' | p | n \rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (-\sqrt{n} \delta_{n', n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{n', n+1}) \end{cases}$$

Ou seja, nem x , nem p , nem a , e nem a^\dagger são diagonais na representação N .

Nenhum deles comuta com N ou H .

Autokets na representação das coordenadas

Considere a equação $a|0\rangle = 0$ na representação das coordenadas $\langle x'|a|0\rangle = 0$, e reescrita por $\langle x'|\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(x + \frac{ip}{m\omega})|0\rangle = 0 \rightarrow \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\langle x'|(x + \frac{ip}{m\omega})|0\rangle = 0$, ou ainda

$$(x' + \frac{i}{m\omega} \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx'})\langle x'|0\rangle = 0 \rightarrow (x' + x_0^2 \frac{d}{dx'})\langle x'|0\rangle = 0, \text{ com } x_0 \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

Reorganizando, temos:

$$\frac{d}{dx'}\langle x'|0\rangle = -\frac{x'}{x_0^2}\langle x'|0\rangle, \text{ com solução } \langle x'|0\rangle = A \exp\left(-\frac{x'^2}{2x_0^2}\right)$$

O estado fundamental do oscilador harmônico simples, na representação das coordenadas, é uma gaussiana. A densidade de probabilidade, dada por:

$|\langle x'|0\rangle|^2 = |A|^2 \exp\left(-\frac{x'^2}{x_0^2}\right)$ tem largura x_0 e pode ser usada para calcular A ,

pois $\int dx' |\langle x'|0\rangle|^2 = \int dx' |A|^2 \exp\left(-\frac{x'^2}{x_0^2}\right) = 1 \rightarrow A = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{x_0}}$

$$\langle x'|0\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{x_0}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x'^2}{x_0^2}\right)\right]$$

Autokets na representação das coordenadas

$$\text{A partir de } \begin{cases} (1) \langle x'|0\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x'^2}{x_0^2}\right)\right] \\ (2) |n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle \\ (3) a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x - \frac{ip}{m\omega}\right) \end{cases}$$

obtemos o restante dos estados. Por exemplo:

$$\begin{aligned} \langle x'|1\rangle &= \langle x'|a^\dagger|0\rangle = \langle x'|\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x - \frac{ip}{m\omega}\right)|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}x_0}\left(x' - \frac{i\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx'}\right)\langle x'|0\rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}x_0}\left(x' - x_0^2\frac{d}{dx'}\right)\langle x'|0\rangle = \sqrt{\frac{2}{x_0}}x'\langle x'|0\rangle = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{1/4}x_0^{3/2}}x'\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x'^2}{x_0^2}\right)\right] \end{aligned}$$

De forma geral, é possível obter para o n-ésimo estado

$$\langle x'|n\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{1}{x_0^{n+\frac{1}{2}}}\right)\left(x' - x_0^2\frac{d}{dx'}\right)^n \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x'^2}{x_0^2}\right)\right]$$

Relação de incerteza para o estado fundamental

Para avaliar a relação de incerteza para o estado fundamental, precisamos calcular $\langle x \rangle$, $\langle p \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, e $\langle p^2 \rangle$ para o estado $|0\rangle$. Para isso, usamos as seguintes

relações:
$$\left\{ \begin{array}{l} x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger) \rightarrow x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}(a^2 + a^{\dagger 2} + aa^\dagger + a^\dagger a) \\ p = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(-a + a^\dagger) \rightarrow p^2 = -\frac{m\hbar\omega}{2}(a^2 + a^{\dagger 2} - aa^\dagger - a^\dagger a) \\ a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \text{ e } a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \\ \langle n'|n\rangle = \delta_{n',n} \end{array} \right.$$

que fornecem
$$\left\{ \begin{array}{l} \langle 0|x|0\rangle = 0 \text{ e } \langle 0|x^2|0\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle 0|(a^2 + a^{\dagger 2} + aa^\dagger + a^\dagger a)|0\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \\ \langle 0|p|0\rangle = 0 \text{ e } \langle 0|p^2|0\rangle = -\frac{m\hbar\omega}{2} \langle 0|(a^2 + a^{\dagger 2} - aa^\dagger - a^\dagger a)|0\rangle = \frac{m\hbar\omega}{2} \end{array} \right.$$

Assim, calculamos $\langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}$ e $\langle (\Delta p)^2 \rangle = \langle p^2 \rangle = \frac{\hbar m\omega}{2}$ e, finalmente,

temos $\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4}$. Para $n \neq 0$ ela ficaria $\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \hbar^2$

mostre 

Oscilador Harmônico Simples: T e V

Valores esperados de T (energia cinética) e V (energia potencial) para o estado $|0\rangle$

$$\langle 0 | (T = \frac{p^2}{2m}) | 0 \rangle = \frac{1}{2m} \langle 0 | p^2 | 0 \rangle = \frac{1}{2m} \frac{\hbar m \omega}{2} = \frac{\hbar \omega}{4} = \frac{\langle H \rangle}{2}$$

Teorema do virial

$$\langle 0 | (V = \frac{m\omega^2 x^2}{2}) | 0 \rangle = \frac{m\omega^2}{2} \langle 0 | x^2 | 0 \rangle = \frac{m\omega^2}{2} \frac{\hbar}{2m\omega} = \frac{\hbar \omega}{4} = \frac{\langle H \rangle}{2}$$

Evolução temporal do oscilador

Das equações de Heisenberg para x_i e p_i ,

tínhamos

$$\begin{cases} \frac{dp_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [p_i, V(\mathbf{x})] = -\frac{\partial}{\partial x_i} V(\mathbf{x}) \\ \frac{dx_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [x_i, \frac{p^2}{2m}] = \frac{p_i}{m} \end{cases}$$

que para o oscilador $V = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$,

ficam:

$$\begin{cases} \frac{dp}{dt} = -m\omega^2 x \\ \frac{dx}{dt} = \frac{p}{m} \end{cases} \quad \text{com auxílio de} \quad \begin{cases} x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger) \\ p = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (-a + a^\dagger) \end{cases}$$

Evolução temporal do oscilador

temos

$$\left\{ \begin{array}{l} 1) \underbrace{\frac{d}{dt} \left(i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (-a + a^\dagger) \right)}_p = -m\omega^2 \underbrace{\left(\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger) \right)}_x \\ 2) \underbrace{\frac{d}{dt} \left(\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger) \right)}_x = \frac{1}{m} \underbrace{\left(i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (-a + a^\dagger) \right)}_p \end{array} \right.$$

Uma combinação destas equações fornece equações desacopladas. Combine:

$$\frac{1}{2} [Eq.1 \times (-i\sqrt{\frac{2}{m\hbar\omega}}) + Eq.2 \times \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}] \rightarrow \frac{da^\dagger}{dt} = \frac{1}{2} [i\omega(a + a^\dagger) + i\omega(-a + a^\dagger)]$$

$$\frac{1}{2} [Eq.1 \times (+i\sqrt{\frac{2}{m\hbar\omega}}) + Eq.2 \times \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}] \rightarrow \frac{da}{dt} = \frac{1}{2} [-i\omega(a + a^\dagger) + i\omega(-a + a^\dagger)]$$

De forma equivalente às equações 1 e 2, temos agora

$$\frac{da^\dagger}{dt} = i\omega a^\dagger \quad \text{e} \quad \frac{da}{dt} = -i\omega a$$

Evolução temporal do oscilador

Transformamos as duas equações acopladas (em x e p), em equações desacopladas (em a e a^\dagger). As novas equações,

$$\frac{da^\dagger}{dt} = i\omega a^\dagger \quad \text{e} \quad \frac{da}{dt} = -i\omega a$$

têm soluções relativamente simples:

$$a^\dagger(t) = a^\dagger(0) \exp(i\omega t) \quad \text{e} \quad a(t) = a(0) \exp(-i\omega t)$$

Note que $\begin{cases} N = a^\dagger(t)a(t) = a^\dagger(0)a(0) \\ H = \hbar\omega(N + \frac{1}{2}) \end{cases} \rightarrow$ são independentes do tempo

$$\text{De } \begin{cases} a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{ip}{m\omega}\right) \\ a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{ip}{m\omega}\right) \end{cases} \quad \text{e} \quad \begin{cases} a(t) = a(0) \exp(-i\omega t) \\ a^\dagger(t) = a^\dagger(0) \exp(i\omega t) \end{cases}$$

$$\text{temos: } \begin{cases} \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} [x(t) + \frac{i}{m\omega} p(t)] = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} [x(0) + \frac{i}{m\omega} p(0)] \exp(-i\omega t) \\ \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} [x(t) - \frac{i}{m\omega} p(t)] = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} [x(0) - \frac{i}{m\omega} p(0)] \exp(+i\omega t) \end{cases}$$

Evolução temporal do oscilador

dividindo pelas constantes multiplicativas,

$$\text{temos: } \begin{cases} [x(t) + \frac{i}{m\omega}p(t)] = [x(0) + \frac{i}{m\omega}p(0)] \exp(-i\omega t) \\ [x(t) - \frac{i}{m\omega}p(t)] = [x(0) - \frac{i}{m\omega}p(0)] \exp(+i\omega t) \end{cases}$$

e recombinando as equações,

$$\text{temos: } \begin{cases} x(t) = x(0) \cos \omega t + \frac{p(0)}{m\omega} \sin \omega t \\ p(t) = -m\omega x(0) \sin \omega t + p(0) \cos \omega t \end{cases}$$

A evolução temporal dos operadores de Heisenberg é exatamente igual a das coordenadas canônicas da mecânica clássica

Evolução temporal do oscilador

Forma alternativa de obter $x(t)$. Use: $x(t) = \exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right)x(0)\exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right)$, com auxílio de: $\exp(iG\lambda)A\exp(-iG\lambda)$, que pode ser escrito na forma:

$$A + i\lambda[G, A] + \frac{i^2\lambda^2}{2!}[G, [G, A]] + \dots + \frac{i^n\lambda^n}{n!}[G, [G, [G\dots[G, A]\dots]]]$$
 e utilizado

repetidas vezes com

$$\begin{cases} [H, x(0)] = -i\hbar\frac{p(0)}{m} \\ [H, p(0)] = i\hbar m\omega^2 x(0) \end{cases}$$

Cuidados especiais com nossas interpretações

Olhando :

$$\begin{cases} x(t) = x(0)\cos\omega t + \frac{p(0)}{m\omega}\sin\omega t \\ p(t) = -m\omega x(0)\sin\omega t + p(0)\cos\omega t \end{cases}$$

ficamos tentados a acreditar que $\langle x \rangle$ e $\langle p \rangle$ oscilam no tempo com frequência ω . Errado!, pois $\langle n|x|n \rangle = 0$ e $\langle n|p|n \rangle = 0 \forall n$. Esperado? sim. O valor médio de uma observável com respeito a estados estacionários não muda com o tempo:

$$\langle B \rangle = \langle a' | \exp\left(+\frac{i}{\hbar}E_{a'}t\right)B \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_{a'}t\right) | a' \rangle = \langle B \rangle = \langle a' | B | a' \rangle$$

Cuidados especiais com nossas interpretações

Oscilações clássicas? Só quando misturamos estados estacionários

Exemplo: $|\alpha\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$

$$\langle\alpha|x(t)|\alpha\rangle = \underbrace{\langle\alpha|x(0)|\alpha\rangle}_{\leftarrow} \cos \omega t + \frac{1}{m\omega} \underbrace{\langle\alpha|p(0)|\alpha\rangle}_{\rightarrow} \sin \omega t$$

Se um deles for diferente de zero, oscila

Como construir um pacote que oscila como o clássico e não espalha (muito*) com o tempo? É um exercício da lista (problema 2.19) mostrar que: $a|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$ resolve o problema, onde

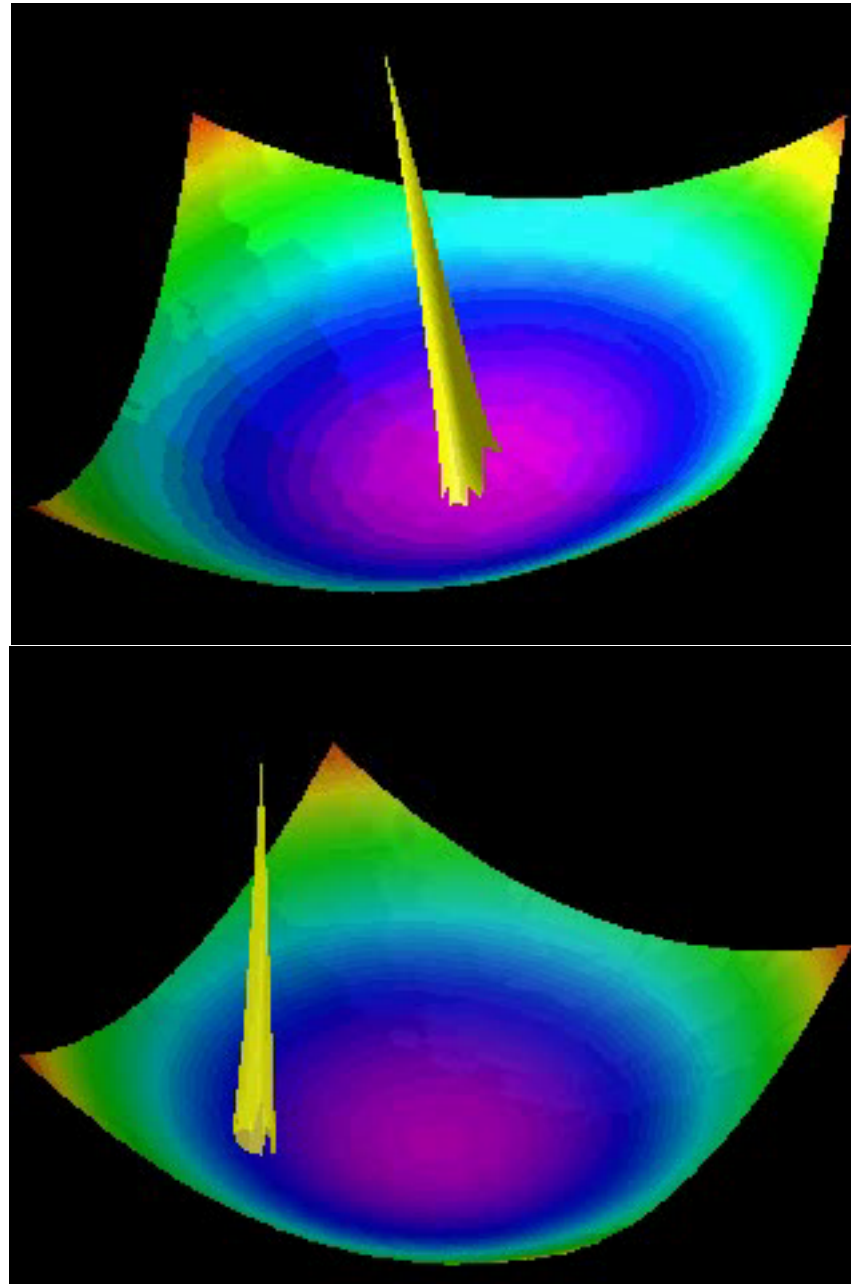
$|\lambda\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} f(n)|n\rangle$, com $|f(n)|^2 = \frac{\bar{n}^n}{n!} \exp(-\bar{n})$, e \bar{n} a parte inteira de um valor médio.

Para resolver o problema 2.19 da lista, veja:

“Quantum Mechanics”, Merzbacher, 3a. edição, página 220-31.

** Para dispersão, “Quantum Collision Theory”, Joachain, página 55.*

Cuidados especiais com nossas interpretações



Equação de onda dependente do tempo de Schrödinger

Queremos examinar o estado $|\alpha, t_0; t\rangle$ na representação das coordenadas.

Em outras palavras, analisar a função de onda: $\psi(\mathbf{x}', t) = \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle$, onde o $|\alpha, t_0; t\rangle$ é um ket estado, dentro do enfoque de Schrödinger, no instante t e $\langle \mathbf{x}' |$ é um autobra de \mathbf{x} com autovalor \mathbf{x}' .

A Hamiltoniana do problema será dada por: $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x})$ e para facilitar, trataremos potenciais locais, que tem a definição:

$$\langle \mathbf{x}'' | V(\mathbf{x}) | \mathbf{x}' \rangle = V(\mathbf{x}') \delta^3(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'')$$

Note que poderia ser mais complicado $\left\{ \begin{array}{l} \text{dependente do tempo} \\ \langle \mathbf{x}'' | V(\mathbf{x}) | \mathbf{x}' \rangle = v_1(\mathbf{x}'') v_2(\mathbf{x}') \text{ (não local, mas separável)} \\ \text{dependente do momento } \mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}, \text{ etc.} \end{array} \right.$

Nestas condições, a equação de Schrödinger: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0; t\rangle = H |\alpha, t_0; t\rangle$

$$\text{fica: } i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}', t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla'^2 \psi(\mathbf{x}', t) + V(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}', t)$$

Equação de onda dependente do tempo de Schrödinger

Uma das propriedades mais interessantes da equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0; t\rangle = H |\alpha, t_0; t\rangle$$

na sua forma geral acima ou na representação das coordenadas, abaixo:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}', t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla'^2 \psi(\mathbf{x}', t) + V(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}', t)$$

é que elas são lineares: uma combinação de soluções é uma solução.

Em outras palavras, se $|\alpha_1, t_0; t\rangle$ é solução, e $|\alpha_2, t_0; t\rangle$ é solução, a combinação $c_1 |\alpha_1, t_0; t\rangle + c_2 |\alpha_2, t_0; t\rangle$ também é, $\forall c_1$ e c_2 . O mesmo vale na representação das coordenadas. Se $\psi_1(\mathbf{x}', t)$ é solução, e $\psi_2(\mathbf{x}', t)$ é solução, a combinação $c_1 \psi_1(\mathbf{x}', t) + c_2 \psi_2(\mathbf{x}', t)$ também é, $\forall c_1$ e c_2 .

Isso vale para um contínuo de soluções:

$\Psi(\mathbf{x}', t) = \int dE' g(E') \psi_{E'}(\mathbf{x}', t)$, também é solução, desde que cada uma das $\psi_{E'}(\mathbf{x}', t)$ também seja uma solução. É isso que permite a construção dos pacotes que tenho apresentado nas animações.

<http://rugth30.phys.rug.nl/quantummechanics/>