PORQUE É O OPERADOR MOMENTUM DADO POR $-i\hbar\partial/\partial x$?

Fernando R. Ornellas
Instituto de Química, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 20780, São Paulo, 01498, SP, Brazil

Recebido em 13/10/89

Ensinar química quântica é sempre um grande desafio. Por sua própria natureza, os conceitos não podem ser facilmente visualizados em termos de imagens macroscópicas e a linguagem escrita exige um mínimo de habilidade matemática. Em suas diferentes apresentações enfatiza-se, certamente, que as quantidades que podem ser medidas, *as observáveis,* serão representadas por entidades matemáticas chamadas *operadores hermitianos,* e que a solução da equação de Schrödinger, *a função de onda* Ψ, é tal que $\Psi * \Psi$ representa uma *distribuição de probabilidade*.

O determinismo típico da física clássica é então substituído por uma descrição estatística do sistema, e o valor médio de uma observável passa a ser agora a quantidade de interesse. Uma partícula numa caixa unidimensional é o primeiro modelo estudado e valores médios da posição e do momentum são então calculados usando-se as relações

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x)\hat{x}\Psi(x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x)x\Psi(x)dx \tag{1}$$

$$\bar{p}_x = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x)\hat{p}_x\Psi(x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x)(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\Psi(x)dx \tag{2}$$

A esta altura, compreendendo ou não a lógica da mecânica quântica, o estudante certamente formula a questão: *Porque é o operador do momentum dado por* $-i\hbar\partial/\partial x$ *? Como foi ele "inventado"?*

O objetivo deste artigo é apresentar o que julgamos ser uma bonita resposta para as perguntas acima. Mostraremos que a forma do operador dado pela equação (2) surge naturalmente se se percebe que, de forma semelhante à equação (1), o valor médio do operador do momentum pode ser também calculado pela expressão

$$\bar{p}_x = \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^*(p_x)\ \hat{p}_x\Phi(p_x)dp_x = \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^*(p_x)p_x\Phi(p_x)dp_x \tag{3}$$

onde $\Phi\ (p_x)$ é a função de onda expressa em termos do momentum da partícula e $\hat{p}_x$ é simplesmente um operador multiplicativo, o número p_x. Por simplicidade omitiremos o subscrito x no que segue.

Visto que o momentum está relacionado ao vetor onda k pela relação $p = k\hbar$, a condição de normalização

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^*(p)\Phi(p)dp = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(k)\phi(k)dk = 1 \tag{4}$$

implica que

$$\phi(k) = \hbar^{1/2}\Phi(p) \tag{5}$$

Um ponto chave para se responder à questão acima é perceber que a função de onda pode ser expandida na forma de uma integral de Fourier

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx}\phi(k)dk \tag{6}$$

onde os coeficientes $\phi(k)$ podem ser também obtidos através de uma integral de Fourier inversa

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx}\Psi(x)dx \tag{7}$$

Substituindo-se as equações (5) e (7) em (3) e rearranjando-se, obtém-se

$$\bar{p} = \frac{\hbar}{2\pi}\int\int_{-\infty}^{+\infty}\int e^{ikx'}\Psi^*(x')ke^{-ikx}\Psi(x)dxdx'dk \tag{8}$$

Notando que

$$ke^{-ikx} = i\frac{\partial}{\partial x}e^{-ikx}, \tag{9}$$

uma integração por partes na variável x pode ser feita na equação (8) após substituição de (9) em (8). Usando-se também o fato que $\Psi(\pm\infty) = O$, a equação (8) pode ser reescrita como

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx(-\imath\hbar)\frac{\partial\Psi(x)}{\partial x}\int_{-\infty}^{+\infty} dx'\Psi^*(x')\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dk}{2\pi}e^{\imath k(x'-x)} \tag{10}$$

A equação (10) agora se reduz a

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x)(-\imath\hbar\frac{\partial}{\partial x})\Psi(x)dx \tag{11}$$

se uma recorrência é feita ao teorema integral de Fourier

$$\Psi(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{\imath k(x-x')}\Psi(x')dx'dk \tag{12}$$

Note que a integral sobre k na expressão (12) é a representação integral da função delta de Dirac

$$\delta(x-x') = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{\imath k(x-x')}dk \tag{13}$$

e

$$\Psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x')\delta(x-x')dx' \tag{14}$$

A expressão (11) claramente nos mostra que o operador $\hat{p}$ deve ser representado por $-\imath\hbar\partial/\partial x$. Esta última afirmação para ser inteiramente correta deveria especificar que se está trabalhando na *representação de coordenada ou de posição,* isto é, que a função de onda é expressa como uma função da posição da partícula. Por outro lado, se a função de onda é escrita como uma função do momentum da partícula, a chamada *representação de momentum,* o operador momentum fica simplesmente dado pelo número p, e o operador posição se torna agora o operador diferencial $\imath\hbar\partial/\partial p$, como se pode provar por um procedimento similar ao mostrado acima.

Dependendo do nível do curso a ser ministrado, pode-se passar por todos os detalhes matemáticos desse tratamento ou ainda limitar a apresentação à conexão lógica entre esses passos. Esta abordagem claramente mostra que $-\imath\hbar\partial/\partial x$ não é uma entidade misteriosa. Sua origem está firmemente enraizada na base da mecânica quântica.

Esta apresentação está essencialmente baseada na abordagem dada por Bohm[1] em seu excelente livro, e rico em conceitos, *Quantum Theory,* o qual altamente recomendamos para aqueles envolvidos com o ensino da química quântica.

REFERÊNCIA

1. Bohm, D.; *Quantum Theory;* Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, (1951), p. 78; p. 173-182.