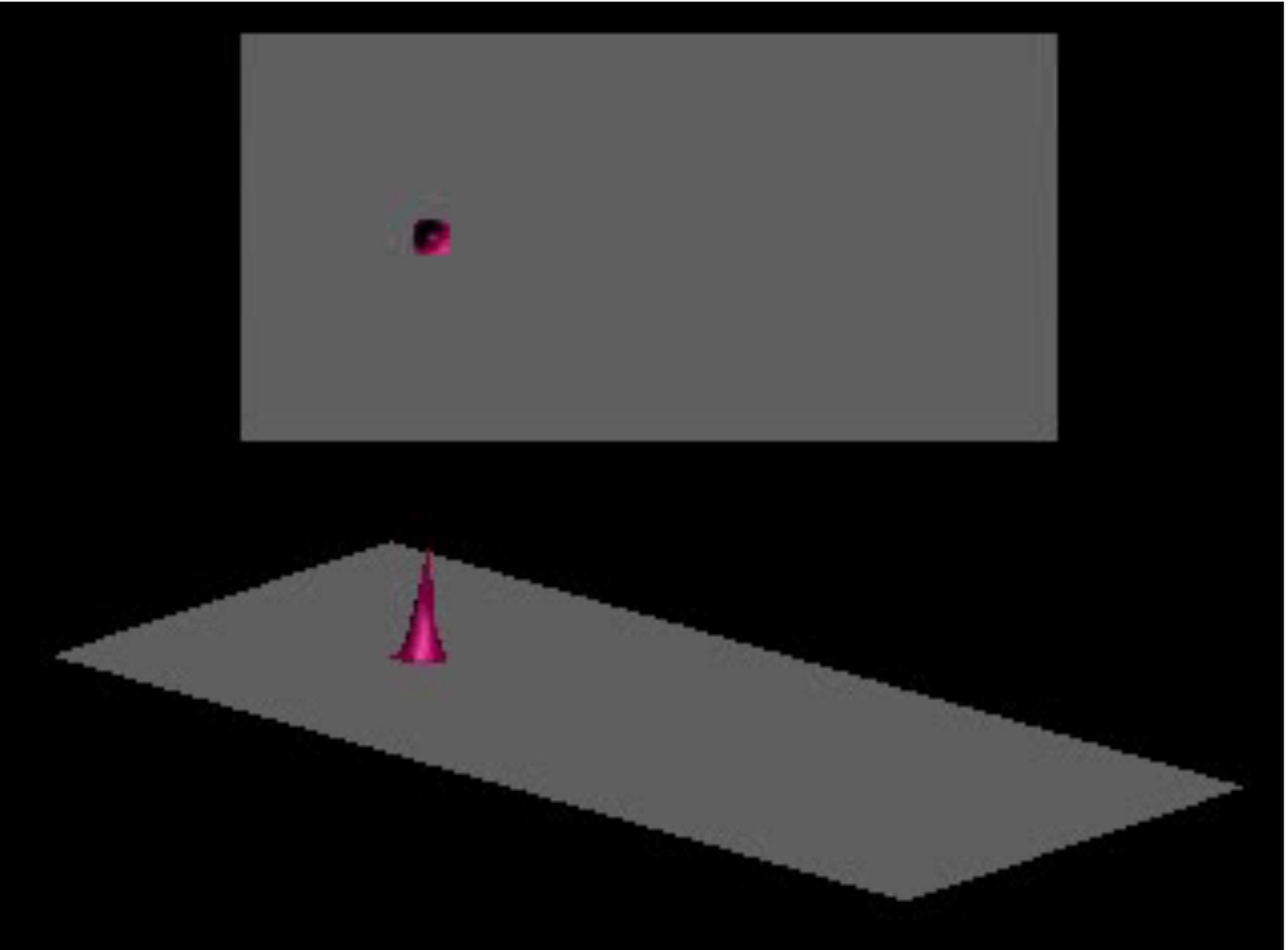


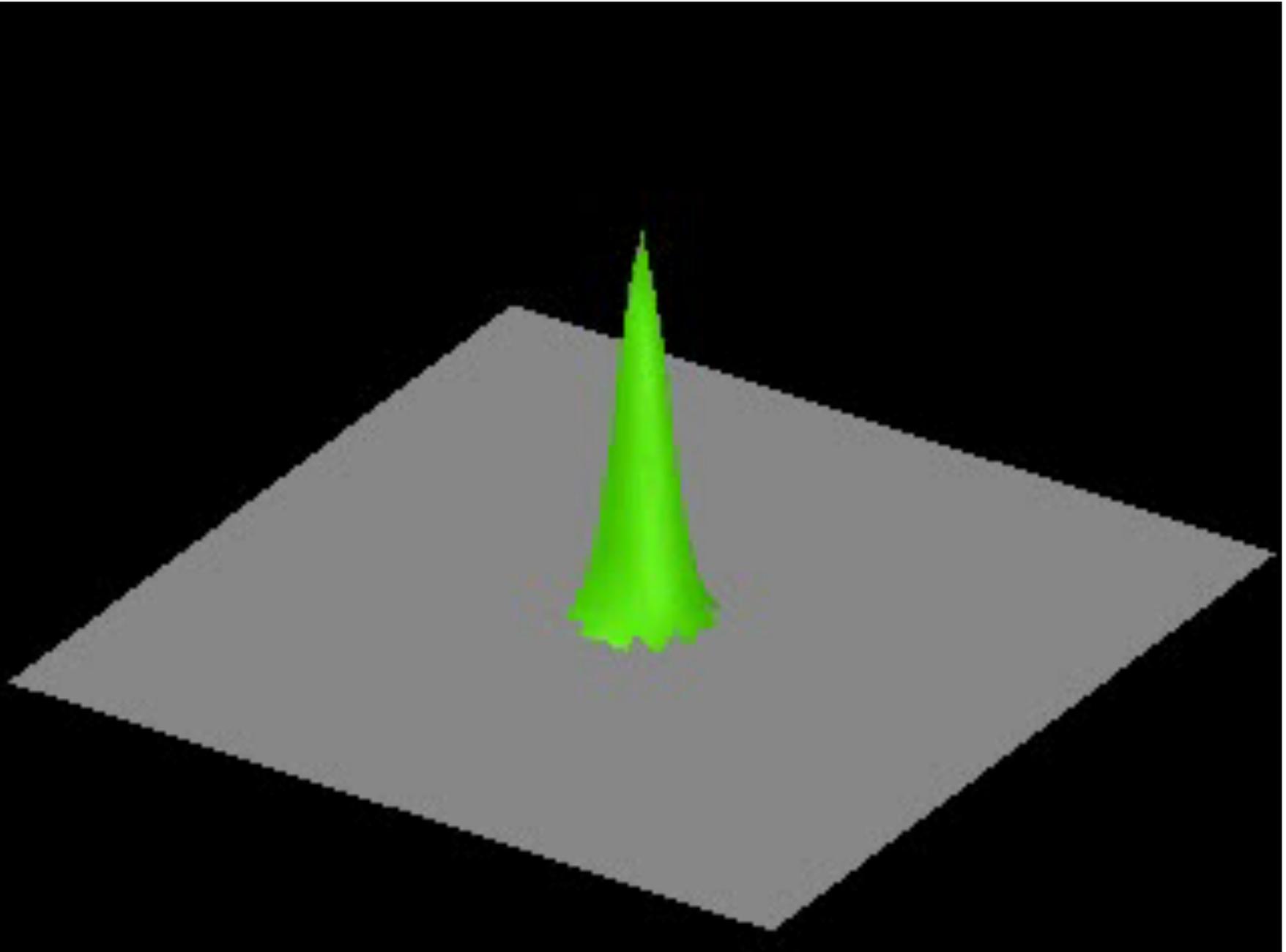
## Revisão e perspectivas para os próximos capítulos

- No início da aula de hoje faremos uma revisão dos conceitos básicos da mecânica quântica apresentada no capítulo 1 (coisas já vistas em F589), fazendo uso de aplicativos/animações encontradas na internet.
- Daremos atenção especial ao experimento de dupla fenda de difração e interferência obtido com um feixe de fótons e com um feixe de elétrons.
- Na segunda metade da aula iniciaremos o capítulo 2 que apresenta as:  
**Ferramentas Matemáticas da Mecânica Quântica.**
- Assim, começa hoje a apresentação de um formalismo bastante elegante, introduzido por Dirac no início do século passado, sobre uma das teorias científicas mais bem sucedidas da humanidade para descrever a natureza.
- Primeiro, na segunda metade desta aula e na aula seguinte, faremos uma revisão rápida sobre funções de onda, produtos escalares, bases de funções, operadores, etc. da Mecânica Quântica de Schrödinger.



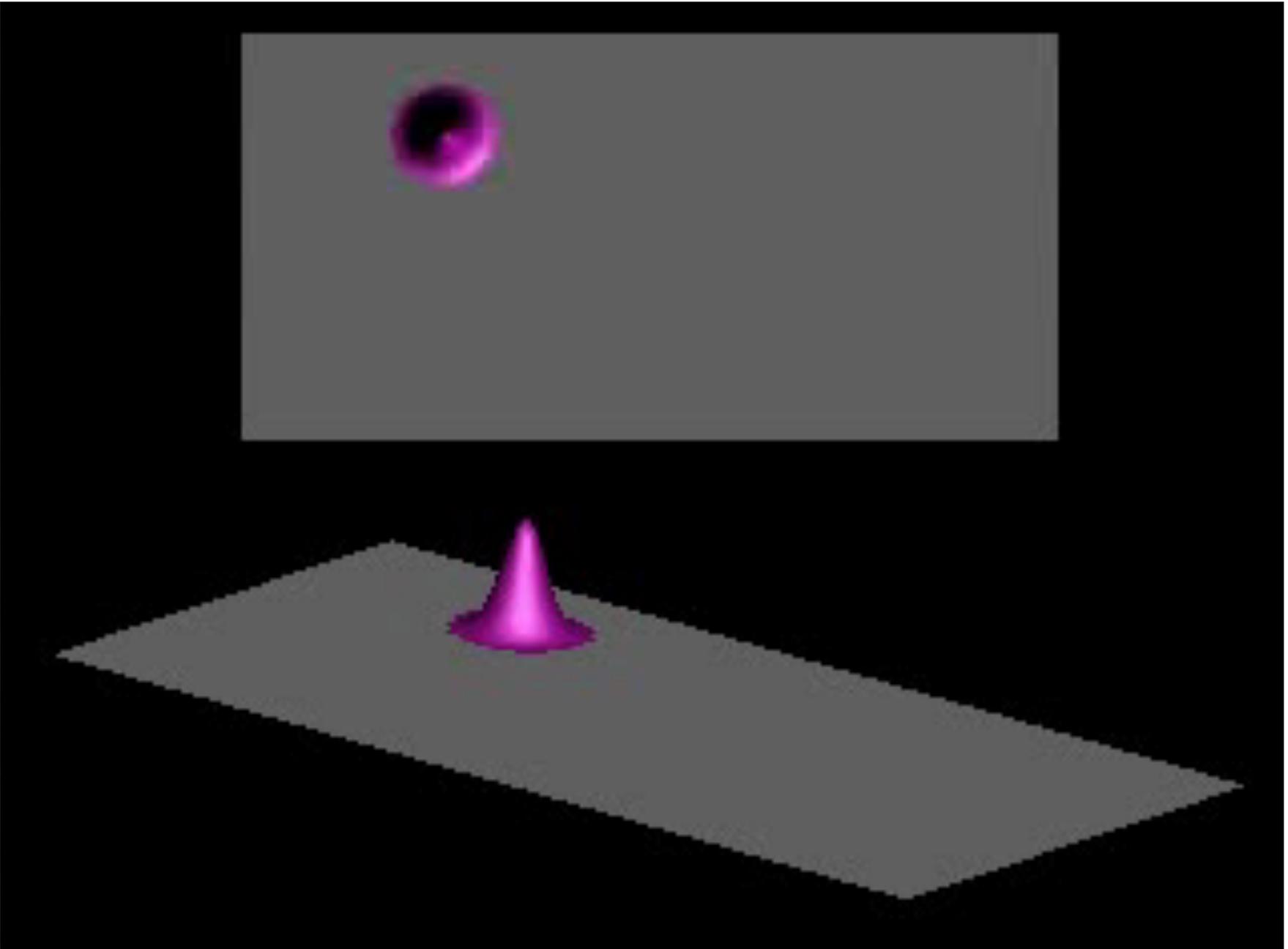
## Partícula livre

Para ver as animações, visite: <http://www.embd.be/quantummechanics/>



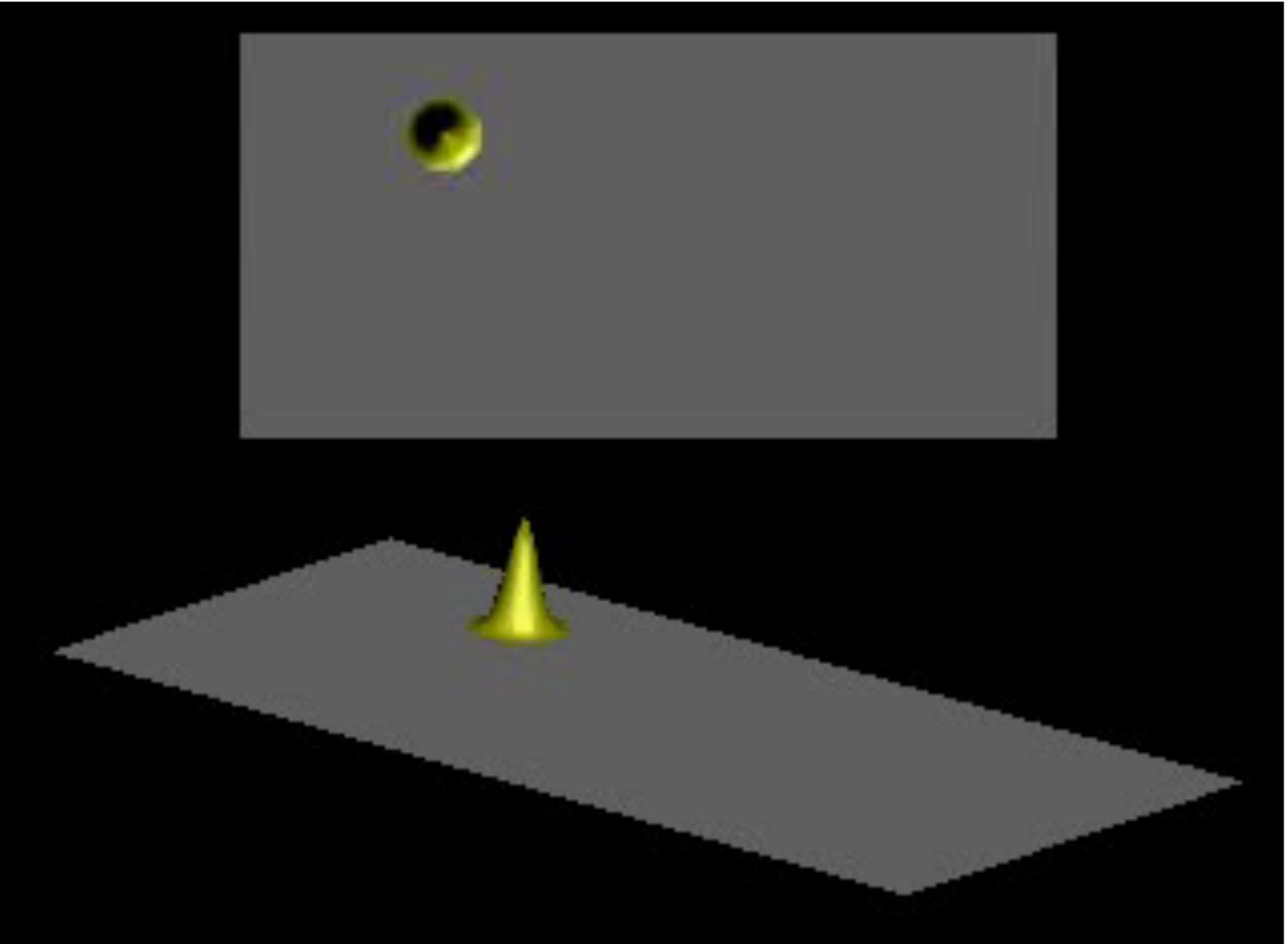
## Partícula prisioneira na caixa

Para ver as animações, visite: <http://www.embd.be/quantummechanics/>



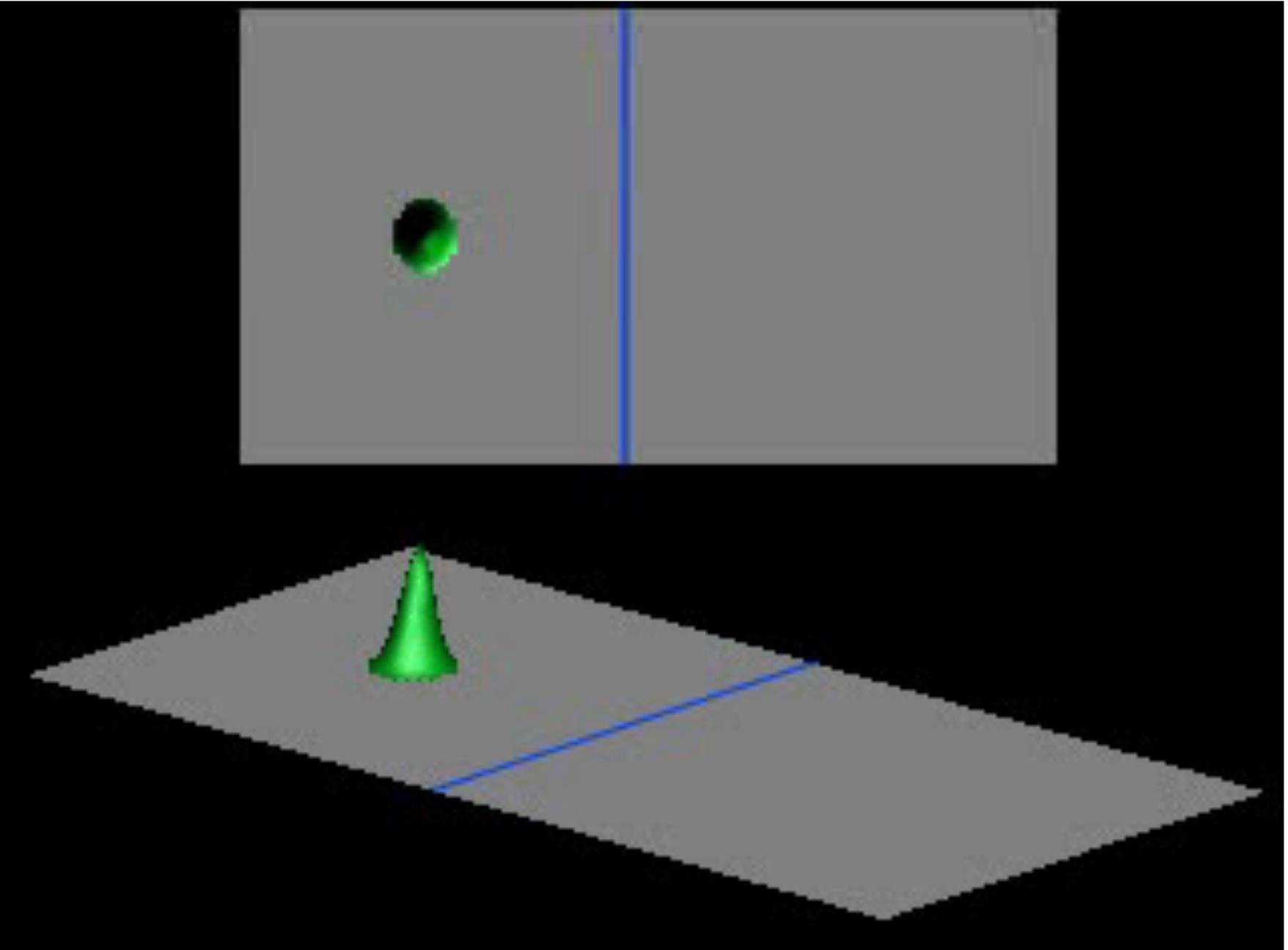
## Partícula carregada em um campo magnético constante

Para ver as animações, visite: <http://www.embd.be/quantummechanics/>



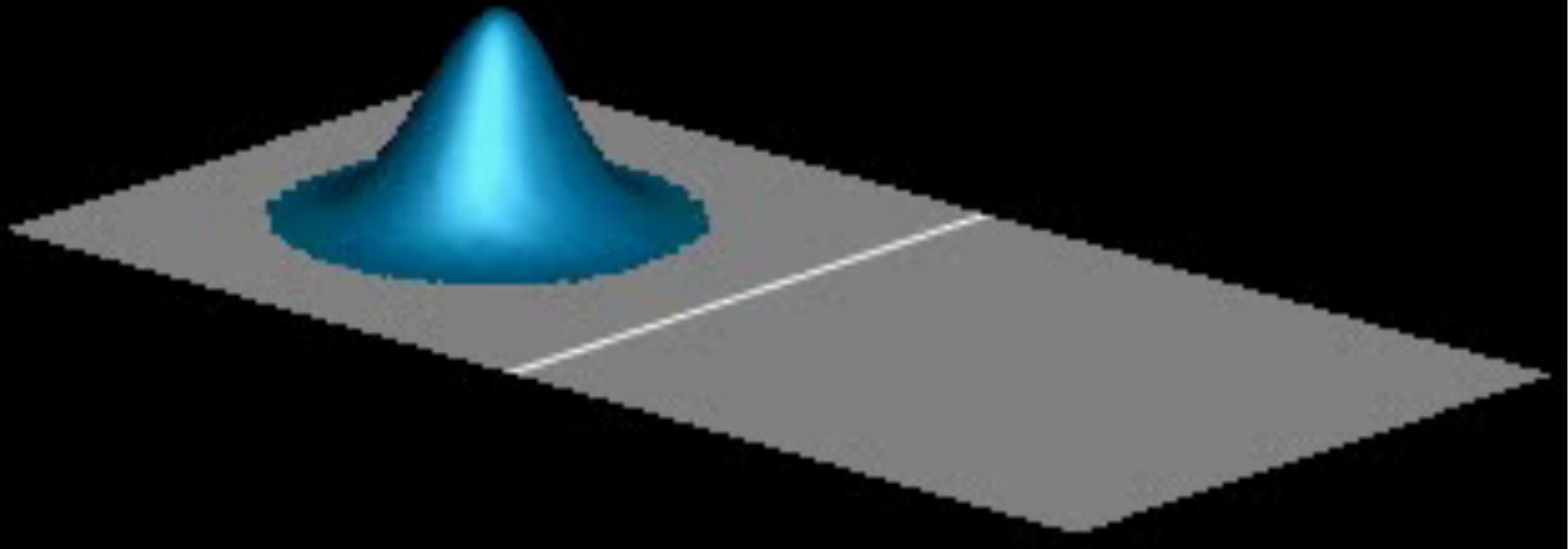
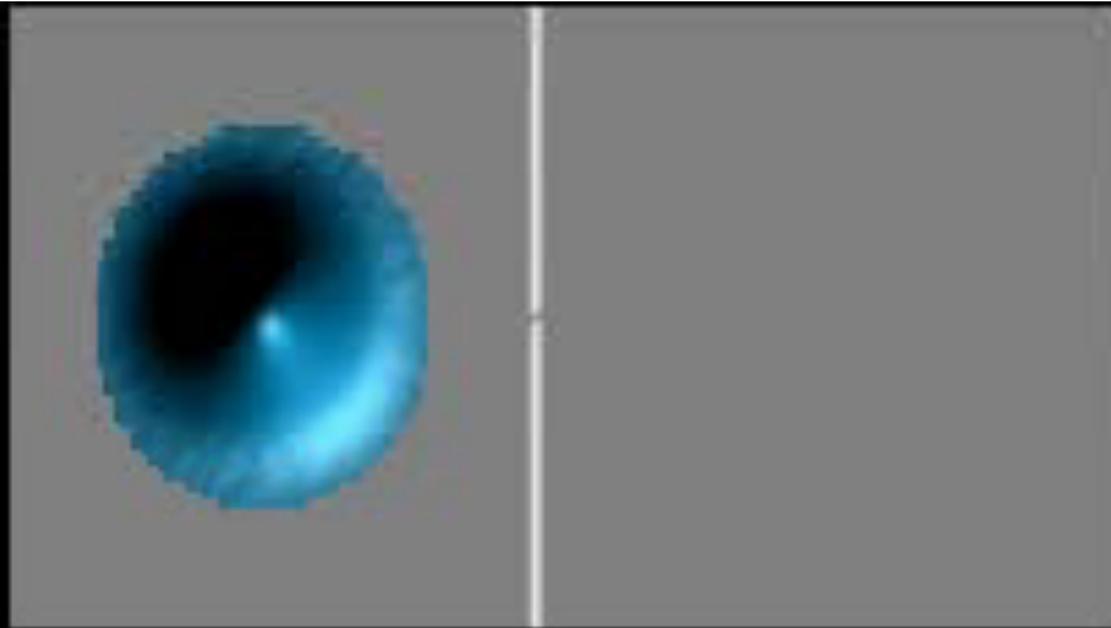
Partícula carregada na caixa em um campo magnético constante

Para ver as animações, visite: <http://www.embd.be/quantummechanics/>



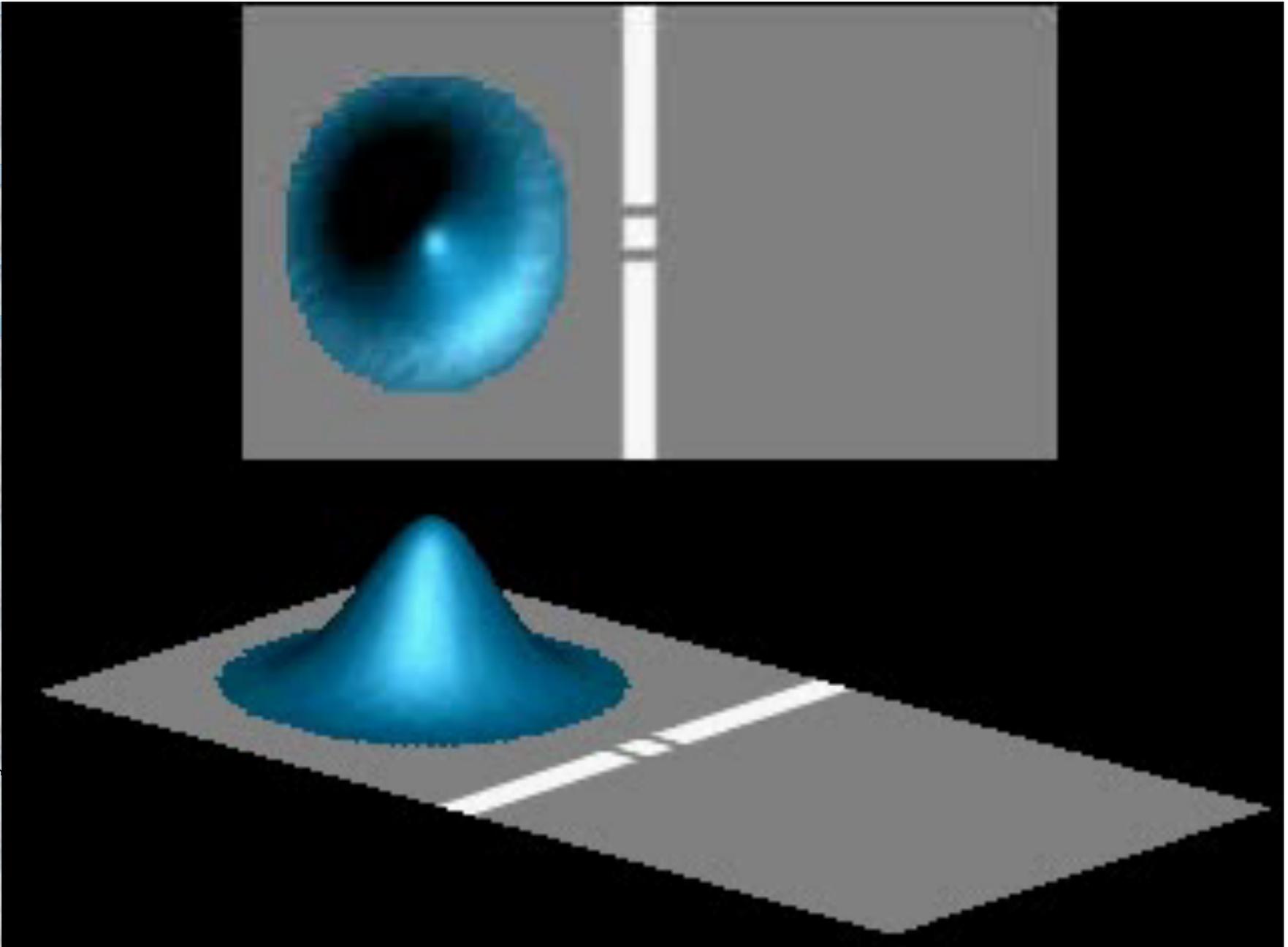
## Efeito Túnel

Para ver as animações, visite: <http://www.embd.be/quantummechanics/>



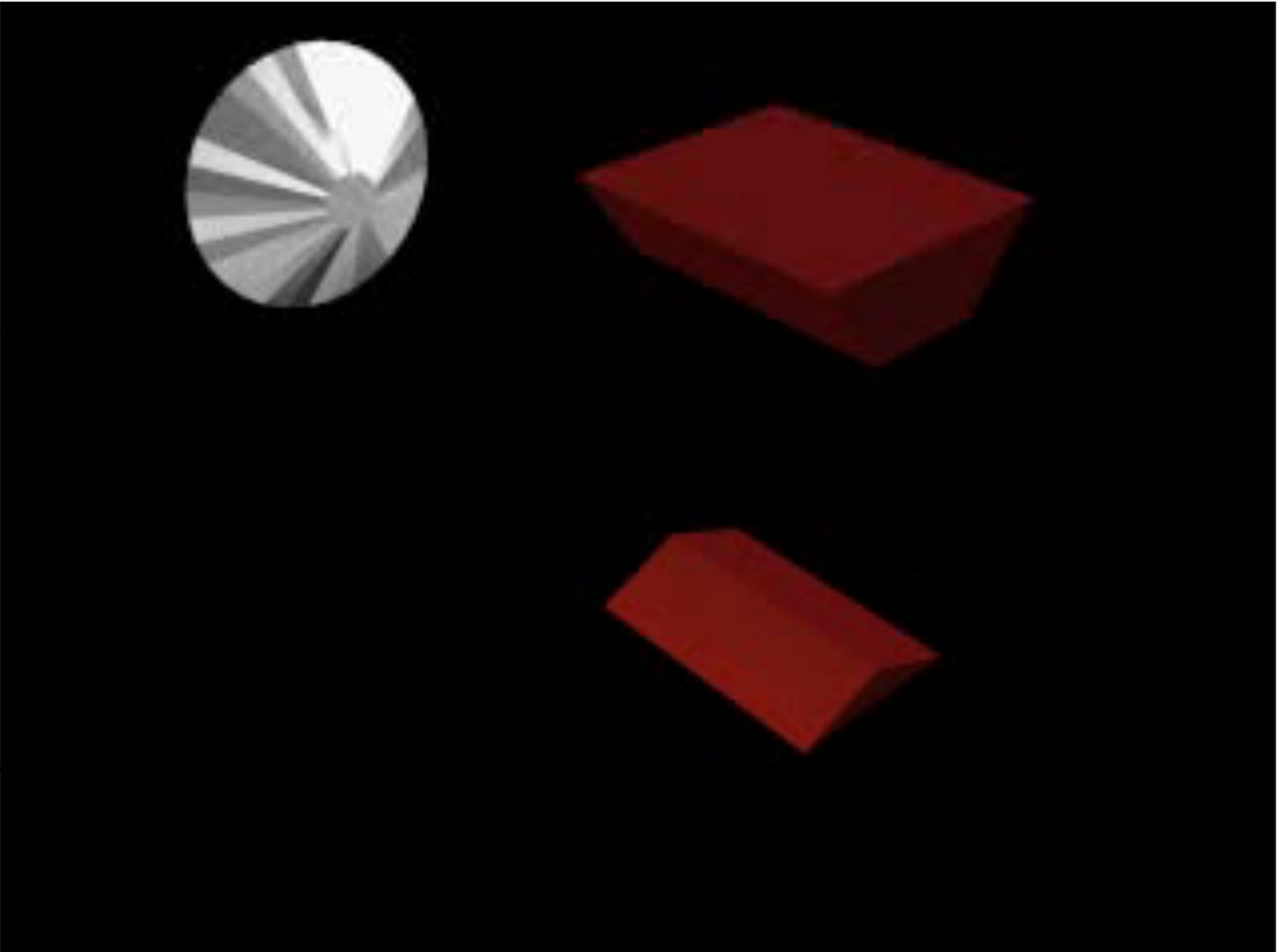
## Difração: uma fenda

Para ver as animações, visite: <http://www.embd.be/quantummechanics/>



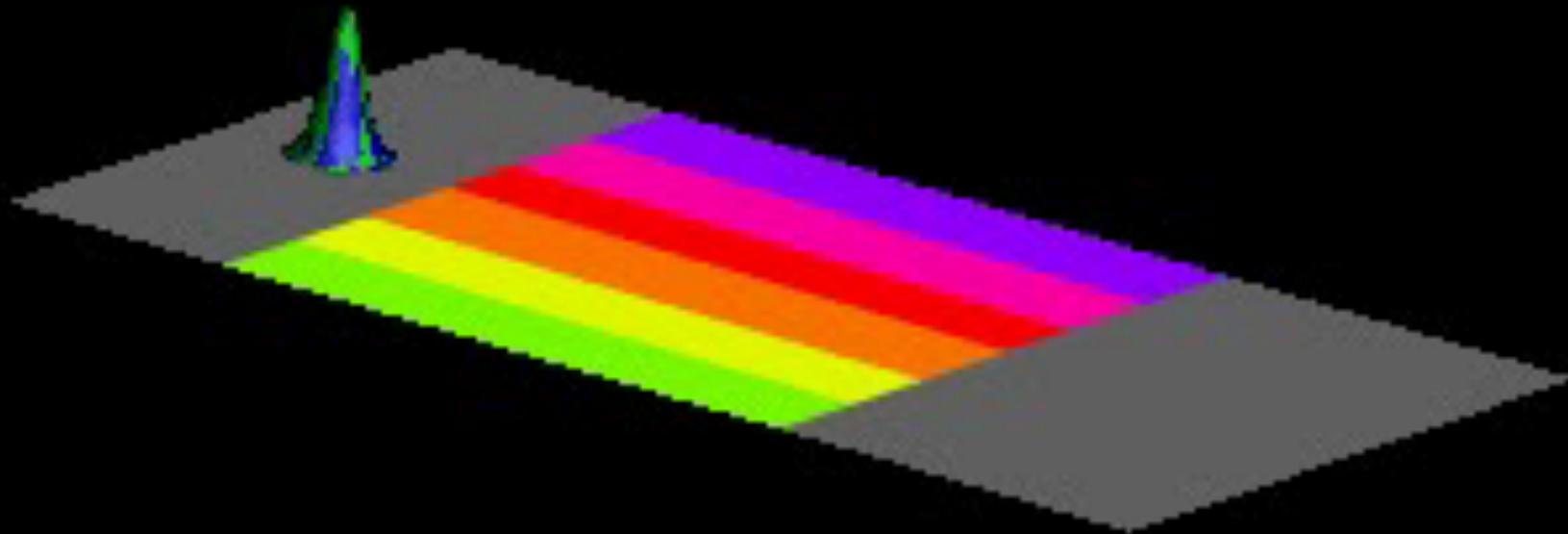
## Interferência – duas fendas

Para ver as animações, visite: <http://www.embd.be/quantummechanics/>



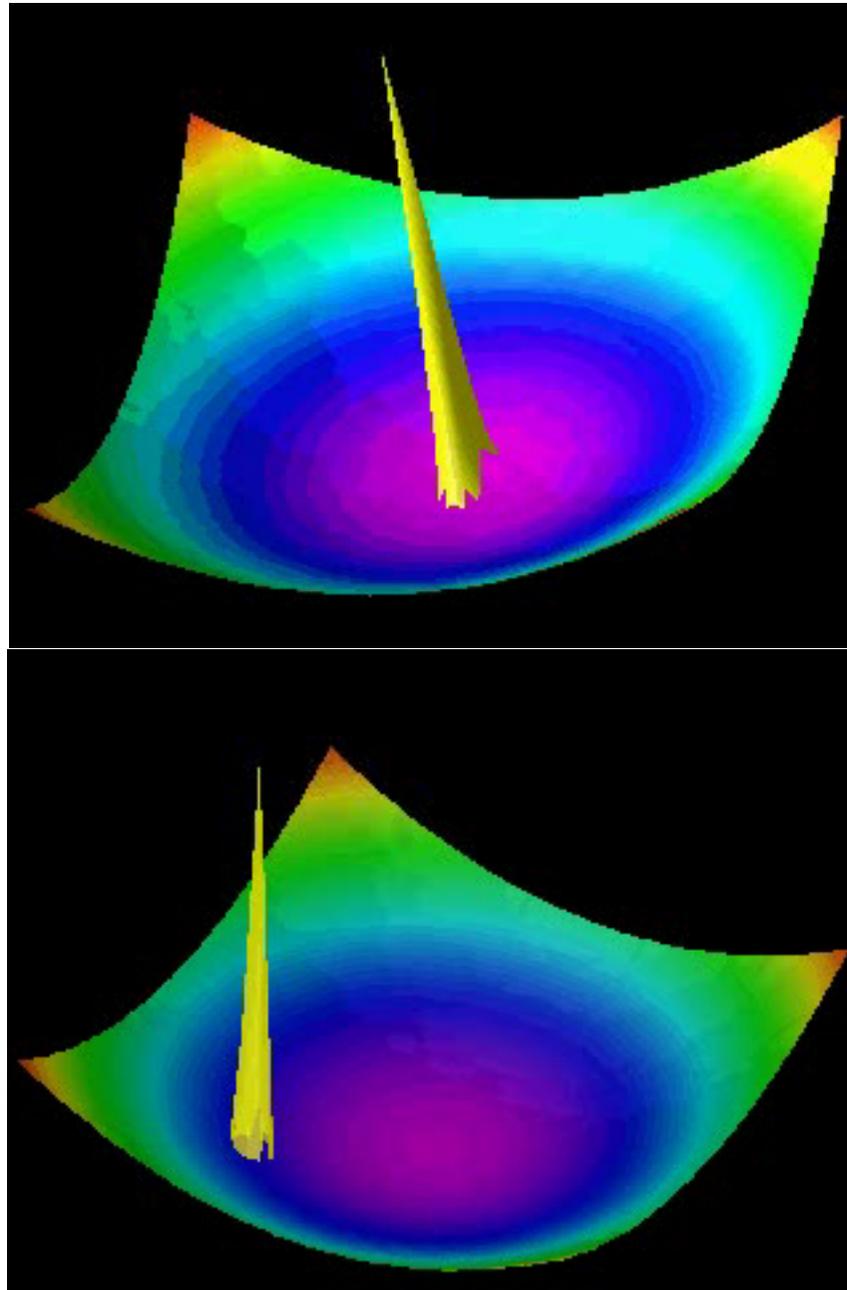
## Experimento de Stern-Gerlach: o spin do elétron

Visão Clássica



Experimento de Stern-Gerlach: o spin do elétron  
Visão Quântica

## Cuidados especiais com nossas interpretações



## Ferramentas Matemáticas da Mecânica Quântica

- Começamos por definir o espaço de funções de uma partícula:

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r \begin{cases} \text{a probabilidade de encontrar a partícula no} \\ \text{instante } t \text{ e no volume } d^3r = dx dy dz \text{ no ponto } \vec{r}. \end{cases}$$

- Por razões físicas (partícula precisa estar em algum lugar), queremos que esta probabilidade satisfaça  $\int |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1$ , ou seja as funções precisam ser quadraticamente integráveis.
- Isso define um conjunto de funções do tipo  $L^2$  que tem estrutura do espaço de Hilbert.
- *Funções contínuas e diferenciáveis são as fisicamente aceitáveis.* Chamaremos esse conjunto de  $\mathfrak{F} \Rightarrow$  um subespaço de  $L^2$ .

### A estrutura do espaço $\mathfrak{F}$

a)  $\mathfrak{F}$  como um espaço vetorial

Se  $\Psi_1(\vec{r})$  e  $\Psi_2(\vec{r})$  pertencem à  $\mathfrak{F} \Rightarrow \Psi(\vec{r}) = \lambda_1 \Psi_1(\vec{r}) + \lambda_2 \Psi_2(\vec{r}) \in \mathfrak{F}$ . Para  $\forall \lambda_1$  e  $\lambda_2$ , números complexos. Para ver isso considere

$$|\Psi(\vec{r})|^2 = |\lambda_1|^2 |\Psi_1(\vec{r})|^2 + |\lambda_2|^2 |\Psi_2(\vec{r})|^2 + \lambda_1^* \lambda_2 \Psi_1^*(\vec{r}) \Psi_2(\vec{r}) + \lambda_1 \lambda_2^* \Psi_1(\vec{r}) \Psi_2^*(\vec{r})$$

e note que os dois últimos termos têm o mesmo módulo, isto é:

$$|\lambda_1^* \lambda_2 \Psi_1^*(\vec{r}) \Psi_2(\vec{r})| = |\lambda_1 \lambda_2^* \Psi_1(\vec{r}) \Psi_2^*(\vec{r})| = |\lambda_1| |\lambda_2| |\Psi_1(\vec{r})| |\Psi_2(\vec{r})|$$

## Ferramentas Matemáticas da Mecânica Quântica

e assim escrever

$$|\Psi(\vec{r})|^2 \leq |\lambda_1|^2 |\Psi_1(\vec{r})|^2 + |\lambda_2|^2 |\Psi_2(\vec{r})|^2 + |\lambda_1^* \lambda_2 \Psi_1^*(\vec{r}) \Psi_2(\vec{r})| + |\lambda_1 \lambda_2^* \Psi_1(\vec{r}) \Psi_2^*(\vec{r})|$$

$$\text{e } \therefore |\Psi(\vec{r})|^2 \leq |\lambda_1|^2 |\Psi_1(\vec{r})|^2 + |\lambda_2|^2 |\Psi_2(\vec{r})|^2 + \underbrace{2|\lambda_1||\lambda_2||\Psi_1(\vec{r})||\Psi_2(\vec{r})|}_{< |\Psi_1(\vec{r})|^2 + |\Psi_2(\vec{r})|^2}$$

Se for menor mesmo, é possível escrever

$$|\Psi(\vec{r})|^2 \leq |\lambda_1|^2 |\Psi_1(\vec{r})|^2 + |\lambda_2|^2 |\Psi_2(\vec{r})|^2 + |\Psi_1(\vec{r})|^2 + |\Psi_2(\vec{r})|^2$$

Como todas as funções do lado direito da desigualdade são quadraticamente integráveis, concluímos que o lado esquerdo também é.

Para perceber que  $2|\lambda_1||\lambda_2||\Psi_1(\vec{r})||\Psi_2(\vec{r})| \leq |\Psi_1(\vec{r})|^2 + |\Psi_2(\vec{r})|^2$ , use que

$$(|\Psi_1(\vec{r})| - |\Psi_2(\vec{r})|)^2 \geq 0 \Rightarrow |\Psi_1(\vec{r})|^2 + |\Psi_2(\vec{r})|^2 - 2|\Psi_1(\vec{r})||\Psi_2(\vec{r})| \geq 0$$

$$\text{e } \therefore |\Psi_1(\vec{r})|^2 + |\Psi_2(\vec{r})|^2 \geq 2|\Psi_1(\vec{r})||\Psi_2(\vec{r})|$$

b) Produto escalar em  $\mathfrak{F}$

$$(\phi, \psi) = \int d^3r \phi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) \begin{cases} \text{se } \phi \in \mathfrak{F} \text{ e } \psi \in \mathfrak{F} \\ \text{então, a quantidade} \\ (\phi, \psi) \text{ converge} \end{cases}$$

## Ferramentas Matemáticas da Mecânica Quântica

### Propriedades do produto escalar

$$(i) (\phi, \psi) = \int d^3r \phi^*(\vec{r})\psi(\vec{r}) = \left[ \int d^3r \psi^*(\vec{r})\phi(\vec{r}) \right]^* = (\psi, \phi)^*$$

$$(ii) \text{ vale } \begin{cases} (\phi, \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1(\phi, \psi_1) + \lambda_2(\phi, \psi_2) \Rightarrow \text{linear} \\ (\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2, \phi) = \lambda_1^*(\psi_1, \phi) + \lambda_2^*(\psi_2, \phi) \Rightarrow \text{antilinear} \end{cases}$$

(iii) Se  $(\phi, \psi) = 0 \Rightarrow \phi$  e  $\psi$  são ortogonais.

$$(iv) (\psi, \psi) = \int d^3r \psi^*(\vec{r})\psi(\vec{r}) = \text{real, e é zero só se } \psi(\vec{r}) = 0, \forall \vec{r}.$$

(v)  $\sqrt{(\psi, \psi)} \equiv$  norma.

(vi) Desigualdade de Schwarz:  $|(\psi_1, \psi_2)| \leq \sqrt{(\psi_1, \psi_1)}\sqrt{(\psi_2, \psi_2)}$

*a demonstração desta desigualdade está no próximo slide*

## Ferramentas Matemáticas da Mecânica Quântica

Para demonstrar a desigualdade de Schwarz, considere  $\phi = \psi_1 + \lambda\psi_2$ , e escreva  $(\phi, \phi) = (\psi_1, \psi_1) + \lambda(\psi_1, \psi_2) + \lambda^*(\psi_2, \psi_1) + \lambda\lambda^*(\psi_2, \psi_2) \geq 0$  e escolha (vale)

$\lambda = -\frac{(\psi_2, \psi_1)}{(\psi_2, \psi_2)}$ . Note que o segundo e terceiro termos se cancelam, e obtenha:

$$(\psi_1, \psi_1) - \frac{(\psi_1, \psi_2)(\psi_2, \psi_1)}{(\psi_2, \psi_2)} \geq 0 \Rightarrow (\psi_1, \psi_1)(\psi_2, \psi_2) \geq (\psi_1, \psi_2)(\psi_2, \psi_1)$$

que pode ser invertida para  $(\psi_1, \psi_2)(\psi_2, \psi_1) \leq (\psi_1, \psi_1)(\psi_2, \psi_2)$ . Como os termos são reais positivos, podemos tirar a raiz e obter:

$$|(\psi_1, \psi_2)| \leq \sqrt{(\psi_1, \psi_1)}\sqrt{(\psi_2, \psi_2)} \quad \text{c.q.d.}$$

### c) Operadores Lineares

*Definição 1:*  $A$  é um operador se, dado  $\psi \in \mathfrak{F} \rightarrow A\psi(\vec{r}) = \psi'(\vec{r})$ , onde  $\psi'(\vec{r})$  é uma função que pode não ser  $L^2$ .

*Definição 2:*  $A$  é um operador linear se

$$A[\lambda_1\psi_1(\vec{r}) + \lambda_2\psi_2(\vec{r})] = \lambda_1A\psi_1(\vec{r}) + \lambda_2A\psi_2(\vec{r})$$

$$\text{Exemplos de operadores: } \begin{cases} \Pi\psi(x, y, z) = \psi(-x, -y, -z) \\ X\psi(x, y, z) = x\psi(x, y, z) \rightarrow \text{pode } \notin \mathfrak{F}. \\ D_x\psi(x, y, z) = \frac{\partial}{\partial x}\psi(x, y, z) \rightarrow \text{pode } \notin \mathfrak{F}. \end{cases}$$

*Muitos outros operadores lineares serão definidos durante o curso!*

## Ferramentas Matemáticas da Mecânica Quântica

*Produto de operadores:*  $AB\psi = A(B\psi(\vec{r})) = A\phi(\vec{r})$  onde  $\phi(\vec{r}) = B\psi(\vec{r})$

Em geral  $AB \neq BA$

o Definimos o comutador de  $A$  com  $B$  por  $[A, B] \equiv AB - BA$

Note que  $[X, D_x]\psi(\vec{r}) = \left(x \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} x\right)\psi(\vec{r}) = x \frac{\partial\psi(\vec{r})}{\partial x} - \psi(\vec{r}) - x \frac{\partial\psi(\vec{r})}{\partial x} = -\psi(\vec{r})$ ,

o que permite concluir que  $[X, D_x] = -1$

### Bases ortogonais discretas em $\mathfrak{F}$

a) *Definição:*

Considere um conjunto de funções de  $\mathfrak{F}$  (enumerável e contável)  $\left\{ \begin{array}{l} u_1 \in \mathfrak{F} \\ u_2 \in \mathfrak{F} \\ \vdots \\ u_i \in \mathfrak{F} \end{array} \right.$

Dizemos que o conjunto é ortonormal se  $(u_i, u_j) = \int d^3r u_i^*(\vec{r})u_j(\vec{r}) = \delta_{ij}$

onde  $\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{se } i = j \\ 0 & \text{se } i \neq j \end{cases}$  é o delta de Kronecker.  $\{u_i\}$  é uma base

(um conjunto completo) se  $\forall \psi(\vec{r}) \in \mathfrak{F} \rightarrow \psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r})$ .

## Ferramentas Matemáticas da Mecânica Quântica

b) Componentes de uma função de onda na base  $\{u_i\}$

$$(u_j, \psi) = (u_j, \sum_i c_i u_i) = \sum_i (u_j, u_i) c_i = \sum_i \delta_{ij} c_i = c_j$$

ou seja  $c_i = (u_i, \Psi) = \int d^3r u_i^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) \rightarrow$  integrais de “recobrimento”.

Comentários:

- Observe estrutura vetorial  $\vec{v} = \sum_i v_i \vec{e}_i$  onde  $v_i = \vec{e}_i \cdot \vec{v}$
- A mesma função pode ter componentes diferentes em bases diferentes.
- Nas próximas aulas representaremos operadores na forma de matrizes.

c) Produtos escalares em termos das componentes  $\{u_i\}$

primeiro note  $\begin{cases} \phi(\vec{r}) = \sum_i b_i u_i(\vec{r}) \\ \psi(\vec{r}) = \sum_j c_j u_j(\vec{r}) \end{cases}$  e calcule  $(\phi, \psi) = (\sum_i b_i u_i, \sum_j c_j u_j)$

para obter  $(\phi, \psi) = \sum_{ij} b_i^* c_j (u_i, u_j) = \sum_{ij} b_i^* c_j \delta_{ij} = \sum_i b_i^* c_i$

Observe que  $(\psi, \psi) = \sum_i c_i^* c_i = \sum_i |c_i|^2$

Note estrutura vetorial  $\vec{v} = \sum_i v_i \vec{e}_i$ ;  $\vec{w} = \sum_i w_i \vec{e}_j \rightarrow \vec{v} \cdot \vec{w} = \sum_i v_i w_i$

## Ferramentas Matemáticas da Mecânica Quântica

d) *Relação de Completeza de  $\{u_i\}$*

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r}) = \sum_i (u_i, \psi) u_i(\vec{r}) = \sum_i \left[ \int u_i^*(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d^3 r' \right] u_i(\vec{r}),$$

que pode ser reorganizado na forma

$$\psi(\vec{r}) = \int d^3 r' \psi(\vec{r}') \underbrace{\left[ \sum_i u_i(\vec{r}) u_i^*(\vec{r}') \right]}_{F(\vec{r}, \vec{r}')} = \int d^3 r' \psi(\vec{r}') F(\vec{r}, \vec{r}')$$

O que permite reconhecer  $F(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \rightarrow$  delta de Dirac. Assim a relação de completeza pode ser escrita na forma:

$$\sum_i u_i(\vec{r}) u_i^*(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

Comentário

- Se  $\{u_i\}$  é uma base, a relação da caixa azul é satisfeita. E se a relação da caixa azul for satisfeita, será que podemos concluir que  $\{u_i\}$  é uma base?

Sim, basta escrever:  $\psi(\vec{r}) = \int d^3 r' \psi(\vec{r}') \delta(\vec{r} - \vec{r}')$  e substituir a  $\delta(\vec{r} - \vec{r}')$

com auxílio da caixa azul e concluir:  $\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r})$ .