Ferramentas Matemáticas da Mecânica Quântica

- *Bases que não estão contidas em* $\mathfrak{F}$

Exemplo: a base de ondas planas já utilizada para construir pacotes de ondas.

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp\ \bar{\psi}(p) e^{\frac{ipx}{\hbar}},$$

cuja transformada de Fourier fornece:

$$\bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ \psi(x) e^{\frac{-ipx}{\hbar}}$$

Note que um elemento da base é dado por $v_p(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}}$ com $|v_p(x)|^2 = \dfrac{1}{2\pi\hbar}$

e isso faz com que a integral $\displaystyle\int |v_p(x)|^2 dx$ fique divergente $\Rightarrow$ e $\therefore$ $v_p \notin \mathfrak{F}$.

- $\{v_p(x)\}$ é o conjunto de todas as ondas planas com $-\infty < p < +\infty$.
- Até aqui tínhamos $\{u_i\}$, com i discreto, agora o novo índice p é contínuo.

$$\text{Temos} \begin{cases} \psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\ \bar{\psi}(p) v_p(x) \text{ em } \{v_p(x)\} \leftrightarrow \psi(x) = \sum_i c_i u_i(x) \text{ em } \{u_i\} \\ \\ \bar{\psi}(p) = (v_p, \psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ v_p^\star(x)\psi(x) \leftrightarrow c_i = (u_i, \psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ u_i^\star(x)\psi(x) \end{cases}$$

Note que c_i, com i discreto, é análogo à $\bar{\psi}(p)$, com p contínuo.

Bases contínuas

- Mostre que $\begin{cases} (\psi,\psi) = \int dp |\bar{\psi}(p)|^2 \\ (\psi,\psi) = \sum_i |c_i|^2 \end{cases} \Rightarrow$ note as trocas $\begin{cases} \int dp \leftrightarrow \sum_i \\ |\bar{\psi}(p)|^2 \leftrightarrow |c_i|^2 \end{cases}$
- Será que $v_p(x)$ satisfaz a relação de completeza?

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp\ v_p(x) v_p^\star(x') = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dp\ e^{\frac{ip}{\hbar}(x-x')} = \underbrace{\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dk\ e^{ik(x-x')} = \delta(x-x')}_{\text{apêndice II}}$$

Esta fórmula é análoga à $\sum_i u_i(x)u_i^\star(x') = \delta(x-x')$ basta a troca $\int dp \leftrightarrow \sum_i$

- Normalização? Calcule $(v_p, v_{p'})$

$$(v_p, v_{p'}) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dx\ e^{\frac{ix}{\hbar}(p'-p)} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} du\ e^{iu(p'-p)} = \delta(p'-p)$$

Compare com $(u_i, u_j) = \delta_{ij}$ e perceba a troca $\delta(p'-p) \leftrightarrow \delta_{ij}$

$$\boxed{\textit{Dizemos que as } v_p(x) \textit{ são ortonormalizadas no sentido de Dirac}}$$

Bases contínuas em 3 dimensões

- *Para o caso 3-dimensional o elemento da base é igual à* $v_{\vec{p}}(\vec{r}) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} e^{\frac{i\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar}}$

$$\text{O que fornece} \begin{cases} \psi(\vec{r}) = \int d^3p\ \bar{\psi}(\vec{p}) v_{\vec{p}}(\vec{r}) \text{ em } \{v_{\vec{p}}\} \\ \bar{\psi}(\vec{p}) = (v_{\vec{p}}, \psi) = \int d^3r\ v^\star_{\vec{p}}(\vec{r})\psi(\vec{r}) \to \text{coeficiente de expansão} \\ (\varphi, \psi) = \int d^3r\ \varphi^\star(\vec{r})\psi(\vec{r}) = \int d^3p\ \bar{\varphi}^\star(\vec{p})\bar{\psi}(\vec{p}) \to \text{produto escalar} \\ \int d^3p\ v_{\vec{p}}(\vec{r}) v^\star_{\vec{p}}(\vec{r}\,') = \delta(\vec{r} - \vec{r}\,') \to \text{completeza} \\ (v_{\vec{p}}, v_{\vec{p}\,'}) = \delta(\vec{p} - \vec{p}\,') \to \text{(orto)normalização} \end{cases}$$

Resumo

$$i \Leftrightarrow \vec{p}$$

$$\sum_i \Leftrightarrow \int d^3p$$

$$\delta_{ij} \Leftrightarrow \delta(\vec{p} - \vec{p}\,')$$

Bases contínuas em 3 dimensões

- *Base de funções delta* $\rightarrow$ definidas pelos elementos $\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$

$$\text{onde} \begin{cases} \text{O conjunto } \{\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})\} \text{ é de funções de } \vec{r} \text{ com índice } \vec{r}_0, \\ \quad \text{e} \\ \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) \notin \mathfrak{F} \rightarrow \text{ não são quadraticamente integráveis.} \end{cases}$$

- Como expandir $\psi(\vec{r})$ nesta base? Que tal $\psi(\vec{r}) = \int d^3r_0 \psi(\vec{r}_0)\delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$

Note que $\psi(\vec{r}_0) = \int d^3r \; \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)\psi(\vec{r})$ e isso permite escrever:

$$\psi(\vec{r}) = \int d^3r_0 \psi(\vec{r}_0)\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) \text{ similar à } \psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r})$$

$$\psi(\vec{r}_0) = (\xi_{\vec{r}_0}, \psi) = \int d^3r \; \xi^\star_{\vec{r}_0}(\vec{r})\psi(\vec{r}) \text{ similar à } c_i = (u_i, \psi)$$

$$\text{A similaridade fica evidente com as trocas} \begin{cases} u_i(\vec{r}) \leftrightarrow \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) \\ i \leftrightarrow \vec{r}_0 \\ \sum_i \leftrightarrow \int d^3r_0 \\ c_i \leftrightarrow \psi(\vec{r}_0) \end{cases}$$

c_i e $\psi(\vec{r}_0)$ *são coordenadas da mesma função* $\psi(\vec{r})$ *em duas bases diferentes,* $\{u_i(\vec{r})\}$ *e* $\{\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})\}$, *respectivamente.*

Bases contínuas em 3 dimensões

- *Como fica o produto escalar* (φ, ψ)?

  Que tal $(\varphi, \psi) = \int d^3r_0 \; \varphi^\star(\vec{r}_0)\psi(\vec{r}_0)$

- *Como ficam a normalização e a relação de completeza? Que tal*

$$(\xi_{\vec{r}_0}, \xi_{\vec{r}_0'}) = \int d^3r \; \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)\delta(\vec{r} - \vec{r}_0{}') = \delta(\vec{r}_0 - \vec{r}_0{}')$$

$$\int d^3r_0 \; \xi^\star_{\vec{r}_0}(\vec{r})\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}\,') = \int d^3r_0 \; \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)\delta(\vec{r}\,' - \vec{r}_0) = \delta(\vec{r} - \vec{r}\,')$$

- Assim, tudo que foi feito com a base $\{u_i\}$ pode ser generalizado para a base $\{\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})\}$, usando as regras de correspondência:

$$i \Leftrightarrow \vec{r}_0$$

$$\sum_i \Leftrightarrow \int d^3r_0$$

$$\delta_{ij} \Leftrightarrow \delta(\vec{r}_0 - \vec{r}_0{}')$$

Estados físicos e bases contínuas

- *Comentários*
  - Um estado físico corresponde sempre à uma função de onda quadraticamente integrável.
  - Nem $v_{\vec{p}}(\vec{r})$ nem $\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})$ representam um estado de uma partícula. Elas são apenas auxiliares matemáticas.
  - Na óptica clássica, as ondas planas são muito úteis, mas lá também, $\nu \pm \Delta\nu$ com $\Delta\nu \neq 0 \Rightarrow$ Não existe onda plana na prática.
  - O mesmo se passa com $\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})$. Na prática ele é:

$$\xi^{(\epsilon)}_{\vec{r}_0}(\vec{r}) = \delta^{(\epsilon)}(\vec{r}-\vec{r}_0) = \delta^{(\epsilon)}(x-x_0)\delta^{(\epsilon)}(y-y_0)\delta^{(\epsilon)}(z-z_0)$$

onde $\delta^{(\epsilon)}$ tem largura ϵ e pico $\dfrac{1}{\epsilon}$ centrado em $x_0(y_0$ ou $z_0)$ de tal forma que $\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \delta^{(\epsilon)}(x-x_0)dx = 1$.

  - Construído assim, $\xi^{(\epsilon)}_{\vec{r}_0}(\vec{r})$ é quadraticamente integrável.
  - Note, entretanto, que no limite $\lim\limits_{\epsilon\to 0} \xi^{(\epsilon)}_{\vec{r}_0}(\vec{r}) = \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) \to$ ela não é quadraticamente integrável.

Bases contínuas - generalização

- Generalização: Bases contínuas ortonormais

Definição: Um conjunto de funções de $\vec{r}, \{w_\alpha(\vec{r})\}$, com índice α, tal que

$$\text{respeite}\begin{cases}\text{Completeza} \Rightarrow \int d\alpha\ w_\alpha(\vec{r})w^\star_\alpha(\vec{r}\,') = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,') \\ \\ \text{Orthonormalização} \Rightarrow (w_\alpha, w_{\alpha'}) = \int d^3r\ w^\star_\alpha(\vec{r})w_{\alpha'}(\vec{r}) = \delta(\alpha-\alpha')\end{cases}$$

Comentários:

★ Se $\alpha = \alpha' \Rightarrow (w_\alpha, w_{\alpha'})$ diverge $\rightarrow w_\alpha(\vec{r}) \notin \mathfrak{F}$.

★ A variável α pode representar vários índices, como no caso de $\vec{r}_0$ ou $\vec{p}$.

★ A base pode ter uma mistura de índices discretos com índices contínuos. Nosso livro texto representa essa situação por $\{u_i, w_\alpha\}$. Encontraremos vários casos ao longo do curso. Entre eles a base de funções estacionárias da Hamiltoniana de uma partícula sujeita à um potencial tipo caixa, ou de um elétron sujeito ao potencial Colombiano (o átomo de hidrogênio), etc. Neste caso valem as seguintes propriedades de ortogonalidade e completeza:

$$\boxed{\begin{gathered}(u_i, u_j) = \delta_{ij}; \quad (w_\alpha, w_{\alpha'}) = \delta(\alpha-\alpha'); \quad (u_i, w_\alpha) = 0 \\ \sum_i u_i(\vec{r})u^\star_i(\vec{r}\,') + \int d\alpha\ w_\alpha(\vec{r})w^\star_\alpha(\vec{r}\,') = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,')\end{gathered}}$$

Expansões de um estado em uma base contínua

- *Componentes da função de onda* $\psi(\vec{r})$

Primeiro escreva a função na forma $\psi(\vec{r}) = \int d^3r' \ \psi(\vec{r}\,')\delta(\vec{r}-\vec{r}\,')$. Em seguida, tome a $\delta(\vec{r}-\vec{r}\,')$ na base desejada e a insira nessa expressão.

- Como exemplo, vamos usar a base contínua do slide anterior, isto é $\int d\alpha \ w_\alpha(\vec{r})w^\star_\alpha(\vec{r}\,') = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,')$. Isto fornece:

$$\psi(\vec{r}) = \int d^3r' \ \psi(\vec{r}\,')\Big[\int d\alpha \ w_\alpha(\vec{r})w^\star_\alpha(\vec{r}\,')\Big] = \int d\alpha \Big[\underbrace{\int d^3r' \ w^\star_\alpha(\vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,')}_{c(\alpha) = (w_\alpha, \psi)}\Big] w_\alpha(\vec{r})$$

Assim, $\psi(\vec{r}) = \int d\alpha \ c(\alpha)w_\alpha(\vec{r})$ com $c(\alpha) = \int d^3r' \ w^\star_\alpha(\vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,')$.

- Observe a analogia com a base discreta, onde tínhamos $\begin{cases} \psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r}) \\ \quad \text{com} \\ c_i = (u_i, \psi) \end{cases}$

- Note que a base $\{v_p = e^{\frac{ipx}{\hbar}}\}$ é apenas um caso particular da base $\{w_\alpha\}$,

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \ \bar{\psi}(p) e^{\frac{ipx}{\hbar}} \ \text{com} \ \bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \ \psi(x) e^{\frac{-ipx}{\hbar}}$$

Produto escalar e norma em termos das componentes

- *Como ficam as expressões para o produto escalar e norma em termos das componentes da funções de onda em uma base contínua?*

Suponha dois estados $\begin{cases} \varphi(\vec{r}) = \int d\alpha\ b(\alpha) w_\alpha(\vec{r}) \\ \\ \psi(\vec{r}) = \int d\alpha'\ c(\alpha') w_{\alpha'}(\vec{r}) \end{cases}$ físicos, de uma partícula,

cujas componentes são $\begin{cases} b(\alpha) = \int d^3r'\ w^\star_\alpha(\vec{r}\,')\varphi(\vec{r}\,') \\ \\ c(\alpha') = \int d^3r'\ w^\star_{\alpha'}(\vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,') \end{cases}$

Temos que $(\varphi,\psi) = \displaystyle\int d^3r\, \varphi^\star(\vec{r})\psi(\vec{r}) = \int d\alpha \int d\alpha' b^\star(\alpha)c(\alpha') \underbrace{\int d^3r\ w_\alpha(\vec{r}) w_{\alpha'}(\vec{r})}_{\delta(\alpha-\alpha')}$

$$\therefore \quad \boxed{(\varphi,\psi) = \int d\alpha\ b^\star(\alpha)c(\alpha)}$$

Note caso particular $(\psi,\psi) = \displaystyle\int d\alpha\ c^\star(\alpha)c(\alpha) = \int d\alpha\ |c(\alpha)|^2.$

Resumindo

Propriedade	Base discreta	Base contínua
Relação de ortonormalização	(u_i, u_j)	$(w_\alpha, w_{\alpha'}) = \delta(\alpha - \alpha')$
Relação de completeza	$\sum_i u_i(\vec{r})u_i^\star(\vec{r}\,') = \delta(\vec{r} - \vec{r}\,')$	$\int d\alpha\ w_\alpha(\vec{r})w_\alpha^\star(\vec{r}\,') = \delta(\vec{r} - \vec{r}\,')$
Expansão da função de onda	$\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r})$	$\psi(\vec{r}) = \int d\alpha\ c(\alpha) w_\alpha(\vec{r})$
As componentes de $\psi(\vec{r})$	$c_i = (u_i, \psi)$	$c(\alpha) = (w_\alpha, \psi)$
Produto escalar	$(\varphi, \psi) = \sum b_i^\star c_i$	$(\varphi, \psi) = \int d\alpha\ b^\star(\alpha) c(\alpha)$
Quadrado da Norma	$(\psi, \psi) = \sum_i \|c_i\|^2$	$(\psi, \psi) = \int d\alpha\ \|c(\alpha)\|^2.$

- *Note que a mesma função de onda pode ser representada por diferentes bases.*
- *Note, em especial, que as componentes em bases diferentes são diferentes, mas representam "pedaços" da mesma coisa.*
- *Isso inspirou Dirac a criar um novo formalismo!*

Mais motivação para o formalismo de Dirac

- Até aqui tivemos em mente o seguinte postulado: "O estado quântico de uma partícula está definido, em um dado instante, por uma função $\psi(\vec{r})$"
- $\psi(\vec{r}) \in \mathfrak{F}$ e é uma amplitude de probabilidade.
- A interpretação probabilística é:

$$|\psi(\vec{r})|^2 d^3r \Rightarrow \begin{cases} \text{probabilidade de encontrar a partícula dentro} \\ \text{de um volume } d^3r \text{ centrado em } \vec{r}. \end{cases}$$

- Em seguida mostramos que $\psi(\vec{r})$ pode se representada por conjuntos distintos de componentes: c_i, $\bar{\psi}(p)$, $c(\alpha)$, e até o próprio $\psi(\vec{r}_0)$, correspondendo à diferentes funções de base:

Base	**Componentes de $\psi(\vec{r})$**
$u_i(\vec{r})$	$c_i \rightarrow i$ discreto
$v_{\vec{p}}(\vec{r})$	$\bar{\psi}(\vec{p}) \rightarrow \vec{p}$ contínuo
$\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})$	$\psi(\vec{r}_0) \rightarrow \vec{r}_0$ contínuo
$w_\alpha(\vec{r})$	$c(\alpha) \rightarrow \alpha$ contínuo

- Parece $\mathfrak{R}^3 \rightarrow$ espaço vetorial.

O formalismo de Dirac (início)

- Faremos algo similar ao que é feito no espaço vetorial $\Re^3$. A proposta é que: "Cada estado quântico de uma partícula seja caracterizado por um vetor de estado pertencente à um espaço abstrato $\xi_{\vec{r}}$ (este espaço, daqui para frente, será definido como o espaço de estados de uma partícula). Definimos então:

$$\boxed{\xi_{\vec{r}} \Rightarrow \text{subespaço do espaço de Hilbert,}}$$

em analogia com

$$\boxed{\mathfrak{F} \Rightarrow \text{subespaço do espaço } L^2.}$$

- $\xi_{\vec{r}}$ vai permitir a generalização do formalismo.

- Existem sistemas físicos, cuja descrição quântica não pode ser feita por funções de onda (com $\vec{r}$ do espaço $\Re^3$). Um exemplo é o spin da partícula. Para levar em conta esse tipo de possibilidade, trabalharemos de fato com um espaço ampliado, ξ, maior que $\xi_{\vec{r}}$, (onde $\xi \subset \xi_{\vec{r}}$).