Revisão e perspectivas para os próximos capítulos

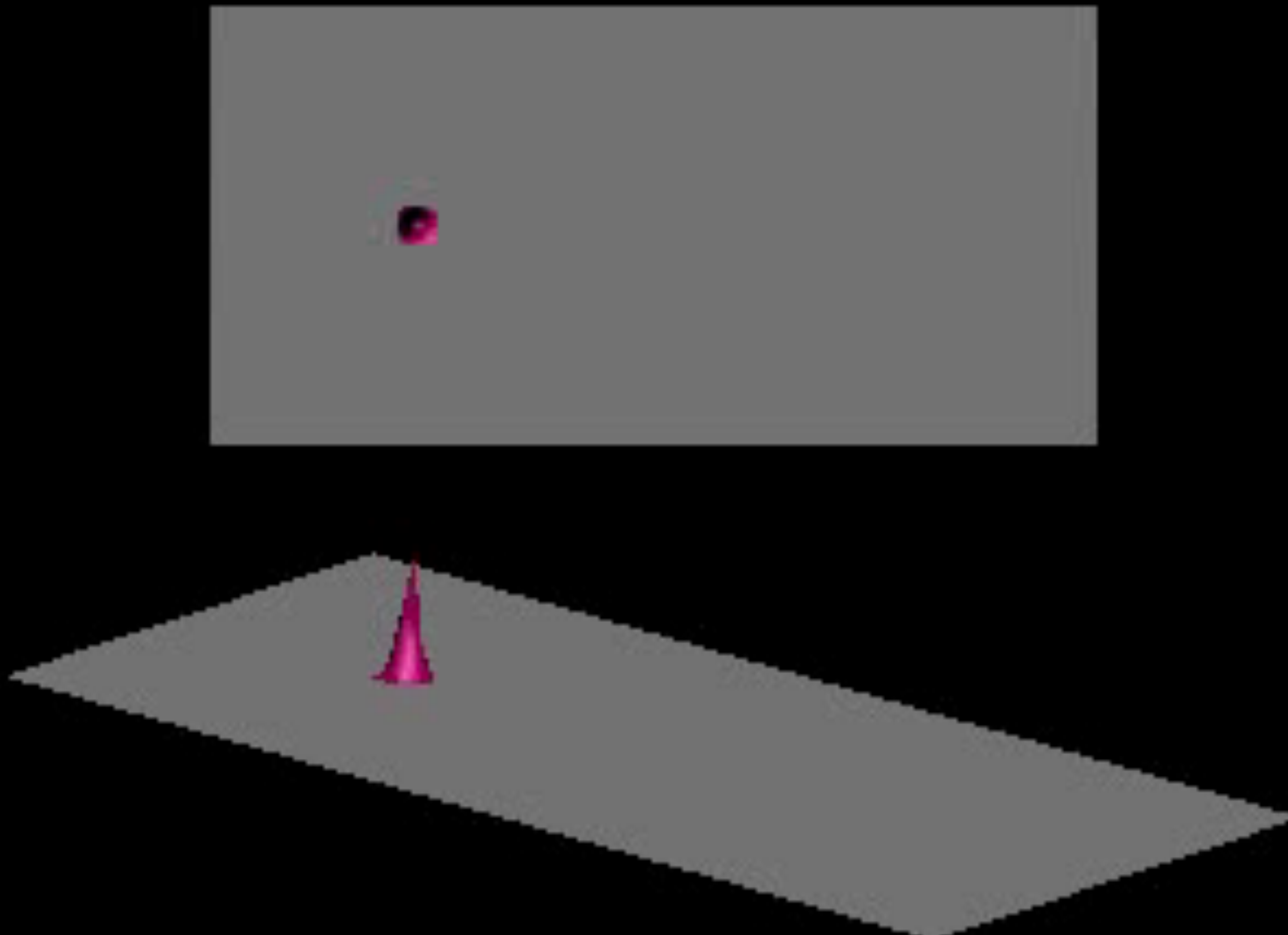
- No início da aula de hoje faremos uma revisão dos conceitos básicos da mecânica quântica apresentada no capítulo 1 (coisas já vistas em F589), fazendo uso de aplicativos/animações encontradas na internet.

- 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.

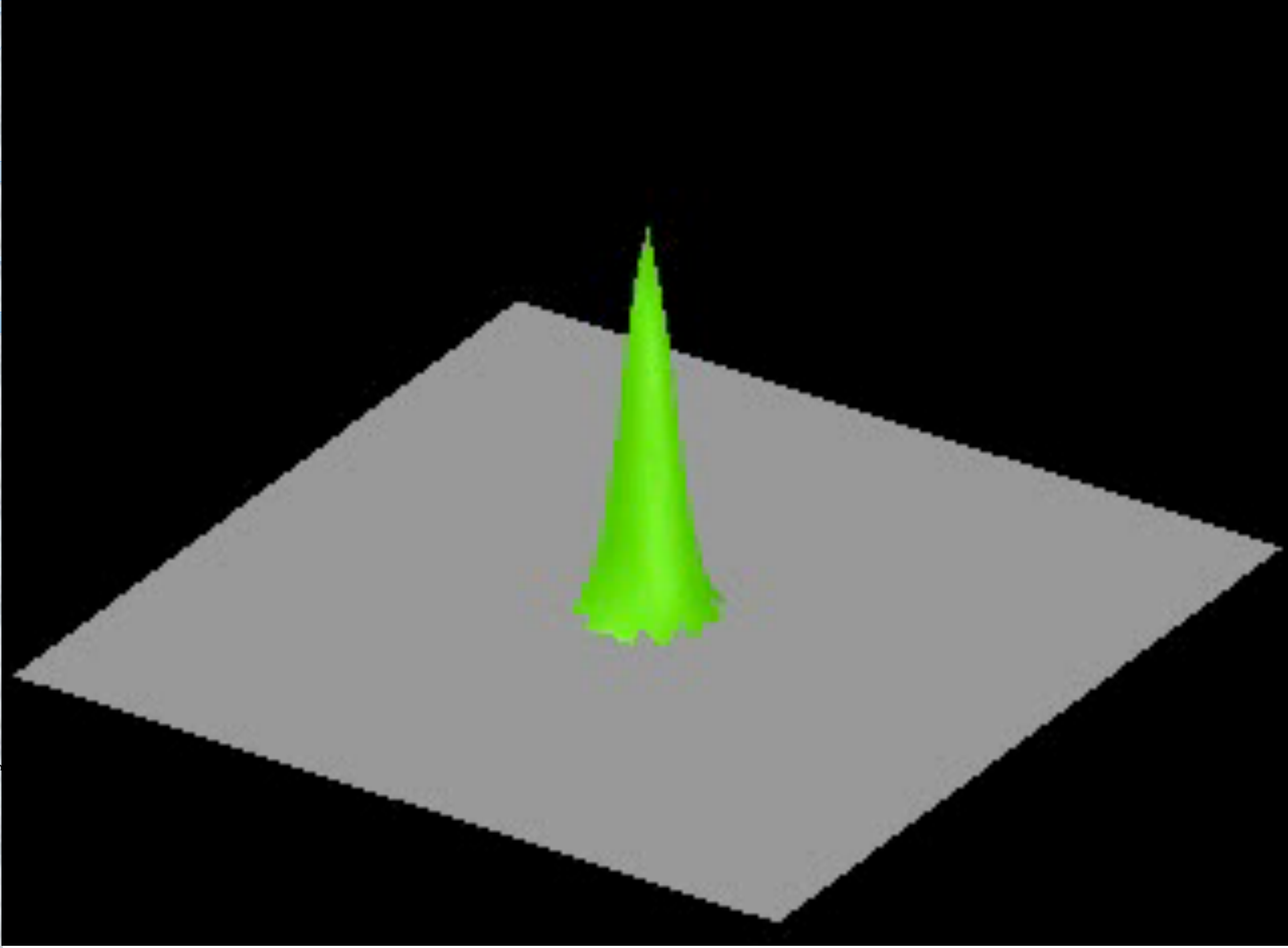
- Assim, começa hoje a apresentação de um formalismo bastante elegante, introduzido por Dirac no início do século passado, sobre uma das teorias científicas mais bem sucedidas da humanidade para descrever a natureza.

- 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.



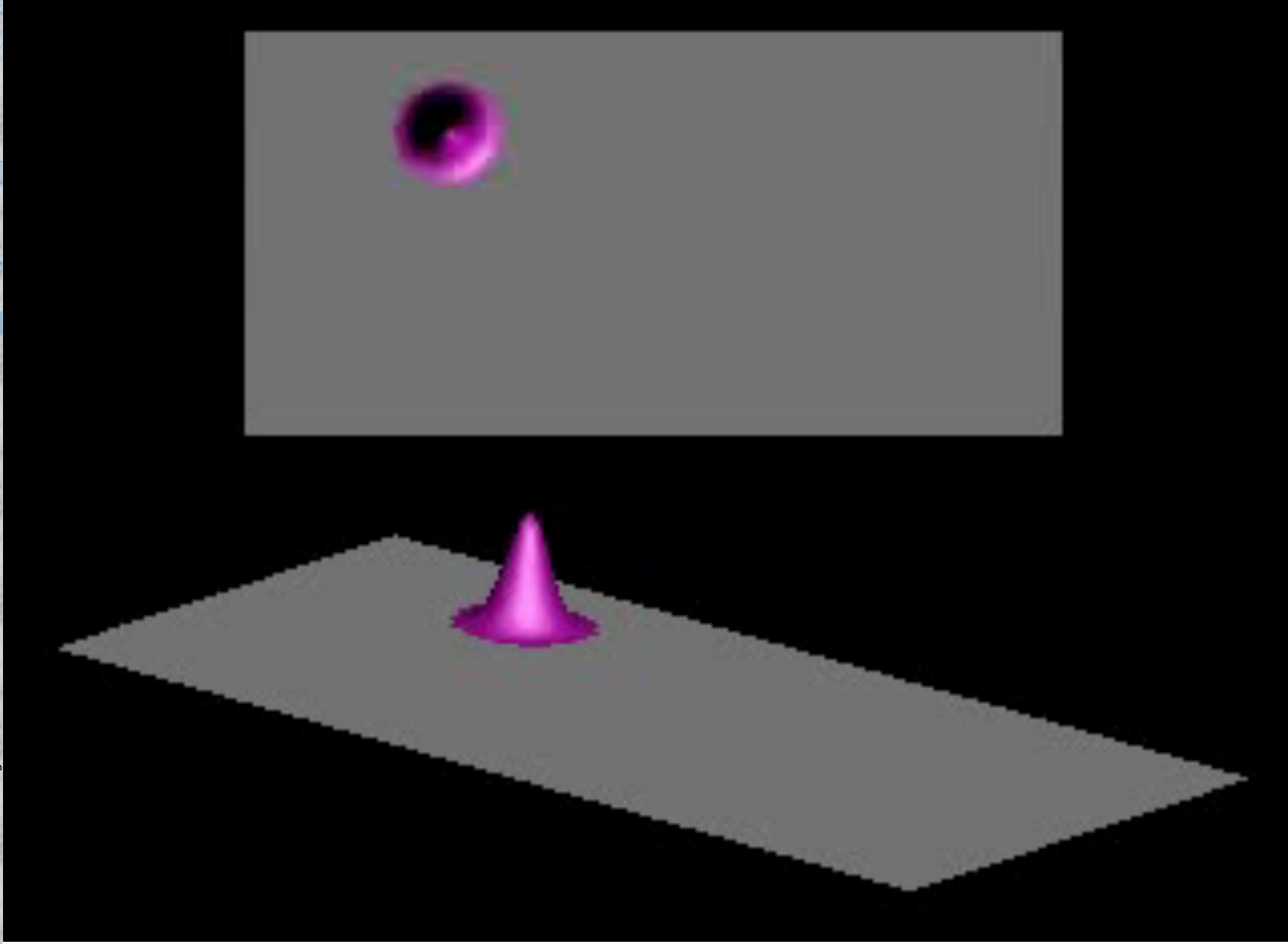
Partícula livre

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



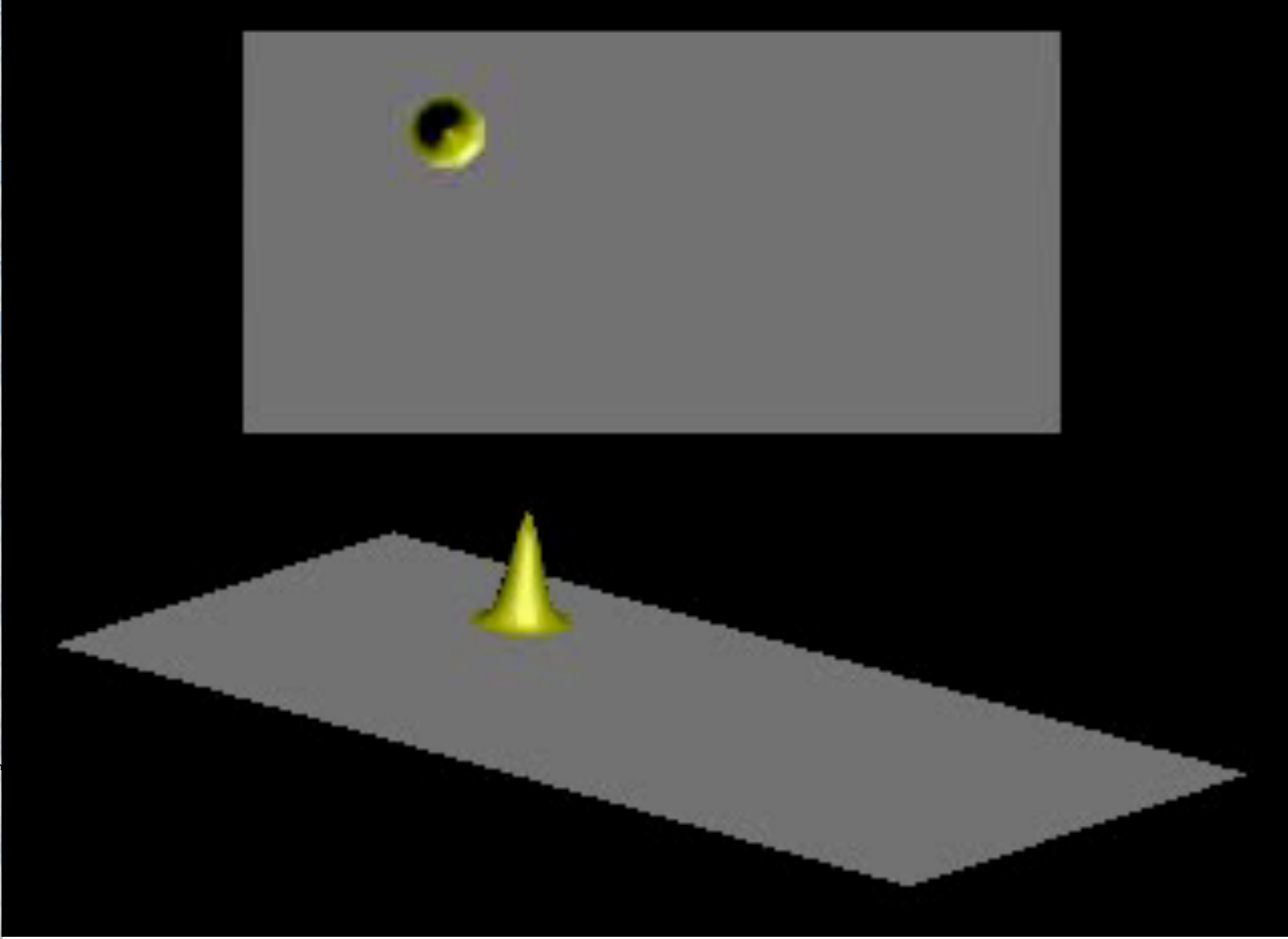
Partícula prisioneira na caixa

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



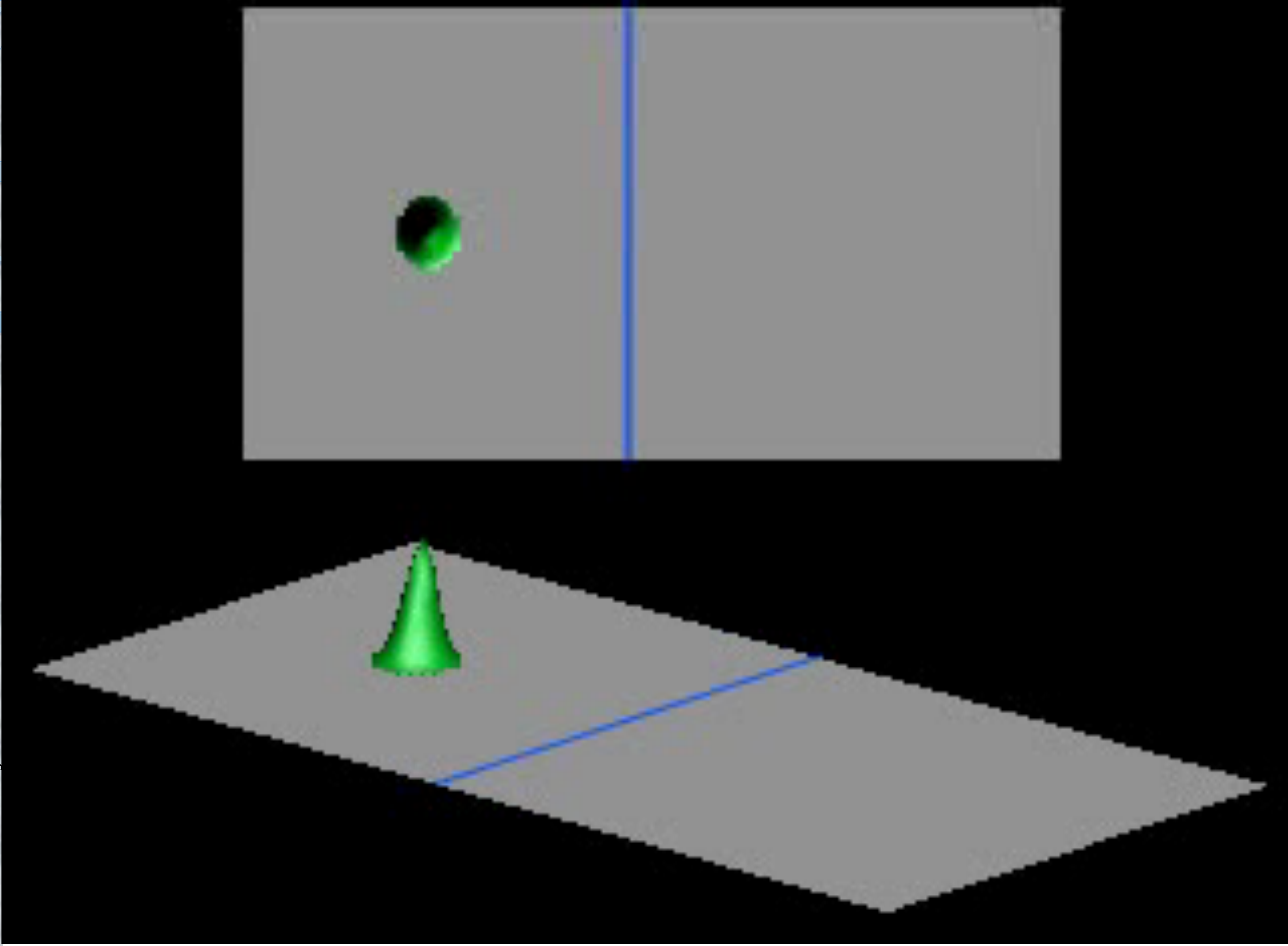
Partícula carregada em um campo magnético constante

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



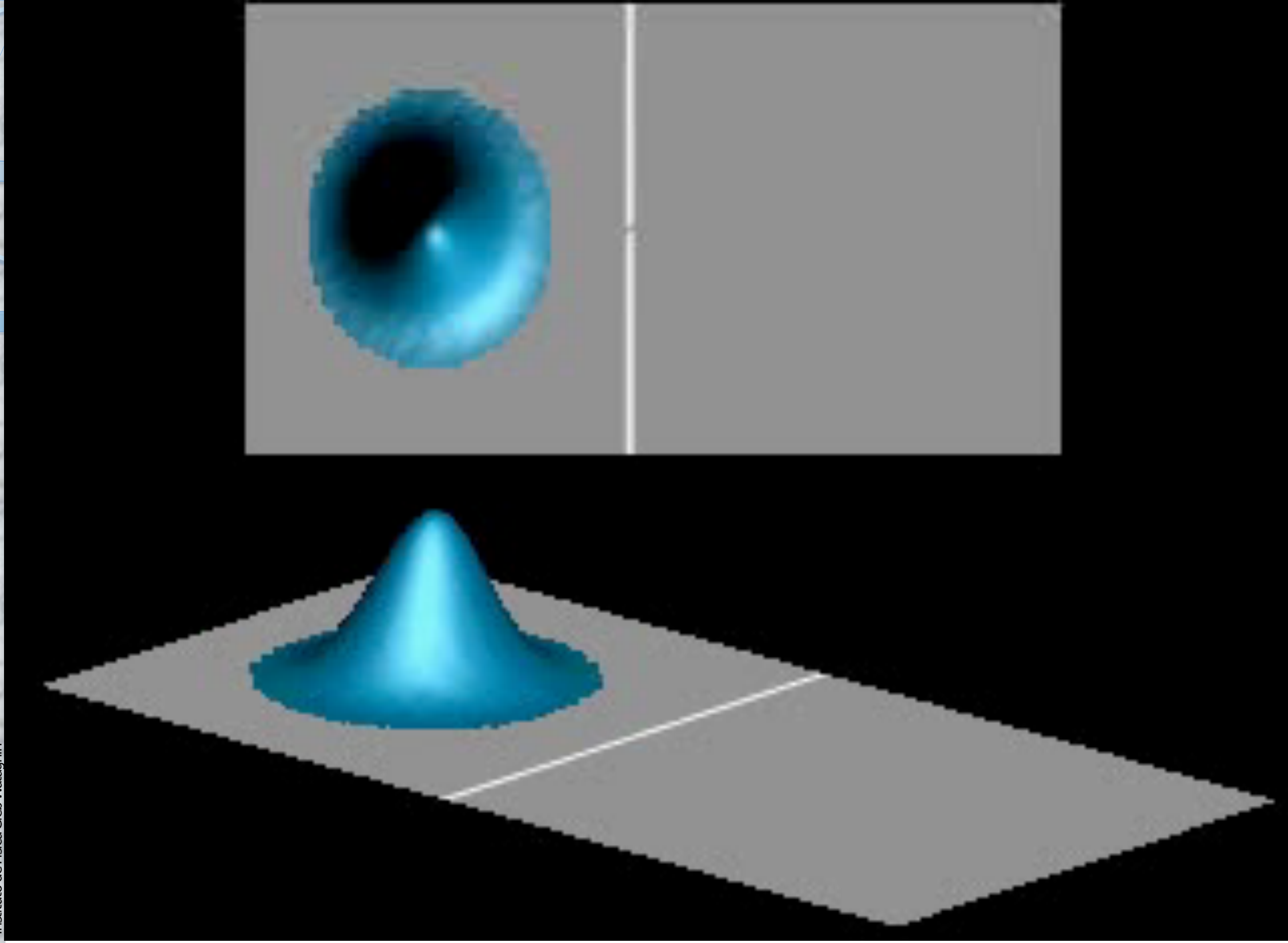
Partícula carregada na caixa em um campo magnético constante

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



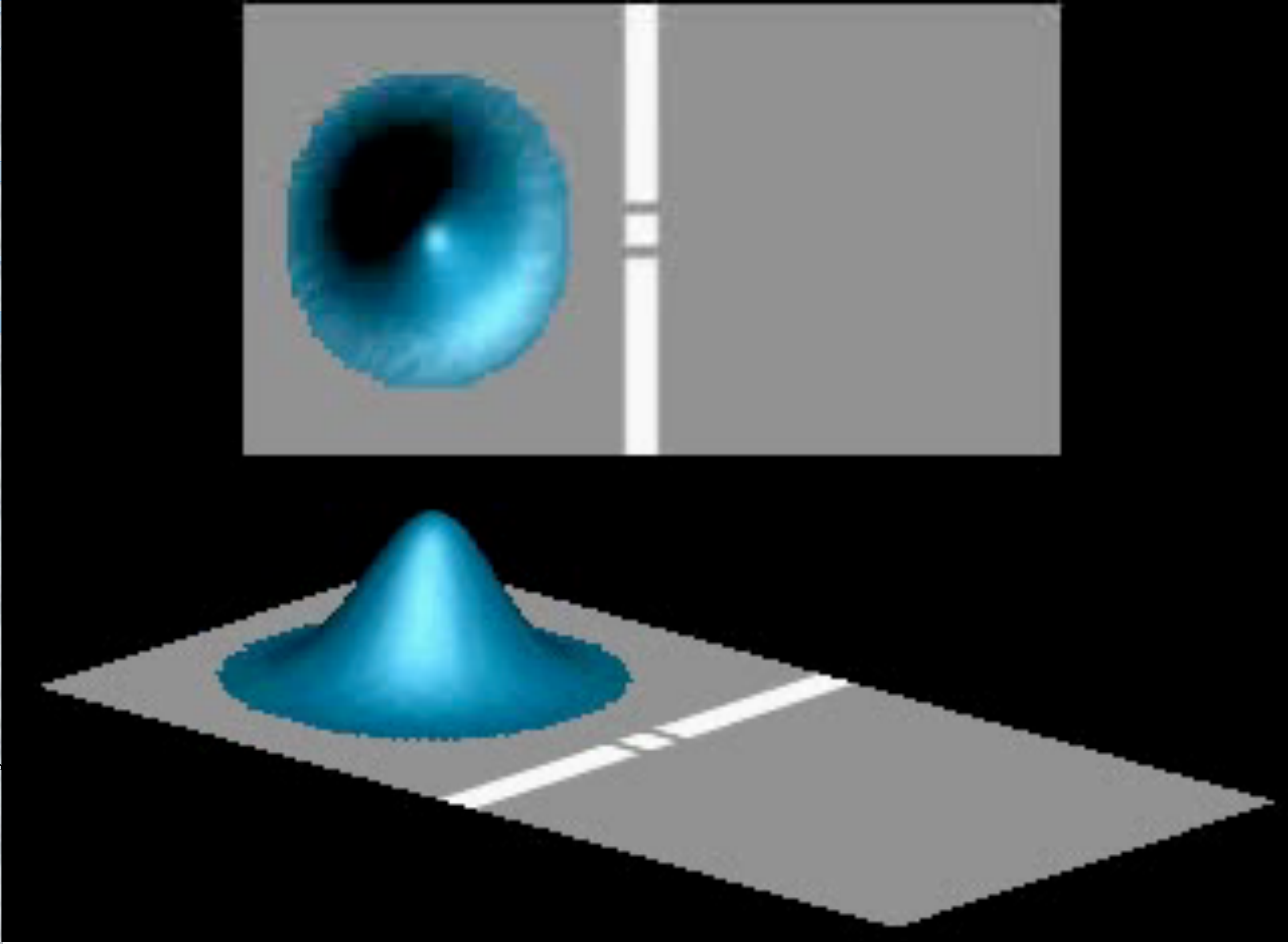
Efeito Túnel

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



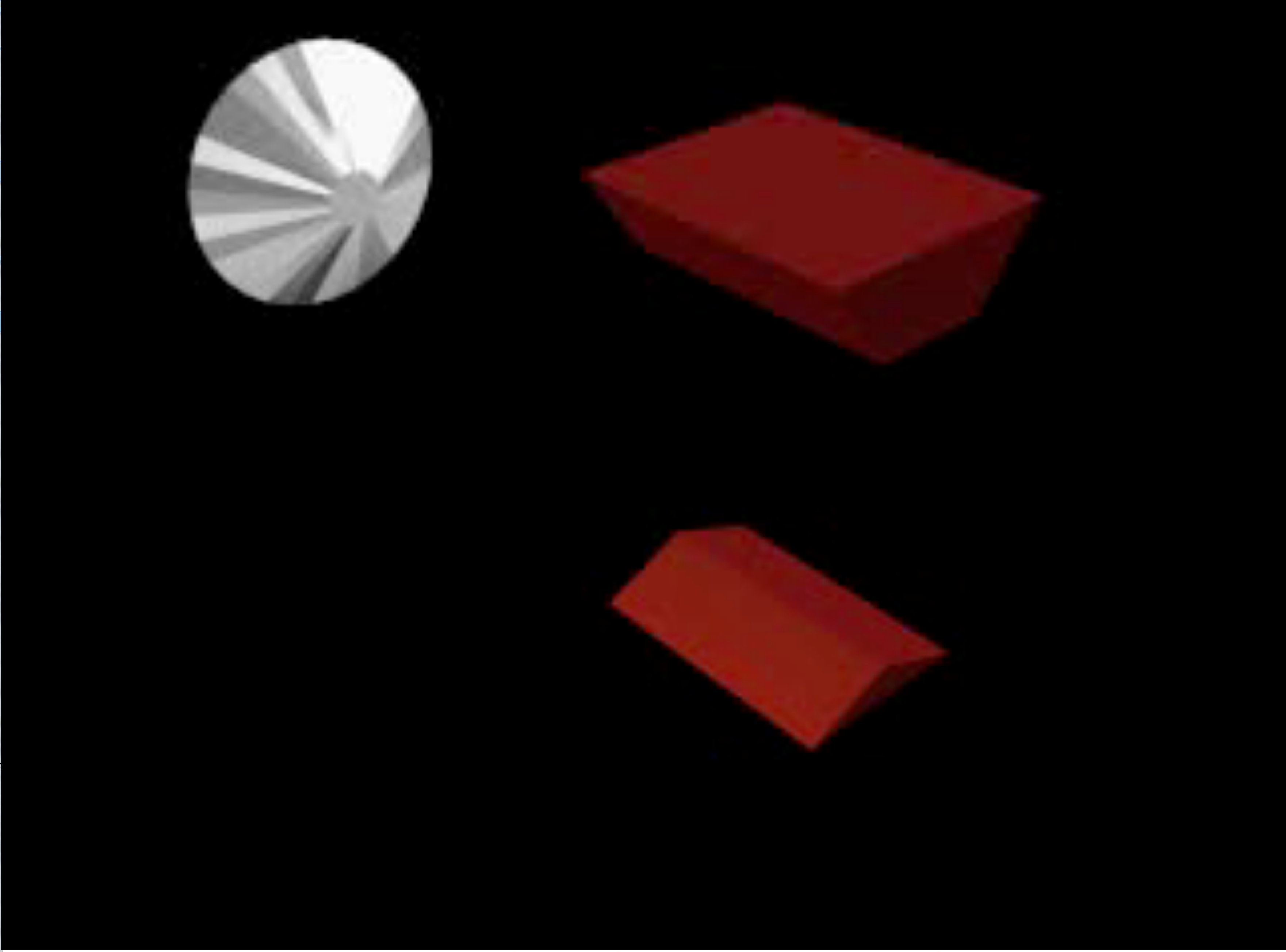
Difração: uma fenda

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



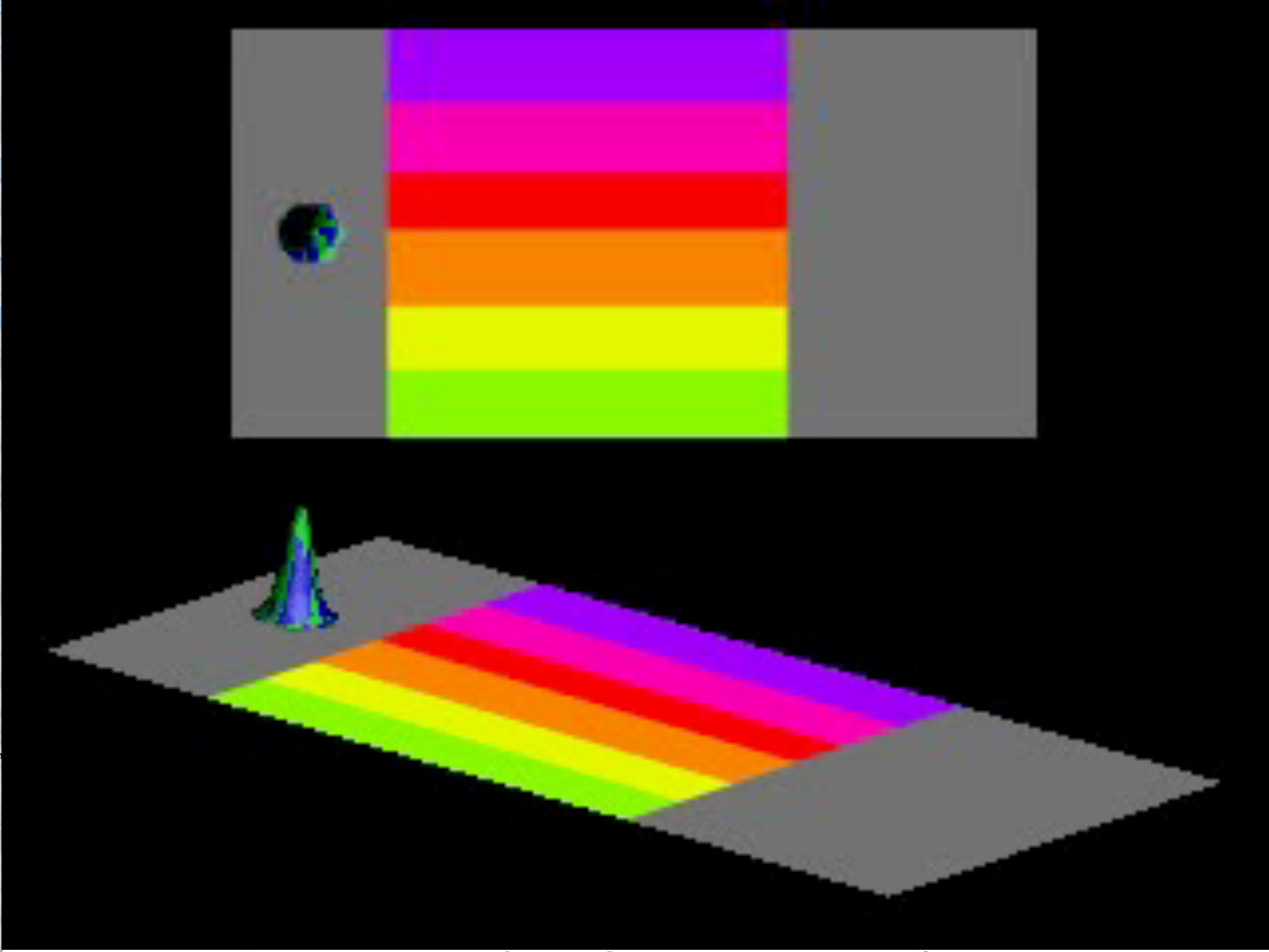
Interferência – duas fendas

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



Experimento de Stern-Gerlach: o spin do elétron

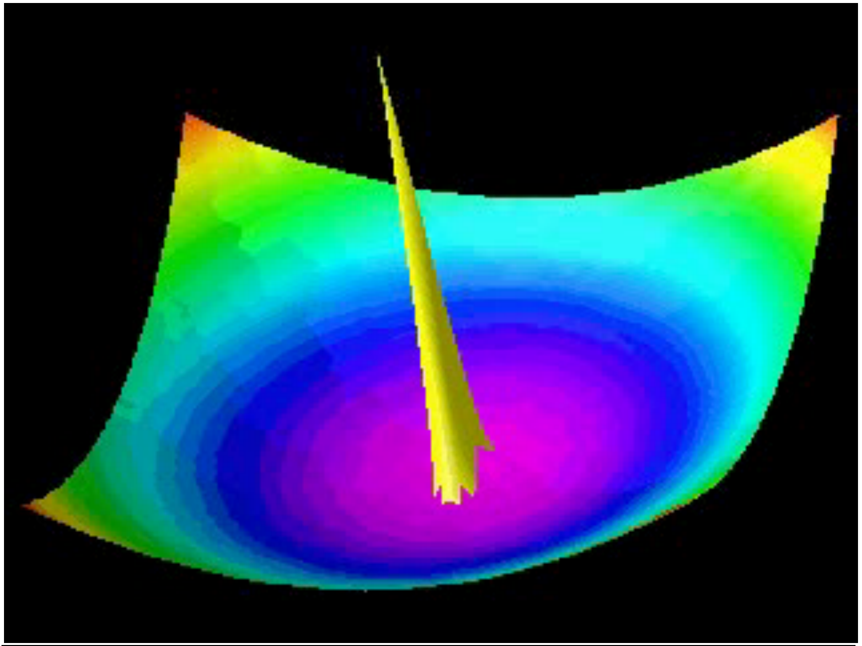
Visão Clássica

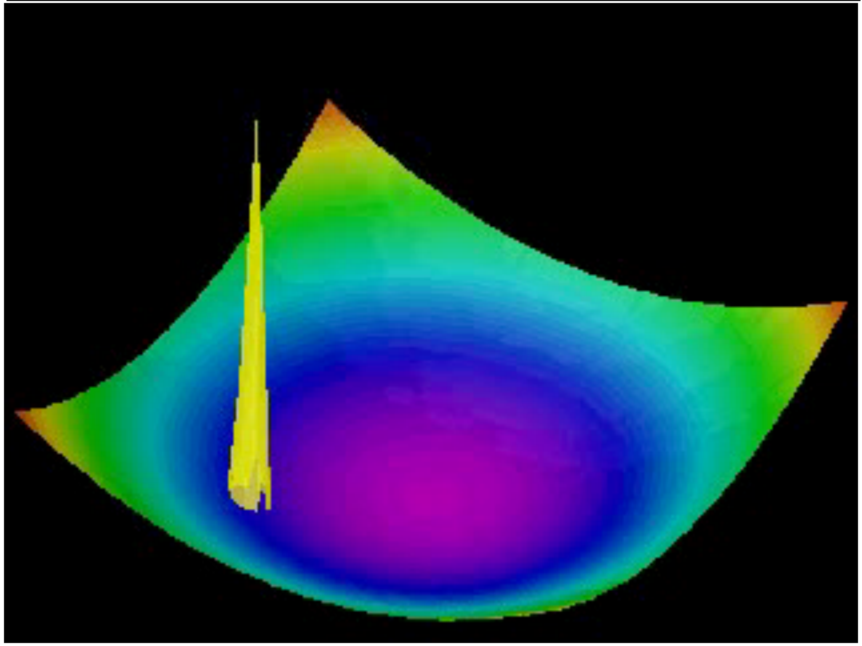


Experimento de Stern-Gerlach: o spin do elétron

Visão Quântica

Cuidados especiais com nossas interpretações





Ferramentas Matemáticas da Mecânica Quântica

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

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

- Por razões físicas (partícula precisa estar em algum lugar), queremos que está 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 λ_2, números complexos. Para ver isso considere

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

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

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

Ferramentas Matemáticas da Mecânica Quântica

e assim escrever

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

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

Se for menor mesmo, é possível escrever

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

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

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

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

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

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

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

Ferramentas Matemáticas da Mecânica Quântica

Propriedades do produto escalar

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

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

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

(iv) $(\psi,\psi) = \int d^3r\ \psi^\star(\vec{r})\psi(\vec{r}) =$ 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 demostrar a desigualdade de Schwarz, considere $\phi = \psi_1 + \lambda\psi_2,$ e escreva $(\phi, \phi) = (\psi_1, \psi_1) + \lambda(\psi_1, \psi_2) + \lambda^\star(\psi_2, \psi_1) + \lambda\lambda^\star(\psi_2, \psi_2) \geq 0$ e escolha (vale) $\lambda = -\dfrac{(\psi_2, \psi_1)}{(\psi_2, \psi_2)}$. 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:

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

c) Operadores Lineares

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

Definição 2: A é um operador linear se

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

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

Muitos outros operadores lineares serão definidos durante o curso!

Ferramentas Matemáticas da Mecânica Quântica

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

Em geral $AB \neq BA$

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

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

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

Bases othogonais discretas em $\mathfrak{F}$

a) *Definição:*

Considere um conjunto de funções de $\mathfrak{F}$ (enumerável e contável) $\begin{cases} u_1 \in \mathfrak{F} \\ u_1 \in \mathfrak{F} \\ \vdots \\ u_i \in \mathfrak{F} \end{cases}$

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

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* $\{u_i\}$

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

ou seja $\boxed{c_i = (u_i, \Psi) = \int d^3r\ u_i^\star(\vec{r})\psi(\vec{r})}$ $\rightarrow$ 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 $(\phi, \psi) = \sum_{ij} b_i^\star c_j (u_i, u_j) = \sum_{ij} b_i^\star c_j \delta_{ij} = \sum_i b_i^\star c_i$

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

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* $\{u_i\}$

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

que pode ser reorganizado na forma

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

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:

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

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: $\psi(\vec{r}) = \int d^3r' \psi(\vec{r'}) \delta(\vec{r} - \vec{r'})$ e substituir a $\delta(\vec{r} - \vec{r'})$ com auxílio da caixa azul e concluir: $\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r})$.