F 689 – Mecânica Quântica I

2º Semestre de 2022

21/11/2022

Aula 22

Aulas passadas

Oscilador harmônico uni-dimensional quântico:

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2; \quad [X, P] = i\hbar$$

Operadores de criação e destruição:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{X}{\lambda} + i\frac{\lambda}{\hbar}P\right)$$

$$\boxed{\lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}}$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{X}{\lambda} - i\frac{\lambda}{\hbar}P\right)$$

$$\left[a, a^\dagger\right] = 1$$

Hamiltoniana em termos dos operadores de criação e destruição:

$$\boxed{H = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)}$$

Aula passada

Operador número: $N = a^\dagger a$ $\Rightarrow$ $\boxed{H = \hbar\omega\left(N + \frac{1}{2}\right)}$

Espectro de N e de H: discreto e não degenerado

$$N\left|\varphi_n\right\rangle = n\left|\varphi_n\right\rangle, \quad n = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

$$H\left|\varphi_n\right\rangle = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\left|\varphi_n\right\rangle, \quad n = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

Auto-vetores: $\left|\varphi_n\right\rangle = \dfrac{\left(a^\dagger\right)^n}{\sqrt{n!}}\left|\varphi_0\right\rangle$ $\boxed{\left\langle\varphi_n|\varphi_p\right\rangle = \delta_{n,p}}$

Atuação de a e a^+ nos auto-vetores:

$$a\left|\varphi_n\right\rangle = \sqrt{n}\left|\varphi_{n-1}\right\rangle$$

$$a^\dagger\left|\varphi_n\right\rangle = \sqrt{n+1}\left|\varphi_{n+1}\right\rangle$$

Atuação de X e P nos auto-vetores:

$$X\left|\varphi_n\right\rangle = \frac{\lambda}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{n}\left|\varphi_{n-1}\right\rangle + \sqrt{n+1}\left|\varphi_{n+1}\right\rangle\right)$$

$$P\left|\varphi_n\right\rangle = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}\lambda}\left(\sqrt{n+1}\left|\varphi_{n+1}\right\rangle - \sqrt{n}\left|\varphi_{n-1}\right\rangle\right)$$

Aula passada

Valores esperados nos auto-estados de H:

$$\langle\varphi_n|\, X \,|\varphi_n\rangle = 0$$

$$\langle\varphi_n|\, P \,|\varphi_n\rangle = 0$$

$$\langle\varphi_n|\, X^2 \,|\varphi_n\rangle = \lambda^2\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

$$\langle\varphi_n|\, P^2 \,|\varphi_n\rangle = \frac{\hbar^2}{\lambda^2}\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

Incertezas nos auto-estados de H:

$$\Delta X_n = \lambda\sqrt{n+\frac{1}{2}}$$

$$\Delta P_n = \frac{\hbar}{\lambda}\sqrt{n+\frac{1}{2}}$$

$$\Delta X_n \Delta P_n = \hbar\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

Teorema do virial: $\langle\varphi_n|\, V(X) \,|\varphi_n\rangle = \langle\varphi_n|\, \frac{P^2}{2m} \,|\varphi_n\rangle$

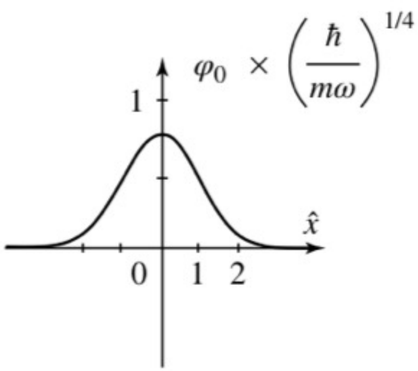
Aula passada

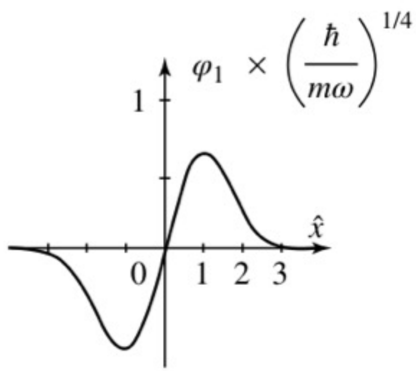
O estado fundamental é um estado de incerteza mínima (gaussiana):

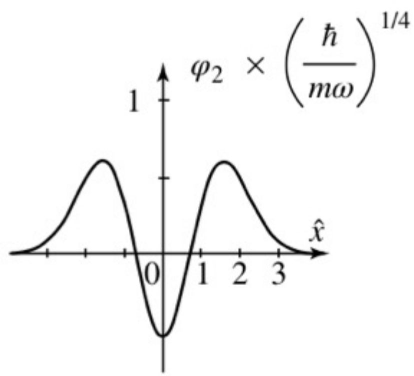
$$\varphi_0\left(x\right) = \frac{1}{\left(\pi\lambda^2\right)^{1/4}} e^{-\frac{1}{2}\left(x/\lambda\right)^2}$$

Funções de onda dos outros auto-estados:

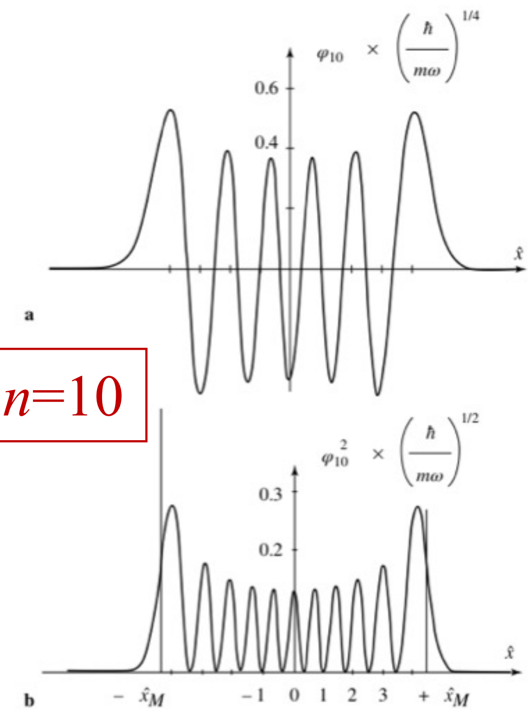
$$\varphi_n\left(x\right) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \frac{1}{\left(\pi\lambda^2\right)^{1/4}} H_n\left(x/\lambda\right) e^{-\frac{1}{2}\left(x/\lambda\right)^2}$$







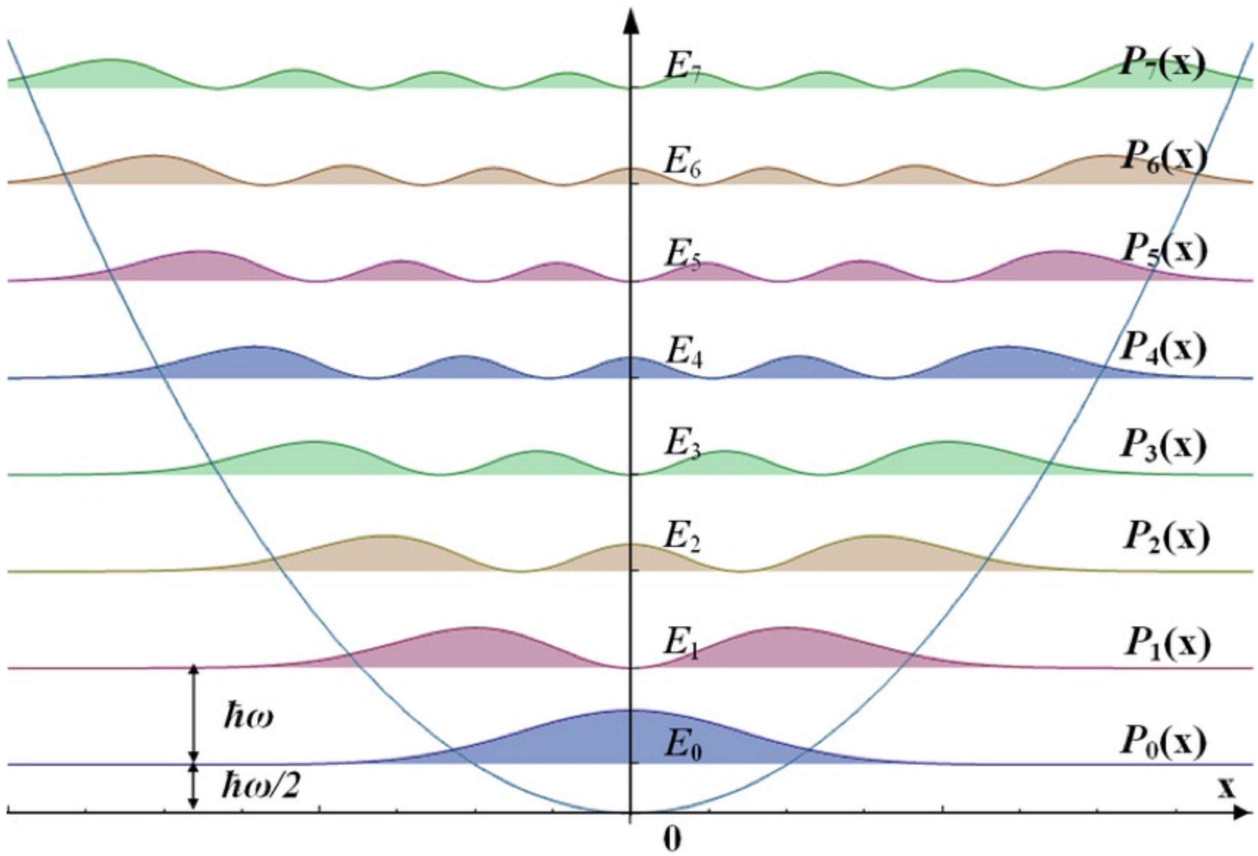
n=10



Aula passada

Densidades de probabilidades:

$$P_n\left(x\right) = \left|\varphi_n\left(x\right)\right|^2$$



Significativa apenas na região classicamente permitida: $R_{clas} = \left[-x_M, x_M\right]$

Aula passada

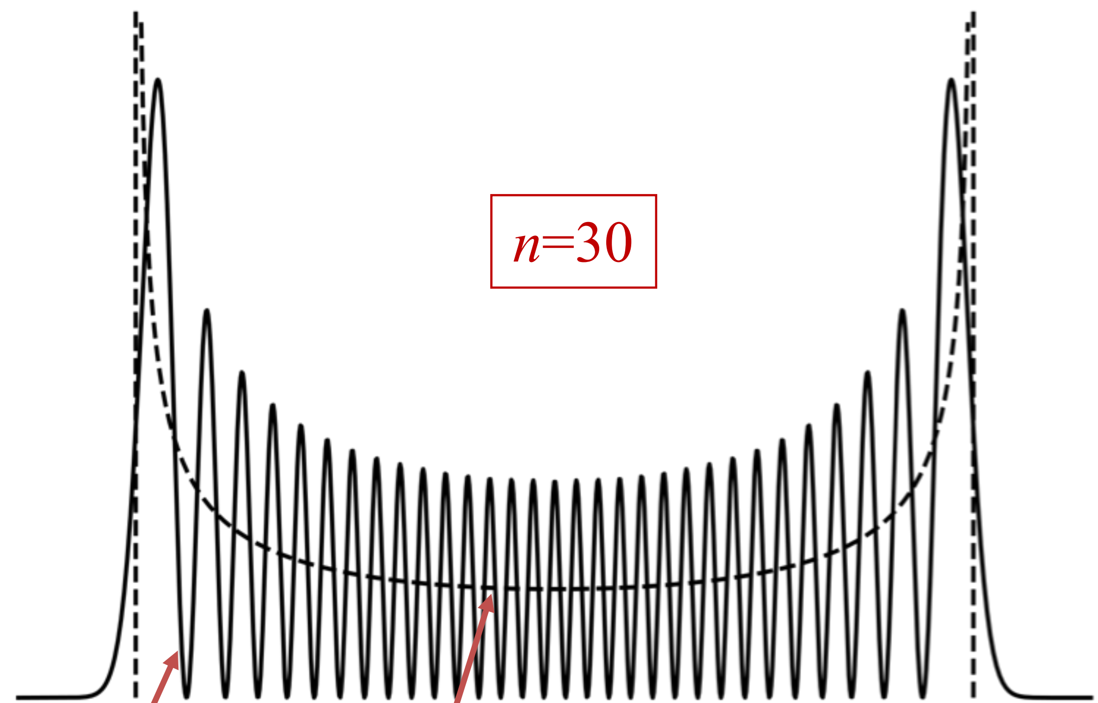
Densidade de probabilidade clássica:

$$P_{clas}\left(x\right)dx \propto dt = \frac{dx}{v}$$

$$\Rightarrow P_{clas}\left(x\right) = \frac{\omega}{\pi}\frac{1}{\sqrt{\frac{2E}{m} - \omega^2 x^2}}$$

$$P_{clas}(x) \propto \frac{1}{v}$$

$$E = \frac{1}{2} m v^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$



$$P_n\left(x\right) \xrightarrow[n\to\infty]{} P_{class}\left(x\right)\left[2\cos^2\left(\frac{\sqrt{2n}x}{\lambda} - n\frac{\pi}{2}\right)\right]$$

Evolução temporal de valores esperados

DE MANEIRA GERAL:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_n(0)\, e^{-iE_n t/\hbar} |\varphi_n\rangle \qquad E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} C_n(0)\, e^{-i\omega t(n+1/2)} |\varphi_n\rangle$$

$$= e^{-i\omega t/2} \sum_{n=0}^{\infty} C_n(0)\, e^{-in\omega t} |\varphi_n\rangle$$

COM $|\psi(t)\rangle$ POSSO CALCULAR VALORES ESPERADOS:

$$\langle A\rangle(t) = \langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle = \sum_{m,n=0}^{\infty} C_m^*(0)\, C_n(0) \langle\varphi_m|A|\varphi_n\rangle$$

$$\times\, e^{-i(n-m)\omega t}$$

$$\Rightarrow \nu_{m,n} = (n-m)\frac{\omega}{2\pi} \longrightarrow \text{FREQUÊNCIAS DE BOHR}$$

AS FREQUÊNCIAS DE BOHR DO OH1D SÃO MÚLTIPLOS (HARMÔNICOS) DA FREQUÊNCIA FUNDAMENTAL $\frac{\omega}{2\pi}$.

$\langle x \rangle(t)$ E $\langle p \rangle(t)$

UMA VIA DE CÁLCULO É O TEOREMA DE EHRENFEST:

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{\langle p \rangle}{m} \quad \text{E} \quad \frac{d\langle p \rangle}{dt} = -\langle V'(x) \rangle = -m\omega^2 \langle x \rangle$$

ESSE SISTEMA PODE SER FACILMENTE RESOLVIDO:

$$\frac{d^2\langle x \rangle}{dt^2} = \frac{1}{m}\frac{d\langle p \rangle}{dt} = -\omega^2 \langle x \rangle; \quad \frac{d^2\langle p \rangle}{dt^2} = -m\omega^2 \frac{d\langle x \rangle}{dt} = -\omega^2 \langle p \rangle$$

SÃO A EQ. CLÁSSICA DO OH1D:

$$\langle x \rangle(t) = \langle x \rangle(0)\cos\omega t + \frac{\langle p \rangle(0)}{m\omega}\sin\omega t$$

$$\langle p \rangle(t) = \langle p \rangle(0)\cos\omega t - m\omega\langle x \rangle(0)\sin\omega t$$

O FATO DE $\langle x \rangle(t)$ E $\langle p \rangle(t)$ PAR O COMPORTAMENTO CLÁSSICO É UMA PARTICULARIDADE DE $V(x) = \lambda x^n$ $(n = 0, 1, 2)$

Momento angular
na mecânica quântica

Por que estudar momento angular?

ISSO É IMPORTANTE POR VÁRIAS RAZÕES:

. ÁTOMOS: OS ELÉTRONS MOVEM-SE SOB A AÇÃO DE UM POTENCIAL CENTRAL: $V(r)$, $\vec{F} = -\frac{dV}{dr}\hat{r}$

$\Rightarrow$ CLASSICAMENTE, E TAMBÉM QUANTICAMENTE, O MOMENTO ANGULAR TOTAL DOS ELÉTRONS É CONSERVADO.

. O SPIN DAS PARTÍCULAS É UM MOMENTO ANGULAR INTRÍNSECO. SUAS PROPRIEDADES SÃO AS MESMAS DO MOMENTO ANGULAR ORBITAL.

. A OPERAÇÃO DE ROTAÇÃO DE UM SISTEMA É IMPLEMENTADA EM MEC. QUANT. ATRAVÉS DO OPERADOR MOMENTO ANGULAR.

O momento angular clássico e sua quantização

AS COMPONENTES DO MOMENTO ANGULAR CLÁSSICO:

$\ell_x = y p_z - z p_y$; $\ell_y = z p_x - x p_z$; $\ell_z = x p_y - y p_x$ $(\vec{\ell} = \vec{r} \times \vec{p})$

REGRAS DE QUANTIZAÇÃO: $x \to X$, $p_x \to P_x$; . . .

$L_x = Y P_z - Z P_y$; $L_y = Z P_x - X P_z$; $L_z = X P_y - Y P_x$

$[X, P_x] = i\hbar = [Y, P_y] = [Z, P_z]$ E OS OUTROS SÃO NULOS.

Relações de comutação do momento angular

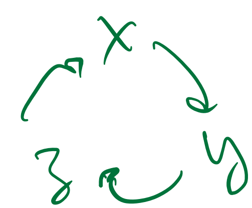
VAMOS CALCULAR OS COMUTADORES ENTRE L_x, L_y, L_z

$$[L_x, L_y] = [YP_z - ZP_y, ZP_x - XP_z] = \underbrace{[YP_z, ZP_x]}_{1} + \underbrace{[ZP_y, XP_z]}_{2} - \underbrace{[ZP_y, ZP_x]}_{0} - \underbrace{[YP_z, XP_z]}_{0}$$

$$1: \; Y[P_z, ZP_x] + \underbrace{[Y, ZP_x]}_{0} P_z = Y\{Z \underbrace{[P_z, P_x]}_{0} + \underbrace{[P_z, Z]}_{-i\hbar} P_x\} = -i\hbar Y P_x$$

$$2: \; i\hbar X P_y$$

$$[L_x L_y] = i\hbar(\underbrace{-YP_x + XP_y}_{L_z}) \Rightarrow [L_x, L_y] = i\hbar L_z$$



ANALOGAMENTE: $[L_y, L_z] = i\hbar L_x$; $[L_z, L_x] = i\hbar L_y$

HÁ UMA MANEIRA COMPACTA DE ESCREVER ESSES COMUTADORES: $(L_x, L_y, L_z) \to (L_1, L_2, L_3)$

$$\boxed{[L_i, L_j] = i\hbar\, \epsilon^{ijk} L_k \quad \text{(SOMA IMPLÍCITA EM } \underline{k}\text{)}}$$

ϵ^{ijk}: TENSOR TOTALMENTE ANTI-SIMÉTRICO DE LEVI-CIVITA

$$\epsilon^{ijk} = \begin{cases} 1, & \text{SE } (ijk) = (123) \text{ OU } (231) \text{ OU } (312) \\ -1, & \text{SE } (ijk) = (213) \text{ OU } (132) \text{ OU } (321) \\ 0, & \text{SE HOUVER REPETIÇÃO DE ÍNDICES: } (122), \ldots \end{cases}$$

SE HOUVER UMA SOMA DE VÁRIOS MOMENTOS ANGULARES (COMO, POR EXEMPLO, NUM ÁTOMO DE MUITOS ELÉTRONS): $\vec{L}^T = \sum_{i=1}^{n} \vec{L}_i$

$$\Rightarrow [L_i^T, L_j^T] = i\hbar\, \epsilon^{ijk} L_k^T$$

SENDO ASSIM, DEFINIMOS OPERADORES J_x, J_y, J_z, MOMENTOS ANGULARES QUAISQUER, COM OS COMUTADORES:

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z \ ; \ [J_y, J_z] = i\hbar J_x \ ; \ [J_z, J_x] = i\hbar J_y$$

O módulo quadrado de **J**

CONSIDEREMOS O OPERADOR:

$$J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$$

ELE COMUTA COM J_x, J_y, J_z. PROVA:

$$[J^2, J_x] = [J_x^2 + J_y^2 + J_z^2, J_x] = \underbrace{[J_y^2, J_x]}_{③} + \underbrace{[J_z^2, J_x]}_{④}$$

$$③: J_y \underbrace{[J_y, J_x]}_{-i\hbar J_z} + \underbrace{[J_y, J_x]}_{-i\hbar J_z} J_y = -i\hbar [J_y J_z + J_z J_y]$$

$$④: J_z \underbrace{[J_z, J_x]}_{i\hbar J_y} + \underbrace{[J_z, J_x]}_{i\hbar J_y} J_z = i\hbar [J_z J_y + J_y J_z]$$

$$③ + ④ = 0$$

$$\Downarrow$$

$$[J^2, J_x] = 0$$

$$[J^2, J_y] = [J^2, J_z] = 0$$

PODEMOS ENCONTRAR AUTO-VETORES COMUNS DE CADA PAR: $\{J^2, J_x\}$, $\{J^2, J_y\}$, $\{J^2, J_z\}$

CONVENCIONALMENTE, ESCOLHE-SE: $\{J^2, J_z\}$

NOSSA TAREFA É ENCONTRA AUTO-VETORES E AUTO-VALORES COMUNS DE:

$$\{J^2, J_z\}$$

Os operadores J_+ e J_-

DEFINIMOS: $J_+ = J_x + iJ_y$

$$J_- = (J_+)^\dagger = J_x - iJ_y$$

NOTEM QUE NÃO SÃO HERMITIANOS!

ALGUMAS RELAÇÕES QUE SERÃO USADAS:

$$J_+J_- = (J_x + iJ_y)(J_x - iJ_y) = J_x^2 + J_y^2 - i\underbrace{(J_xJ_y - J_yJ_x)}_{i\hbar J_z}$$

$$\boxed{J_+J_- = J_x^2 + J_y^2 + \hbar J_z}$$

$$J_-J_+ = (J_x - iJ_y)(J_x + iJ_y) = J_x^2 + J_y^2 + i\overbrace{(J_xJ_y - J_yJ_x)}^{i\hbar J_z}$$

$$\boxed{J_-J_+ = J_x^2 + J_y^2 - \hbar J_z}$$

$$J_+ J_- + J_- J_+ = 2\left(J_x^2 + J_y^2\right)$$

$$J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 = \boxed{\frac{1}{2}\left(J_+ J_- + J_- J_+\right) + J_z^2 = J^2}$$

Mais relações de comutação

AS SEGUINTES REGRAS DE COMUTAÇÃO SERÃO ÚTEIS:

$$\boxed{\begin{aligned} [J_z, J_+] &= \hbar J_+ \\ [J_z, J_-] &= -\hbar J_- \\ [J_+, J_-] &= 2\hbar J_z \\ [J^2, J_\pm] &= 0 \end{aligned}}$$

O espectro de J^2 e J_z

Os auto-valores de J^2 são não negativos

SEJA UM AUTO-VALOR /AUTO-VETOR: $J^2|\psi_\lambda\rangle = \lambda|\psi_\lambda\rangle$

APLICANDO $\langle\psi_\lambda|$ À ÚLTIMA EQUAÇÃO:

$$\lambda\langle\psi_\lambda|\psi_\lambda\rangle = \langle\psi_\lambda|J^2|\psi_\lambda\rangle = \langle\psi_\lambda|J_x^2|\psi_\lambda\rangle + \langle\psi_\lambda|J_y^2|\psi_\lambda\rangle + \langle\psi_\lambda|J_z^2|\psi_\lambda\rangle = (*)$$

$$\langle\psi_\lambda|J_x^2|\psi_\lambda\rangle = \left(\langle\psi_\lambda|J_x\right)\left(J_x|\psi_\lambda\rangle\right) = \| J_x|\psi_\lambda\rangle\|^2 \geq 0$$

$$(*) = \| J_x|\psi_\lambda\rangle\|^2 + \| J_y|\psi_\lambda\rangle\|^2 + \| J_z|\psi_\lambda\rangle\|^2 \geq 0$$

$$\Rightarrow \lambda \underbrace{\langle\psi_\lambda|\psi_\lambda\rangle}_{>0} \geq 0 \Rightarrow \boxed{\lambda \geq 0}$$