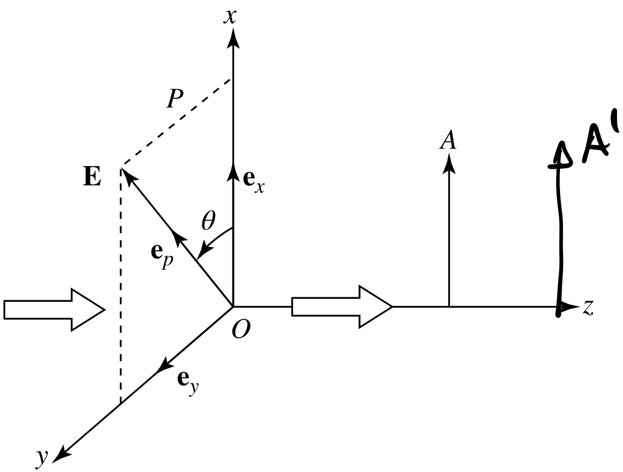
F 689 – Mecânica Quântica I

2º Semestre de 2022
24/08/2022
Aula 3

Aula passada



$\mathbf{e}_p$ é o estado de polarização do fóton

$$\hat{\mathbf{e}}_p = \cos\theta \hat{\mathbf{e}}_x + \sin\theta \hat{\mathbf{e}}_y$$

Princípio da decomposição espectral:

a) Se o estado $\mathbf{e}_p$ do fóton é um auto-estado do aparato medidor: $\theta=0$ ($\mathbf{e}_x$) ou $\theta=\pi/2$ ($\mathbf{e}_y$) → resultados determinísticos.

b) Se o estado $\mathbf{e}_p$ for uma superposição genérica de auto-estados → só se podem descrever os resultados probabilisticamente: $P_{\text{passar}} = \cos^2\theta$

c) O ato de medir modifica o estado do sistema após a medida: $\hat{\mathbf{e}}_p \to \hat{\mathbf{e}}_x$

A função de onda e sua interpretação

O estado da partícula é descrito por uma função de onda: $\psi\left(\mathbf{r},t\right) \in \mathbb{C}$
A probabilidade de se encontrar a partícula no volume d^3r em $\mathbf{r}$ no instante t é:

$$dP\left(\mathbf{r},t\right) = \left|\psi\left(\mathbf{r},t\right)\right|^2 d^3r$$

$$\boxed{\int_{\text{todo espaço}} \left|\psi\left(\mathbf{r},t\right)\right|^2 d^3r = 1}$$

A função de onda de um estado físico ter de ser de quadrado integrável.

Princípio da decomposição espectral:

a) O resultado da medida de uma quantidade física A pertence a um conjuto de auto-valores: $\{a\}=\{a_1,a_2,\ldots\}$.
b) A cada auto-valor a_i está associando um auto-estado: $\phi_i(\mathbf{r})$
c) Se, no instante t_0, $\psi_i(\mathbf{r},t_0) = \phi_i(\mathbf{r})$, a medida de A dará necessariamente a_i .
d) Se $\psi\left(\mathbf{r},t_0\right) = \sum_i c_i \phi_i\left(\mathbf{r}\right)$ a medida de A dará a_i com probabilidade:

$$P\left(a_i\right) = \frac{\left|c_i\right|^2}{\sum_i \left|c_i\right|^2}$$

e) Uma vez obtido a_i como resultado da medida de A, o estado da partícula passa a ser $\phi_i\left(\mathbf{r}\right)$

Aula passada

A equação de Schrödinger: $$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi\left(\mathbf{r},t\right)+V\left(\mathbf{r},t\right)\psi\left(\mathbf{r},t\right)=i\hbar\frac{\partial\psi\left(\mathbf{r},t\right)}{\partial t}}$$

$V(\vec{r},t)=0$

Partícula livre: $$\psi_{\vec{p}}(\mathbf{r},t)=\psi_0 e^{i\left(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-\frac{p^2}{2m}t\right)/\hbar}$$

Associações: $$\mathbf{p}\rightarrow\frac{\hbar}{i}\boldsymbol{\nabla}$$
$$\frac{p^2}{2m}\rightarrow-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2$$

a) A eq. de Schrödinger é linear: vale o princípio de superposição.
b) Dada a função de onda em $t=t_0$, é possível obter a função de onda para qualquer instante t: (equação diferencial de primeira ordem no tempo)

$$\psi\left(\mathbf{r},t_0\right)\rightarrow\psi\left(\mathbf{r},t>t_0\right)$$

A eq. de Schrödinger independente do tempo

SE $V(\vec{r},t) \equiv V(\vec{r})$ (INDEPENDENTE DO TEMPO)

$$\psi_E(\vec{r},t) = e^{-iEt/\hbar}\,\phi_E(\vec{r}) \Rightarrow i\hbar\frac{\partial \psi_E(\vec{r},t)}{\partial t} = E\left[e^{-iEt/\hbar}\phi_E(\vec{r})\right]$$

$$\Rightarrow \cancel{e^{-iEt/\hbar}}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right]\phi_E(\vec{r}) = \cancel{e^{-iEt/\hbar}}\,E\,\phi_E(\vec{r})$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi_E(\vec{r}) + V(\vec{r})\,\phi_E(\vec{r}) = E\,\phi_E(\vec{r})}$$

EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER INDEPENDENTE DO TEMPO

SE $\psi_E(\vec{r},t) = e^{-iEt/\hbar}\,\phi_E(\vec{r})$

$$\Rightarrow |\psi_E(\vec{r},t)|^2 = |\phi_E(\vec{r})|^2$$ INDEPENDENTE DO TEMPO!

ESTADO ESTACIONÁRIO

DADA A LINEARIDADE DA E.S. :

$$\psi(\vec{r},t) = \sum_n c_n \phi_n(\vec{r})\, e^{-iE_n t/\hbar} \qquad c_n \in \mathbb{C}$$

$\Rightarrow |\psi(\vec{r},t)|^2$ DEPENDE DO TEMPO

SE E ASSUME VALORES NO CONTÍNUO

$$\Rightarrow \psi(\vec{r},t) = \int dE\, c(E)\, \phi_E(\vec{r})\, e^{-iEt/\hbar}$$

NO INSTANTE $t=0$:

$$\psi(\vec{r},0) = \sum_n c_n \phi_n(\vec{r})$$

$$c_n = \int \phi_n^*(\vec{r})\,\psi(\vec{r},0)\, d^3r$$

Pacotes de ondas

PARTÍCULA LIVRE: $V(\vec{r},t)=0$

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r},t) = \psi_0\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\, e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t} \qquad \vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar} \qquad k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar}$$

DE MANEIRA GERAL, A SOLUÇÃO DA E.S.:

$$\psi(\vec{r},t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}}\, g(\vec{k})\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\, e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t}$$

$$\int d^3k \rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} dk_x \int_{-\infty}^{+\infty} dk_y \int_{-\infty}^{+\infty} dk_z$$

EM $t=0$:

$$\psi(\vec{r},0) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}}\, g(\vec{k})\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \Rightarrow \text{PACOTE DE ONDAS}$$

$g(\vec{k})$ É A TRANSFORMADA DE FOURIER DE $\psi(\vec{r},0)$

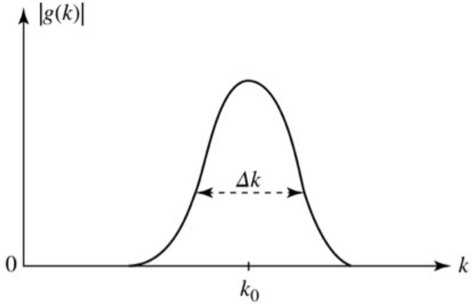
$$g(\vec{k}) = \int \frac{d^3r}{(2\pi)^{3/2}}\, \psi(\vec{r},0)\, e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

EM 1D:

$$\psi(x,0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}}\, g(k)\, e^{ikx}$$

$$g(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}}\, \psi(x,0)\, e^{-ikx}$$

Propriedades de pacotes de ondas



$|g(k)|$ SÓ É APRECIÁVEL NUM INTERVALO: $\left[k_0 - \frac{\Delta k}{2}, k_0 + \frac{\Delta k}{2}\right]$

O QUE SE PODE DIZER SOBRE A EXTENSÃO ESPACIAL DE $\psi(x,0)$?

$$g(k) = |g(k)|\, e^{i\alpha(k)}$$

SE $\alpha(k)$ VARIA POUCO NO INTERVALO $\left[k_0 - \frac{\Delta k}{2}, k_0 + \frac{\Delta k}{2}\right]$

$$\alpha(k) \cong \alpha(k_0) + \alpha'(k_0)(k - k_0)$$

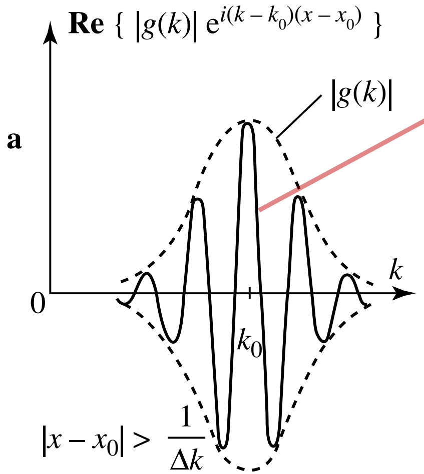
$$\psi(x,0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \underbrace{|g(k)|\, e^{i\alpha(k_0)}\, e^{i\alpha'(k_0)(k-k_0)}}_{g(k)}\, e^{ikx}\, e^{-ik_0x}\, e^{ik_0x}$$

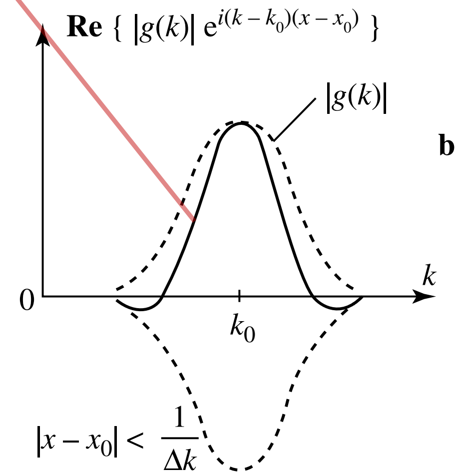
$$= e^{i\alpha(k_0)}\, e^{ik_0x} \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} |g(k)|\, e^{i\alpha'(k_0)(k-k_0)}\, e^{i(k-k_0)x}$$

$$= e^{i\alpha(k_0)} e^{ik_0 x} \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} |g(k)| \, e^{i(k-k_0)(x-x_0)}$$

ONDE: $x_0 = -\alpha'(k_0)$

$$\boxed{I\left(x-x_0\right)=\int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}}\left|g\left(k\right)\right| e^{i\left(k-k_0\right)\left(x-x_0\right)}}$$





$|x-x_0| > \frac{1}{\Delta k}$

$\Rightarrow$ A FUNÇÃO OSCILA MUITO

$\Rightarrow I(x-x_0) \sim 0$

$|x-x_0| < \frac{1}{\Delta k}$

$\Rightarrow$ A FUNÇÃO OSCILA POUCO

$I(x-x_0) \sim 1$ (APRECIÁVEL)

$\cos(kx)$ $\quad x \gg 1$ COMO FUNÇÃO DE k

PERÍODO : $\frac{2\pi}{x} \ll 1$

SE $x \ll 1$:

PERÍODO : $\frac{2\pi}{x} \gg 1$

$$|\psi(x,0)| = |\Phi(x-x_0)| = \begin{cases} \sim 0 & \text{SE } |x-x_0| > \frac{1}{\Delta k} \\ \sim 1 & \text{SE } |x-x_0| < \frac{1}{\Delta k} \end{cases}$$

EXTENSÃO ESPACIAL DE

$$|\psi(x,0)| \sim \frac{1}{\Delta k}$$

$$\Delta x \sim \frac{1}{\Delta k} \Rightarrow \Delta x \, \Delta k \sim 1$$

O princípio de incerteza de Heisenberg

DE MANEIRA MAIS GERAL: $\Delta x \, \Delta k \gtrsim 1$

$$k = \frac{p}{\hbar} \Longrightarrow \Delta k = \frac{1}{\hbar} \Delta p$$

$$\Rightarrow \Delta x \, \Delta k = \frac{\Delta x \, \Delta p}{\hbar} \gtrsim 1$$

$$\Rightarrow \boxed{\Delta x \, \Delta p \gtrsim \hbar}$$

PRINCÍPIO DE INCERTEZA DE HEISENBERG

A transf. de Fourier da função de onda

$$\psi(x,0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}}\, g(k)\, e^{ikx} \qquad k \to \frac{p}{\hbar}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, \underbrace{\frac{g(p/\hbar)}{\sqrt{\hbar}}}_{\bar{\Psi}(p,0)}\, e^{ipx/\hbar}$$

$$\Rightarrow \psi(x,0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, \bar{\Psi}(p,0)\, e^{ipx/\hbar}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,0)|^2\, dx = 1 = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\, |\bar{\Psi}(p,0)|^2$$

(TEOREMA DE PARSEVAL)

SUGERE:

$$d\bar{P}(p,t) = |\bar{\Psi}(p,t)|^2 dp$$

PROBABILIDADE DA PARTÍCULA TER MOMENTO LINEAR ENTRE p E $p+dp$ NO INSTANTE $\underline{t}$

Evolução temporal do pacote

Voltando à evolução temporal da partícula livre:

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} g(k)\, e^{ikx - i\hbar k^2 t/(2m)}$$

PARA O CASO PARTICULAR DE $g(k)$:

$$g(k) = \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} e^{-a^2(k-k_0)^2/4}$$

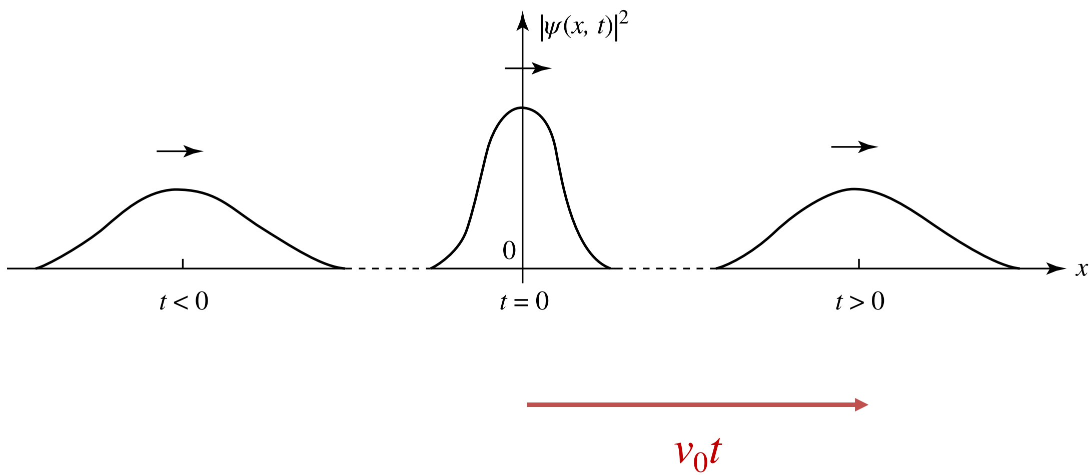
$$\Delta k \sim \frac{1}{a}$$

A INTEGRAL PODE SER CALCULADA (VEJA NA PÁG. DO CURSO):

$$\psi(x,t) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} \frac{e^{i\theta(x,t)}}{[\gamma(t)]^{1/4}} \exp\left[-\frac{(x - v_0 t)^2}{a^2 \gamma(t)}\right]$$

$$v_0 = \frac{\hbar k_0}{m} \qquad \gamma(t) = 1 + 4\hbar^2 t^2 / m^2 a^4$$

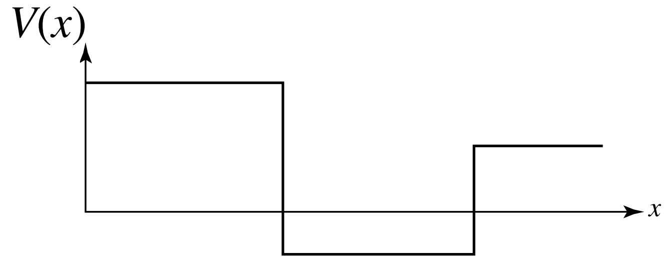
$$P(x) = |\psi(x,0)|^2 = \frac{\sqrt{2/\pi}}{a\sqrt{1+\frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}}} \exp\left[-\frac{2(x-v_0 t)^2}{a^2\left(1+\frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}\right)}\right]$$



Potenciais unidimensionais

Condições matemáticas satisfeitas pela função de onda:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_E(x)}{\partial x^2}+V(x)\,\psi_E(x)=E\psi_E(x)$$



1) A FUNÇÃO $\psi_E(x)$ É SEMPRE FINITA.

2) " " " É SEMPRE CONTÍNUA, MESMO EM PONTOS ONDE V(x) É DESCONTÍNUA

3) A DERIVADA PRIMEIRA $\frac{d\psi_E}{dx}$ É:

- CONTÍNUA SE O POTENCIAL É FINITO
- DESCONTÍNUA EM PONTOS ONDE V(x) É INFINITO

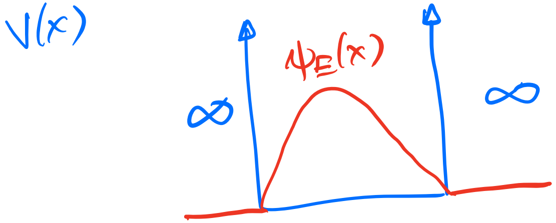
Potenciais unidimensionais

Problemas resolvidos (F 589 - Estrutura da Matéria):

a) Potencial degrau (complemento H_I-2a)

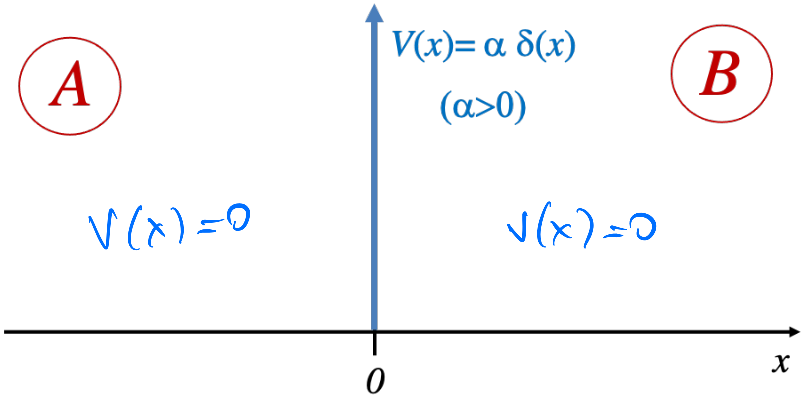
b) Barreira de potencial (complemento H_I-2b)

c) Poço quadrado (complemento H_I-2c)



POTENCIAL INFINITO

Exemplo: tunelamento pela função delta de Dirac



EM A OU B:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi(x) \quad (E>0)$$

$$\Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{k^2}\psi(x)$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\psi_A(x) = A'\cos kx + B'\sin kx = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (x<0)$$

$$\psi_B(x) = Ce^{ikx} + \cancel{De^{-ikx}} \quad (x>0)$$

$D=0$

$\Rightarrow$ CASAR AS DUAS FUNÇÕES EM $x=0$