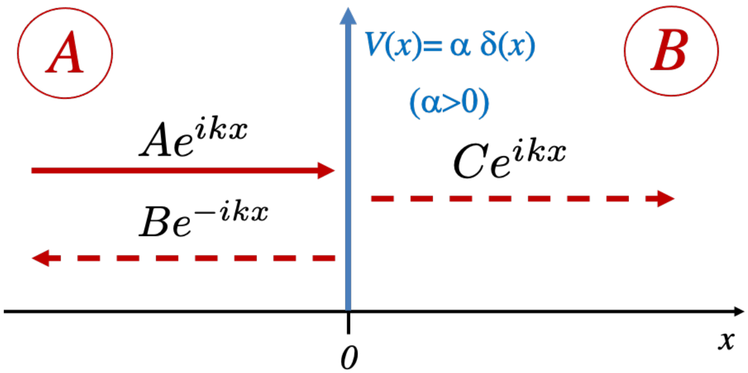
F 689 – Mecânica Quântica I

2º Semestre de 2022
29/08/2022
Aula 4

Exemplo: tunelamento pela função delta de Dirac



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+\alpha\delta(x)\psi(x)=E\psi(x) \quad (E>0)$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}=E\psi(x) \quad (x<0 \text{ e } x>0)$$

$$\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}=-\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x)=-k^2\psi(x)\,,\quad k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\Rightarrow \psi(x)=C_1e^{ikx}+C_2e^{-ikx}$$

$$\psi(x)=\begin{cases} Ae^{ikx}+Be^{-ikx} & x<0 \\ Ce^{ikx} & x>0\end{cases}$$

$$\psi'(x)=\begin{cases} ik\left[Ae^{ikx}-Be^{-ikx}\right] & (x<0) \\ ikCe^{ikx} & (x>0)\end{cases}$$

CASAR AS SOLUÇÕES EM $x=0$:

(1) $\psi(x=0^-)=\psi(x=0^+)$ (CONTINUIDADE DE $\psi(x)$)

$\Rightarrow \boxed{A+B=C}$

(2) INTEGRANDO A E.S. DE $\underline{-\epsilon}$ A $+\epsilon$ $(\epsilon \to 0^+)$

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\frac{d^2\psi}{dx^2}\,dx}_{\psi'(+\epsilon)-\psi'(-\epsilon)} + \alpha\underbrace{\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\delta(x)\psi(x)\,dx}_{\psi(0)} = \underbrace{E\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\psi(x)\,dx}_{\cong E\psi(0)(2\epsilon)\xrightarrow[\epsilon\to 0^+]{}0}$$

$$\psi'(+\epsilon)-\psi'(-\epsilon) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(0)$$

$$\underbrace{\Delta\psi'(x)\Big|_{x=0}} = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(0)$$

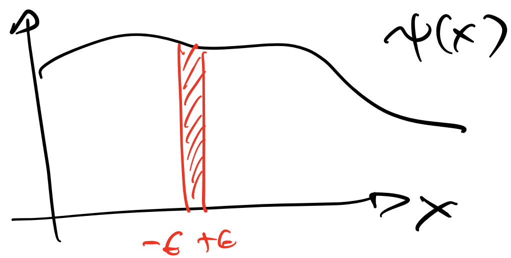
$$ikC - ik(A-B) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}C \Rightarrow C-(A-B) = \frac{2m\alpha}{ik\hbar^2}C$$

$$\Rightarrow \boxed{A-B = \left(1-\frac{2m\alpha i}{k\hbar^2}\right)C}$$

$$\frac{B}{A} = \left(\frac{-i\theta}{1+i\theta}\right) \qquad \frac{C}{A} = \frac{1}{1+i\theta}$$

$$\theta = \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} = \frac{m\alpha}{\hbar\sqrt{2mE}}$$

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \frac{\theta^2}{1+\theta^2} \qquad T = \left|\frac{C}{A}\right|^2 = \frac{1}{1+\theta^2} \qquad R + T = 1$$

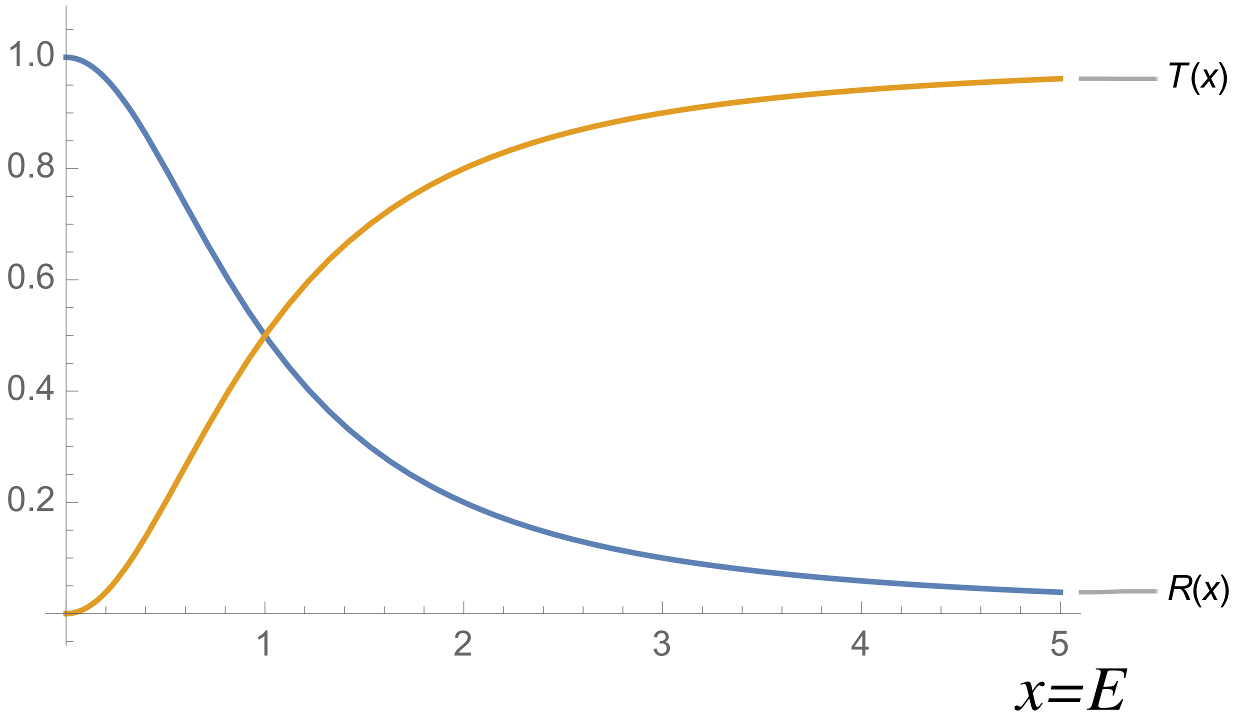


$\epsilon \to 0^+$

ÁREA $\simeq \psi(0)\,[2\epsilon]$

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \psi(x)\,dx \simeq \psi(0)\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} dx = 2\epsilon\,\psi(0)$$

R e T como funções de E



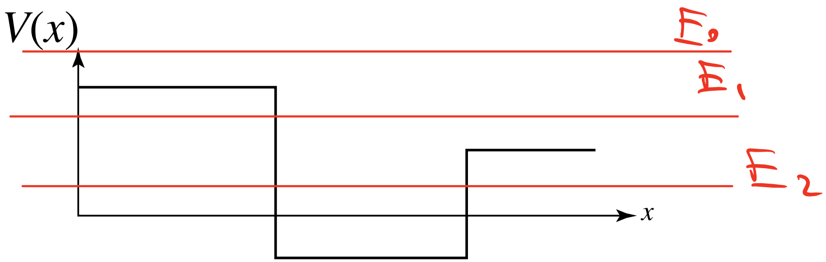
NOTEM QUE AS SOLUÇÕES EXISTEM PARA

QUALQUER $E > 0$ (ESPECTRO CONTÍNUO)

E $\psi(x)$ NÃO É QUADRADO INTEGRÁVEL

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx \longrightarrow \infty$$

Considerações gerais sobre as soluções estacionárias



SOLUÇÕES DA E.S.I.T.

a) PARA $E = E_0$ OU $E = E_1$, ONDE $E_{0,1} > V(x)$

QUANDO $x \to +\infty$ E/OU $x \to -\infty$

ESPECTRO CONTÍNUO E FUNÇÕES NÃO QUADRADO INTEGRÁVEIS

b) $E_2 \to E_2 - V(x) < 0$ PARA $x \to \infty$ E $x \to -\infty$

ESPECTRO DISCRETO E FUNÇÕES DE QUADRADO INTEGRÁVEL.

Ferramentas matemáticas da mecânica quântica

O espaço de funções $\mathcal{F}$

Os estados físicos de partículas quânticas são descritos por funções de onda complexas de quadrado integrável:

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

$\psi(\vec{r},t) \in \mathbb{C}$

FUNÇÕES $L^2(\mathbb{R}^3,\mathbb{C})$

Outras propriedades motivadas pela física:

a) $\psi(\vec{r},t)$ CONTÍNUAS

b) INFINITAMENTE DIFERENCIÁVEIS

NOSSO ESPAÇO DE FUNÇÕES POSSÍVEIS FISICAMENTE, $\mathcal{F}$, É UM SUB-CONJUNTO DE $L^2(\mathbb{R}^3,\mathbb{C})$

c) $\psi(\vec{r},t)$ É FINITO

$\mathcal{F}$ é um espaço vetorial

DIMENSÃO INFINITA (INTRODUZ COMPLICAÇÕES)

SE $\psi_1(\vec{x}) \in \mathcal{F}$ E $\psi_2(\vec{x}) \in \mathcal{F}$ ENTÃO:

$\psi(\vec{x}) = \lambda_1 \psi_1(\vec{x}) + \lambda_2 \psi_2(\vec{x})$ TAMBÉM $\in \mathcal{F}$

$\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$

PROVA NAS NOTAS.

O produto escalar em $\mathcal{F}$

DADAS DUAS FUNÇÕES EM $\mathcal{F}$ $\phi(\vec{r}), \psi(\vec{r})$ DEFINIMOS SEU PRODUTO ESCALAR:

$$(\phi, \psi) = \int \phi^*(\vec{r})\,\psi(\vec{r})\,d^2 r \in \mathbb{C}$$

i) $(\phi, \psi) = [(\psi, \phi)]^*$

ii) $(\phi, \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1(\phi, \psi_1) + \lambda_2(\phi, \psi_2)$ (LINEAR NO 2º ARGUMENTO)

iii) $(\lambda_1\phi_1 + \lambda_2\phi_2, \psi) = \lambda_1^*(\phi_1, \psi) + \lambda_2^*(\phi_2, \psi)$ (ANTI-LINEAR NO 1º ARGUMENTO)

iv) SE $(\phi, \psi) = 0$, $\phi(\vec{r})$ E $\psi(\vec{r})$ SÃO DITAS ORTOGONAIS

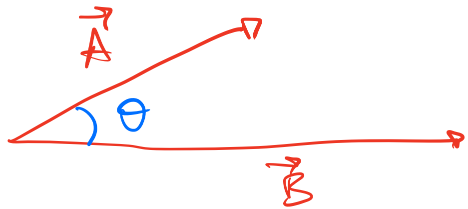
v) $(\psi, \psi) = \int d^3 r\,|\psi(\vec{r})|^2 \rightarrow$ REAL, NÃO NEGATIVO

vi) $(\psi,\psi) = 0 \iff \psi(\vec{x}) = 0$

$\sqrt{(\psi,\psi)} \rightarrow$ NORMA DA FUNÇÃO $\psi(\vec{x})$

vii) DESIGUALDADE DE SCHWARZ

$$|(\psi_1,\psi_2)| \leq \sqrt{(\psi_1,\psi_1)}\sqrt{(\psi_2,\psi_2)}$$



$$|\vec{A}\cdot\vec{B}| = |\vec{A}|\,|\vec{B}|\,|\cos\theta|$$

$$\leq |\vec{A}|\,|\vec{B}|$$

PROVA NAS NOTAS

Operadores lineares em $\mathcal{F}$

SÃO FUNÇÕES QUE LEVAM VETORES (FUNÇÕES EM $\mathcal{F}$) A VETORES (FUNÇÕES EM $\mathcal{F}$)

$$\phi(\vec{r}) = A\,\psi(\vec{r})$$

E É LINEAR:

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

EXEMPLOS:

a) PARIDADE Π : $\Pi\psi(x,y,z) = \psi(-x,-y,-z)$

b) MULTIPLICAÇÃO POR x (OU y, OU z):

$$X\psi(x,y,z) = x\,\psi(x,y,z)$$

c) DERIVADA EM x : $D_x = \frac{\partial}{\partial x}$ (OU EM y, OU EM z)

$$D_x \psi(x,y,z) = \frac{\partial \psi(x,y,z)}{\partial x}$$

Produto de operadores e comutadores

DADOS DOIS OPERADORES A E B DEFINIMOS O PRODUTO $AB = C$ COMO SENDO:

$$C\psi(\vec{r}) = A\left[B\psi(\vec{r})\right]$$

A ORDEM DO PRODUTO É MUITO IMPORTANTE POIS, DE MANEIRA GERAL,

$$AB \neq BA$$

PARA QUANTIFICAR ESSE FATO, DEFINE-SE O COMUTADOR DE A E B:

$$[A,B] = AB - BA$$

EXEMPLO: X E D_x

$$X D_x = x\left[\frac{\partial\psi}{\partial x}\right] = x\,\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

$$D_x X = D_x\left[x\psi\right] = \frac{\partial}{\partial x}\left[x\psi\right] = \psi + x\,\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

$$\Rightarrow [X, D_x]\psi = X D_x\psi - D_x X\psi = -\psi$$

$$\Rightarrow [X, D_x] = -1$$

VIMOS QUE ASSOCIAMOS AO MOMENTO LINEAR $\vec{p} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} \Rightarrow P_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\hbar}{i} D_x$

$$\Rightarrow [X, P_x] = \frac{\hbar}{i}\left(X D_x - D_x X\right) = \frac{\hbar}{i}[X, D_x] = -\frac{\hbar}{i} = i\hbar$$

$[X, P_x] = i\hbar \qquad [Y, P_y] = i\hbar \qquad [Z, P_z] = i\hbar$

É FÁCIL PROVAR:

$$[X, Y] = [X, Z] = [Y, Z] = 0$$

$$[P_x, P_y] = [P_x, P_z] = [P_y, P_z] = 0$$

$$[X, P_y] = [X, P_z] = 0$$

$$[Y, P_x] = [Y, P_z] = 0$$

$$[Z, P_x] = [Z, P_y] = 0$$

ALGUMAS PROPRIEDADES DE COMUTADORES

a) $[aA, bB] = ab[A,B]$ ONDE $a, b \in \mathbb{C}$

b) $[A,B] = -[B,A]$

c) $[A+B, C+D] = [A,C] + [A,D] + [B,C] + [B,D]$

d) $[AB,C] = A[B,C] + [A,C]B$

PROVA: $[AB,C] = ABC - CAB$

$$A[B,C] + [A,C]B = A(BC - CB) + (AC - CA)B$$

$$= ABC - \cancel{ACB} + \cancel{ACB} - CAB$$

e) $[A,BC] = [A,B]C + B[A,C]$

PROVE ESSA

EXERCÍCIO: ENCONTRE OS SEGUINTES COMUTADORES

a) $[x^2, P_x]$

b) $[x, P_x^2]$

DEFINO, $L_x = Y P_z - Z P_y$

$L_y = Z P_x - X P_z$

$L_z = X P_y - Y P_x$

$\vec{L} = \vec{R} \times \vec{P}$

c) $[x, L_y]$

d) $[L_x, L_y]$