F 689 – Mecânica Quântica I

2º Semestre de 2022
31/08/2022
Aula 5

Aula passada

$\mathcal{F}$: espaço vetorial de funções "regulares" de quadrado integrável:

$$\psi(\mathbf{r},t) \in \mathbb{C}, \quad \underbrace{\int}_{\text{TODO ESPAÇO}} d^3r \left|\psi(\mathbf{r},t)\right|^2 = 1$$

Produto escalar em $\mathcal{F}$: $$(\varphi,\psi) = \underbrace{\int}_{\text{T.E}} d^3r \varphi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \in \mathbb{C}$$

Operadores lineares em $\mathcal{F}$:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &\to \psi'(\mathbf{r}) = A\psi(\mathbf{r}), \\ A\left[\lambda_1\psi_1(\mathbf{r}) + \lambda_2\psi_2(\mathbf{r})\right] &= \lambda_1 A\psi_1(\mathbf{r}) + \lambda_2 A\psi_2(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

Produtos de operadores: $$AB\psi(\mathbf{r}) = A\left[B\psi(\mathbf{r})\right]$$

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

Aula passada

Operadores posição X, Y, Z:

$$\begin{aligned} X\psi(\mathbf{r}) &= x\psi(\mathbf{r}) \\ Y\psi(\mathbf{r}) &= y\psi(\mathbf{r}) \\ Z\psi(\mathbf{r}) &= z\psi(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

Operadores momento linear P_x, P_y, P_z:

$$\begin{aligned} P_x\psi(\mathbf{r}) &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial x} \\ P_y\psi(\mathbf{r}) &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial y} \\ P_z\psi(\mathbf{r}) &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial z} \end{aligned}$$

Comutadores canônicos: $[X, P_x] = [Y, P_y] = [Z, P_z] = i\hbar$

$$\begin{aligned} [X, Y] &= [X, Z] = [Y, Z] = 0 \\ [P_x, P_y] &= [P_x, P_z] = [P_y, P_z] = 0 \\ [X, P_y] &= [X, P_z] = \ldots = 0 \end{aligned}$$

Expansão de vetores em componentes

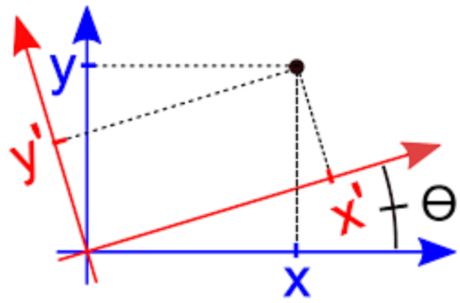
Para vetores em 3D, é útil definir suas componentes num sistema cartesiano:

$$\mathbf{A} = A_x \hat{\mathbf{x}} + A_y \hat{\mathbf{y}} + A_z \hat{\mathbf{z}}$$

As componentes cartesianas formam uma representação útil do vetor:

$$\boxed{\mathbf{A} \to (A_x, A_y, A_z)}$$

Se usarmos um outro sistema de eixos, as componentes mudam, mas o vetor é o mesmo:



$$\mathbf{A} = A'_x \hat{\mathbf{x}}' + A'_y \hat{\mathbf{y}}' + A'_z \hat{\mathbf{z}}'$$

$$\boxed{\mathbf{A} \to (A'_x, A'_y, A'_z)}$$

Os dois conjuntos diferentes de componentes são chamados de duas representações diferentes do mesmo objeto.

Bases discretas em $\mathcal{F}$

Uma base ortonormal discreta em $\mathcal{F}$ é um conjunto enumerável de funções em $\mathcal{F}$ tais que:

$$\{u_i(\mathbf{r})\} \quad i = 1, 2, 3 \ldots$$

$$(u_i, u_j) = \int d^3 r u_i^*(\mathbf{r})\, u_j(\mathbf{r}) = \delta_{i,j} \quad \begin{cases} i = j : & 1 \\ i \neq j : & 0 \end{cases}$$

e existem c_i tais que, para toda $\psi(\mathbf{r})$ em $\mathcal{F}$: $\psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i u_i(\mathbf{r})\,, \quad c_i \in \mathbb{C}$

Toda função de $\mathcal{F}$ pode ser expandida na base.

$$(u_i, \psi) = \int u_i^*(\vec{r})\, \psi(\vec{r})\, d^3 r = \int u_i^*(\vec{r}) \sum_j c_j u_j(\vec{r})\, d^3 r$$

$$= \sum_j c_j \underbrace{\int u_i^*(\vec{r})\, u_j(\vec{r})\, d^3 r}_{\delta_{ij}} = \sum_j c_j \delta_{ij} = c_i$$

$$\boxed{c_i = (u_i, \psi)}$$

A EXPANSÃO É ÚNICA.

OS COEFICIENTES c_i REPRESENTAM $\psi(\vec{r})$

$$\sum_{j=1}^{\infty} c_j \delta_{1j} = c_1 \times 1 = c_1$$

$j = 1 \rightarrow 1$

$j = 2, 3, 4, \ldots \rightarrow 0$

$$\sum_{j} \delta_{ij} A_{kjlm} = A_{kilm}$$

O produto escalar na base

SEJAM 2 FUNÇÕES $\varphi(\vec{r})$ E $\psi(\vec{r}) \in \mathcal{F}$

$$\varphi(\vec{r}) = \sum_i b_i u_i(\vec{r}) \qquad b_i = (u_i, \varphi)$$

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r}) \qquad c_i = (u_i, \psi)$$

$$(\varphi, \psi) = \int \varphi^*(\vec{r})\psi(\vec{r})\, d^3r = \int \left[\sum_i b_i^* u_i^*(\vec{r})\right]\left[\sum_j c_j u_j(\vec{r})\right] d^3r$$

$$= \sum_i \sum_j b_i^* c_j \underbrace{\int u_i^*(\vec{r})\, u_j(\vec{r})\, d^3r}_{\delta_{ij}} = \sum_i \sum_j b_i^* c_j \delta_{ij}$$

$$= \sum_i b_i^* c_i$$

COMPARE COM: $\vec{A} \cdot \vec{B} = A_x B_x + A_y B_y + A_z B_z$

$$(\psi, \psi) = \sum_i c_i^* c_i = \sum_i |c_i|^2$$

Relação de fechamento

$\psi(\vec{r}) \in \mathcal{F} \;:\; \psi(\vec{r}) = \sum_i c_i\, u_i(\vec{r}) \qquad c_i = (u_i, \psi)$

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i (u_i, \psi)\, u_i(\vec{r}) = \sum_i \left[\int d^3r'\; u_i^*(\vec{r}\,')\, \psi(\vec{r}\,') \right] u_i(\vec{r})$$

$$= \int d^3r' \underbrace{\left[\sum_i u_i^*(\vec{r}\,')\, u_i(\vec{r}) \right]}_{\theta(\vec{r}\,', \vec{r})} \psi(\vec{r}\,') = \int d^3r'\, \underbrace{\theta(\vec{r}\,', \vec{r})}_{\delta(\vec{r} - \vec{r}\,')}\, \psi(\vec{r}\,')$$

$$\psi(x) = \int dx'\, \theta(x', x)\, \psi(x') = \int dx'\, \delta(x' - x)\, \psi(x')$$

$$\delta(\vec{r}) = \delta(x)\,\delta(y)\,\delta(z)$$

$$\Rightarrow \delta(\vec{r} - \vec{r}\,') = \sum_i u_i^*(\vec{r}\,')\, u_i(\vec{r})$$

RELAÇÃO DE FECHAMENTO

EXPRESSÃO MATEMÁTICA DO FATO DE QUE A BASE $\{u_i(\vec{r})\}$ EXPANDE QUALQUER FUNÇÃO DE $\mathcal{F}$

Bases contínuas em $\mathcal{F}$

a) Ondas planas:

É TAMBÉM POSSÍVEL EXPANDIR FUNÇÕES DE $\mathcal{F}$ ATRAVÉS DE UMA BASE DE FUNÇÕES QUE NÃO SÃO $\in \mathcal{F}$.

USANDO UM EXEMPLO EM 1D (A GENERALIZAÇÃO PARA 3D É TRANQUILA):

$$v_p(x) = \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad \text{ONDE} \quad p \in (-\infty, +\infty)$$

DO TEOREMA DA TRANSFORMADA DE FOURIER:

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

COMPARE COM: $\psi(x) = \sum_i c_i u_i(x)$

$\bar{\psi}(p)$ SÃO OS COEFICIENTES DA EXPANSÃO EM $v_p(x)$

$$\Phi(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \frac{e^{-ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \vartheta_p^*(x)\psi(x) = (\vartheta_p, \psi)$$

COMPARE COM $c_i = (u_i, \psi)$

MAS, $\vartheta_p(x)$ NÃO É DE QUADRADO INTEGRÁVEL:

$$(\vartheta_p, \vartheta_p) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \vartheta_p^*(x)\vartheta_p(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \frac{e^{-ipx/\hbar}\, e^{ipx/\hbar}}{2\pi\hbar}$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dx \longrightarrow \infty \;!$$

$$\Rightarrow \vartheta_p(x) \notin \mathcal{F}$$

DA RELAÇÃO DE PARSEVAL:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\psi(x)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, |\overline{\psi}(p)|^2$$

COMPARE COM: $(\psi,\psi) = \sum_i |c_i|^2$

PODE-SE MOSTRAR TAMBÉM QUE:

$$\varphi(x) = \int dp\, \overline{\varphi}(p)\, v_p(x)$$

$$\psi(x) = \int dp\, \overline{\psi}(p)\, v_p(x)$$

$$\Rightarrow (\varphi,\psi) = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \overline{\varphi}^*(p)\, \overline{\psi}(p)$$

ANÁLOGO A $(\varphi,\psi) = \sum_i b_i^* c_i$

ORTONORMALIDADE:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi_{p'}^{*}(x)\, \psi_p(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \frac{e^{-ip'x/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} =$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, e^{ix(p-p')/\hbar}$$

$$y = \frac{x}{\hbar} \qquad \frac{dx}{\hbar} = dy$$

$$= \frac{1}{2\pi} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dy\, e^{iy(p-p')}}_{2\pi\,\delta(p-p')} = \delta(p-p')$$

PROVA NOS APÊNDICES DO LIVRO (VOL. 2)

$$\therefore \ (\psi_{p'}, \psi_p) = \delta(p-p')$$

COMPARE COM $(u_i, u_j) = \delta_{ij}$

FECHAMENTO:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp\, \varphi_p^*(x')\, \varphi_p(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar}\, e^{-ipx'/\hbar}\, e^{ipx/\hbar}$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp\, e^{ip(x-x')/\hbar} \qquad q = \frac{p}{\hbar} \quad dq = \frac{dp}{\hbar}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dq\, e^{iq(x-x')} = \delta(x-x')$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp\, \varphi_p^*(x')\, \varphi_p(x) = \delta(x-x')$$

NOTE: $P_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$

$$P_x \varphi_p(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right] = p\, \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} = p\,\varphi_p(x)$$

A GENERALIZAÇÃO PARA 3D É IMEDIATA:

$$\vartheta_{\vec{p}}(\vec{x}) = \frac{e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$

$$\int dp \longrightarrow \int d^3p = \int_{-\infty}^{+\infty} dp_x \int_{-\infty}^{+\infty} dp_y \int_{-\infty}^{+\infty} dp_z$$

Bases contínuas em $\mathcal{F}$

b) Funções delta: EM 1D : $\xi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0) \quad x_0 \in (-\infty, +\infty)$

NÃO É DE QUADRADO INTEGRÁVEL

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \xi^*_{x_0}(x)\, \xi_{x_0}(x)\, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_0)\, \delta(x - x_0)\, dx = \delta(0) \longrightarrow \infty\ !$$

MAS : $\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0\, \delta(x - x_0)\, \psi(x_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0\, \psi(x_0)\, \xi_{x_0}(x)$

ONDE : $\psi(x_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \delta(x - x_0)\, \psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \xi^*_{x_0}(x)\, \psi(x) = (\xi_{x_0}, \psi)$

$\psi(x_0)$ SÃO OS COEFICIENTES DA EXPANSÃO DE $\psi(x)$ NA BASE $\xi_{x_0}(x)$

PRODUTO ESCALAR: $(\varphi, \psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0\, \varphi^*(x_0)\psi(x_0)$

COMPARE COM $(\varphi, \psi) = \sum_i b_i^* c_i = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \overline{\varphi}^*(p)\overline{\psi}(p)$

ORTONORMALIDADE:

$$(\xi_{x_0}, \xi_{x_0'}) = \delta(x_0 - x_0')$$

FECHAMENTO: $\int_{-\infty}^{+\infty} dx_0\, \xi_{x_0}^*(x')\,\xi_{x_0}(x) = \delta(x - x')$

ATUAÇÃO DO OPERADOR X SOBRE $\xi_{x_0}(x)$

$$X\,\xi_{x_0}(x) = x\,\xi_{x_0}(x) = x\,\delta(x - x_0) = x_0\,\delta(x - x_0) = x_0\,\xi_{x_0}(x)$$

GENERALIZAÇÃO PARA 3D:

$$\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) = \delta(x - x_0)\,\delta(y - x_0)\,\delta(z - z_0)$$

Bases contínuas em $\mathcal{F}$

c) Bases contínuas gerais: $W_\alpha(\vec{r})$ $\alpha \in$ INTERVALO CONTÍNUO I

$$\psi(\vec{r}) = \int_{\alpha \in I} d\alpha \; c(\alpha)\, W_\alpha(\vec{r})$$

$$c(\alpha) = (W_\alpha, \psi)$$

ORTONORMALIDADE: $(W_\alpha, W_{\alpha'}) = \delta(\alpha - \alpha')$

FECHAMENTO: $\int d\alpha \; W_\alpha(\vec{r})\, W_\alpha^*(\vec{r}\,') = \delta(\vec{r} - \vec{r}\,')$

PRODUTO ESCALAR: $\varphi(\vec{r}) = \int d\alpha \; b(\alpha)\, W_\alpha(\vec{r})$

$\psi(\vec{r}) = \int d\alpha \; c(\alpha)\, W_\alpha(\vec{r})$

$$\Rightarrow (\varphi, \psi) = \int d\alpha \; b^*(\alpha)\, c(\alpha) \;;\; (\psi, \psi) = \int d\alpha \; |c(\alpha)|^2$$

Resumo

	Discrete basis $\{\, u_i(\mathbf{r}) \,\}$	Continuous basis $\{\, w_\alpha(\mathbf{r}) \,\}$
Ortho-normalization relation	$(u_i, u_j) = \delta_{ij}$	$(w_\alpha, w_{\alpha'}) = \delta(\alpha - \alpha')$
Closure relation	$\sum_i u_i(\mathbf{r})\, u_i^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$	$\int \mathrm{d}\alpha \;\, w_\alpha(\mathbf{r})\, w_\alpha^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$
Expansion of a wave function $\psi(\mathbf{r})$	$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i\, u_i(\mathbf{r})$	$\psi(\mathbf{r}) = \int \mathrm{d}\alpha \;\, c(\alpha) \;\, w_\alpha(\mathbf{r})$
Expression for the components of $\psi(\mathbf{r})$	$c_i = (u_i, \psi) = \int \mathrm{d}^3 r\, u_i^*(\mathbf{r})\, \psi(\mathbf{r})$	$c(\alpha) = (w_\alpha, \psi) = \int \mathrm{d}^3 r\, w_\alpha^*(\mathbf{r})\, \psi(\mathbf{r})$
Scalar product	$(\varphi, \psi) = \sum_i b_i^* c_i$	$(\varphi, \psi) = \int \mathrm{d}\alpha \;\, b^*(\alpha) \;\, c(\alpha)$
Square of the norm	$(\psi, \psi) = \sum_i \lvert c_i \rvert^2$	$(\psi, \psi) = \int \mathrm{d}\alpha\, \lvert c(\alpha) \rvert^2$

d) Bases mistas: $\{u_i(\vec{r}), w_\alpha(\vec{r})\}$

ORTOGONALIDADE:

$$(u_i, u_j) = \delta_{ij}$$

$$(w_\alpha, w_{\alpha'}) = \delta(\alpha - \alpha')$$

$$(u_i, w_\alpha) = 0$$

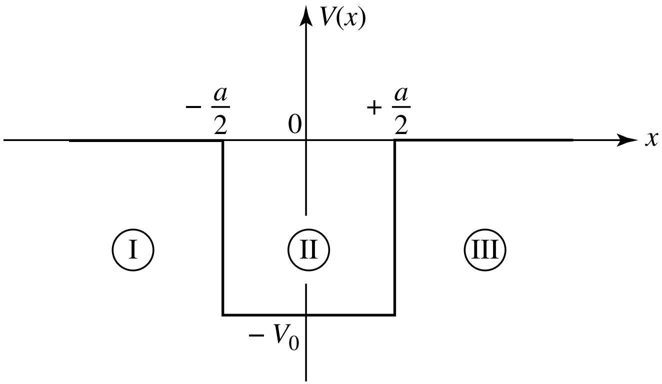
FECHAMENTO:

$$\sum_i u_i^*(\vec{r}')\, u_i(\vec{r}) + \int d\alpha\, w_\alpha^*(\vec{r}')\, w_\alpha(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i\, u_i(\vec{r}) + \int d\alpha\, c(\alpha)\, w_\alpha(\vec{r})$$

$$c_i = (u_i, \psi) \qquad c(\alpha) = (w_\alpha, \psi)$$

Exemplo: soluções da Eq. de Schr. independente do tempo



$E>0$: estados do contínuo

Incidência pela esquerda:

$$\varphi_I^{(E)}(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x}$$
$$\varphi_{II}^{(E)}(x) = A_2 e^{ik_2 x} + A_2' e^{-ik_2 x}$$
$$\varphi_{III}^{(E)}(x) = A_3 e^{ik_1 x}$$

Incidência pela direita:

$$\varphi_I^{(D)}(x) = B_1 e^{-ik_1 x}$$
$$\varphi_{II}^{(D)}(x) = B_2 e^{ik_2 x} + B_2' e^{-ik_2 x}$$
$$\varphi_{III}^{(D)}(x) = B_3 e^{-ik_1 x} + B_3' e^{ik_1 x}$$

$E_i<0$: estados ligados, discretos

$$\varphi_I^{(L)}(x) \;=\; C_1 e^{\rho x}$$
$$\varphi_{II}^{(L)}(x) \;=\; C_2 e^{ik_2 x} + C_2' e^{-ik_2 x}$$
$$\varphi_{III}^{(L)}(x) \;=\; C_3 e^{-\rho x}$$

O conjunto de todas as soluções acima forma uma base mista em 1D.