F 689 – Mecânica Quântica I

2º Semestre de 2022
05/09/2022
Aula 6

Aula passada

Bases discretas em $\mathcal{F}$: $\{u_i(\mathbf{r}) \in \mathcal{F}\} \;\; i = 1, 2, 3 \ldots$

Ortonormalidade: $(u_i, u_j) = \int d^3r u_i^*(\mathbf{r})\, u_j(\mathbf{r}) = \delta_{i,j}$

Qualquer função em $\mathcal{F}$ pode ser expandida na base:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \sum_i c_i u_i(\mathbf{r}) \\ \varphi(\mathbf{r}) &= \sum_i b_i u_i(\mathbf{r}) \end{aligned} \qquad\qquad \begin{aligned} c_i &= (u_i, \psi) \\ b_i &= (u_i, \varphi) \end{aligned}$$

Produto escalar na base:

$$\begin{aligned} (\varphi, \psi) &= \sum_i b_i^* c_i \\ (\psi, \psi) &= \sum_i |c_i|^2 \end{aligned}$$

Propriedade de fechamento: $\sum_i u_i^*(\mathbf{r}')\, u_i(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$

Aula passada

Bases contínuas em $\mathcal{F}$: $\{w_\alpha(\mathbf{r}) \notin \mathcal{F}\}$ $\alpha \in \mathbb{R},\ \alpha \in [a,b]$

Ortonormalidade: $(w_\alpha, w_{\alpha'}) = \int d^3r w_\alpha^*(\mathbf{r}) w_{\alpha'}(\mathbf{r}) = \delta(\alpha - \alpha')$

Qualquer função em $\mathcal{F}$ pode ser expandida na base:

$$\psi(\mathbf{r}) = \int c(\alpha) w_\alpha(\mathbf{r}) d\alpha$$

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int b(\alpha) w_\alpha(\mathbf{r}) d\alpha$$

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

$$b(\alpha) = (w_\alpha, \varphi)$$

Produto escalar na base:

$$(\varphi, \psi) = \int b^*(\alpha) c(\alpha) d\alpha$$

$$(\psi, \psi) = \int |c(\alpha)|^2 d\alpha$$

Propriedade de fechamento: $\int d\alpha w_\alpha^*(\mathbf{r}') w_\alpha(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$

Aula passada

Exemplos importantes de bases contínuas:

$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$

Ondas planas: $$v_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$

Funções delta de Dirac: $$\xi_{\mathbf{r}_0} = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)$$

Bases mistas: parte discreta e parte contínua

$$\{u_i(\mathbf{r}) \in \mathcal{F}, w_\alpha(\mathbf{r}) \notin \mathcal{F}\} \;\; i = 1,2,3\ldots, \;\; \alpha \in \mathbb{R}, \;\; \alpha \in [a,b]$$

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

Ortonormalidade:

$$\begin{aligned} (u_i, u_j) &= \delta_{ij} \\ (w_\alpha, w_{\alpha'}) &= \delta(\alpha-\alpha') \\ (u_i, w_\alpha) &= 0 \end{aligned}$$

Fechamento:

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

O espaço de estados $\mathcal{E}$ e a notação de Dirac (kets)

Base	Expansão	Componentes
$u_i(\mathbf{r})$	$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i u_i(\mathbf{r})$	$c_i = (u_i, \psi)$
$v_\mathbf{p}(\mathbf{r})$	$\psi(\mathbf{r}) = \int d^3p \overline{\psi}(\mathbf{p})\, v_\mathbf{p}(\mathbf{r})$	$\overline{\psi}(\mathbf{p}) = (v_\mathbf{p}, \psi)$
$\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})$	$\psi(\mathbf{r}) = \int d^3r_0 \psi(\mathbf{r}_0)\, \xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})$	$\psi(\mathbf{r}_0) = (\xi_{\mathbf{r}_0}, \psi)$
$w_\alpha(\mathbf{r})$	$\psi(\mathbf{r}) = \int d\alpha c(\alpha)\, w_\alpha(\mathbf{r})$	$c(\alpha) = (w_\alpha, \psi)$
$\hat{\mathbf{e}}_i$	$\mathbf{A} = \sum_i a_i \hat{\mathbf{e}}_i$	$a_i = \hat{\mathbf{e}}_i \cdot \mathbf{A}$

Está claro que o mesmo estado pode ser representado de diversas maneiras, todas equivalentes, como acontece com vetores em $\mathbb{R}^3$. Propomos o conceito abstrato de estado e espaço de estados $\mathcal{E}$, independente de sua representação.

$$\psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{F} \rightarrow |\psi\rangle \in \mathcal{E}$$

$|\psi\rangle$ é um “ket” (notação de Dirac)

O produto escalar

Mesma definição, em qualquer base:

$$\left(|\varphi\rangle, |\psi\rangle\right) = \int d^3 r \varphi^* (\mathbf{r}) \psi (\mathbf{r}) = \sum_i b_i^* c_i = \int b^* (\alpha) c (\alpha) d\alpha$$

$$= \int d^3 p \ \bar{\varphi}^* (\vec{p}) \bar{\psi} (\vec{p}) = \langle \varphi | \psi \rangle$$

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

O espaço dual $\mathcal{E}^*$ e os bras

$\mathcal{E}^*$: espaço (vetorial) de funcionais lineares em $\mathcal{E}$; levam kets a um número complexo, de maneira linear.

$$|\psi\rangle \longrightarrow \chi(|\psi\rangle) \in \mathbb{C}$$

LINEAR: $\chi(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \lambda_1\chi(|\psi_1\rangle) + \lambda_2\chi(|\psi_2\rangle)$

$\chi'(|\psi\rangle) = \lambda_1\chi_1(|\psi\rangle) + \lambda_2\chi_2(|\psi\rangle)$ É FUNCIONAL LINEAR

NOTAÇÃO: VAMOS DENOTAR $\chi(|\psi\rangle)$ COM

$$\chi(|\psi\rangle) = \langle\chi|\psi\rangle$$

$$\chi(\;) \longrightarrow \underbrace{\langle\chi|}_{\text{BRA}} \Longleftrightarrow \chi(|\psi\rangle) = \underbrace{\langle\chi|\psi\rangle}_{\text{BRACKET}}$$

Cada ket define um bra

A CADA KET ($\in \mathcal{E}$) POSSO ASSOCIAR UM BRA ($\in \mathcal{E}^*$)

$$|\varphi\rangle \longrightarrow \langle\varphi|\psi\rangle = (|\varphi\rangle, |\psi\rangle) \in \mathbb{C}$$

$$(|\varphi\rangle, \lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \lambda_1(|\varphi\rangle, |\psi_1\rangle) + \lambda_2(|\varphi\rangle, |\psi_2\rangle)$$

$\Rightarrow$ ENTÃO $(|\varphi\rangle, |\psi\rangle)$ É, DE FATO, UM FUNCIONAL LINEAR.

NOTE QUE ESSA ASSOCIAÇÃO É ANTI-LINEAR NOS $|\varphi\rangle$: SE $\alpha_1|\varphi_1\rangle + \alpha_2|\varphi_2\rangle \Rightarrow (\alpha_1|\varphi_1\rangle + \alpha_2|\varphi_2\rangle, |\psi\rangle)$

$$= \alpha_1^*(|\varphi_1\rangle, |\psi\rangle) + \alpha_2^*(|\varphi_2\rangle, |\psi\rangle)$$

$$\alpha_1|\varphi_1\rangle + \alpha_2|\varphi_2\rangle \longrightarrow \alpha_1^*\langle\varphi_1| + \alpha_2^*\langle\varphi_2|$$

A PARTIR DESSA ASSOCIAÇÃO, PASSAMOS A DENOTAR O PRODUTO ESCALAR DE $|\varphi\rangle$ POR $|\psi\rangle$:

$$(|\varphi\rangle, |\psi\rangle) = \langle\varphi|\psi\rangle$$

PODEMOS "TRADUZIR" AS PROPRIEDADES DO PRODUTO ESCALAR PARA ESSA NOVA NOTAÇÃO:

i) $\langle\varphi|\psi\rangle = [\langle\psi|\varphi\rangle]^*$

ii) $\langle\varphi|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle = \lambda_1\langle\varphi|\psi_1\rangle + \lambda_2\langle\varphi|\psi_2\rangle$

iii) $\langle\alpha_1\varphi_1 + \alpha_2\varphi_2, \psi\rangle = \alpha_1^*\langle\varphi_1|\psi\rangle + \alpha_2^*\langle\varphi_2|\psi\rangle$

iv) $\langle\psi|\psi\rangle \in \mathbb{R} \quad \geq 0$

v) $\langle\psi|\psi\rangle = 0$ SE E SOMENTE SE $|\psi\rangle = 0$

vi) SE $\langle\varphi|\psi\rangle = 0 \Rightarrow$ ELES SÃO DITOS ORTOGONAIS ENTRE SI

Nem todo bra define um ket!

DE FATO:

$$\xi_{\vec{r}_0}(|\psi\rangle) = \int d^3r \, \xi^*_{\vec{r}_0}(\vec{r})\,\psi(\vec{r}) = \int d^3r \, \delta(\vec{r}-\vec{r}_0)\,\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}_0) \in \mathbb{C}$$

MAS $\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})$ NÃO PERTENCE A $\mathcal{F} \Rightarrow |\xi_{\vec{r}_0}\rangle \notin \mathcal{E}$

ANALOGAMENTE PARA AS ONDAS PLANAS $v_{\vec{p}}(\vec{r})$

$$v_{\vec{p}}(|\psi\rangle) = \int d^3r \, v^*_{\vec{p}}(\vec{r})\,\psi(\vec{r}) = \int d^3r \, \frac{e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\,\psi(\vec{r}) = \bar{\psi}(\vec{p})$$

MAS $v_{\vec{p}}(\vec{r})$ NÃO PERTENCE A $\mathcal{F} \Rightarrow |v_{\vec{p}}\rangle \notin \mathcal{E}$

APESAR DESSE PROBLEMA, VAMOS ESTENDER $\mathcal{E}$

PARA INCLUIR ESTADOS DO TIPO: $|\xi_{\vec{r}_0}\rangle$, $|v_{\vec{p}}\rangle$, $|w_\alpha\rangle$ ($|\vec{r}_0\rangle$, $|\vec{p}\rangle$)

QUE PASSAM A SER CHAMADOS DE KETS GENERALIZADOS

MAS ELES NÃO PODEM REPRESENTAR ESTADOS FÍSICOS.

COM ESSA EXTENSÃO, PODEMOS FAZER UMA ASSOCIAÇÃO UM-PRA-UM ENTRE KETS E BRAS

$$|\psi\rangle \rightleftarrows \langle\psi|$$

Operadores lineares

DA DEFINIÇÃO DA ATUAÇÃO DO OPERADOR LINEAR $\underline{A}$ EM FUNÇÕES DE $\mathfrak{F}$: $A\psi(\vec{r}) = \psi'(\vec{r})$

DECORRE SUA ATUAÇÃO EM KETS ABSTRATOS:

$$|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$$

LINEARIDADE: $A\left[\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle\right] = \lambda_1 A|\psi_1\rangle + \lambda_2 A|\psi_2\rangle$

PRODUTO A VEZES B: $AB|\psi\rangle = A\left[B|\psi\rangle\right]$

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

DEFINIMOS O <u>ELEMENTO DE MATRIZ</u> DE $\underline{A}$ ENTRE $|\varphi\rangle$ E $|\psi\rangle$ COMO:

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle = \langle\varphi|\left[A|\psi\rangle\right]$$

Um ket seguido de um bra é um operador linear

DADOS 2 ESTADOS $|\varphi\rangle$ E $|\psi\rangle$ CONSIDERE!

$$A = |\varphi\rangle\langle\psi|$$

ESTE É UM OPERADOR LINEAR. DE FATO, DADO UM ESTADO QUALQUER $|\chi\rangle$,:

$$A|\chi\rangle = |\varphi\rangle\underbrace{\langle\psi|\chi\rangle}_{\in\,\mathbb{C}} = \alpha|\varphi\rangle \in \mathcal{E}$$

$$A\left[\lambda_1|\chi_1\rangle + \lambda_2|\chi_2\rangle\right] = |\varphi\rangle\left[\lambda_1\underbrace{\langle\psi|\chi_1\rangle}_{\alpha_1} + \lambda_2\underbrace{\langle\psi|\chi_2\rangle}_{\alpha_2}\right]$$

$$= \left(\lambda_1\alpha_1|\varphi\rangle + \lambda_2\alpha_2|\varphi\rangle\right)$$

$$= \lambda_1\left(A|\chi_1\rangle\right) + \lambda_2\left(A|\chi_2\rangle\right)$$

Projetores

DADO $|\psi\rangle$ NORMALIZADO $(\langle\psi|\psi\rangle = 1)$ DEFINIMOS O PROJETOR EM $|\psi\rangle$ O SEGUINTE OPERADOR LINEAR: $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$

COMO P_ψ ATUA NUM KET QUALQUER $|\varphi\rangle$:

$$P_\psi|\varphi\rangle = |\psi\rangle\underbrace{\langle\psi|\varphi\rangle}_{c} = c\,|\psi\rangle$$

O RESULTADO É UM ESTADO PROPORCIONAL ("CO-LINEAR") A $|\psi\rangle$ E O COEFICIENTE É O PRODUTO ESCALAR $\langle\psi|\varphi\rangle$.

SE $\langle\psi|\varphi\rangle = 0 \Rightarrow P_\psi|\varphi\rangle = 0$; SE $|\varphi\rangle = |\psi\rangle$, $P_\psi|\varphi\rangle = |\psi\rangle$

COMPARE COM VETORES EM $\mathbb{R}^3$:

DADO $\vec{B}$, O PROJETOR EM $\vec{B}$: $P_{\vec{B}}$ É TAL QUE:

$$P_{\vec{B}}\,\vec{A} = (\vec{A}\cdot\vec{B})\,\vec{B}$$

UMA PROPRIEDADE IMPORTANTE DE PROJETORES:

$$P_\psi^2 = P_\psi$$

DE FATO, DADO $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ $\quad (\langle\psi|\psi\rangle = 1)$

$$P_\psi^2 = P_\psi P_\psi = |\psi\rangle\underbrace{\langle\psi|\,|\psi\rangle}_{\langle\psi|\psi\rangle = 1}\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = P_\psi$$

PROVE QUE, SE $\vec{B}\cdot\vec{B} = 1$, $P_{\vec{B}}^2 = P_{\vec{B}}$

DADOS $|\varphi_i\rangle$ $(i = 1, 2, \cdots, N)$ ORTONORMALIZADOS

$$\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij}$$

ELES GERAM UM SUB-ESPAÇO DE $\mathcal{E}$:

$$|\psi_s\rangle = \sum_{i=1}^{N} c_i |\varphi_i\rangle$$

PODEMOS DEFINIR O PROJETOR NESSE SUB-ESPAÇO

$$P_N = \sum_{i=1}^{N} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$$

DE FATO: $$P_N^2 = \sum_{i=1}^{N} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| \sum_{j=1}^{N} |\varphi_j\rangle\langle\varphi_j|$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} |\varphi_i\rangle \underbrace{\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle}_{\delta_{ij}} \langle\varphi_j| = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \delta_{ij} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_j|$$

$$= \sum_{i=1}^{N} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| = P_N$$

DE FATO:

$$P_N |\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N} |\varphi_i\rangle \underbrace{\langle \varphi_i | \psi \rangle}_{c_i}$$

$$= \sum_{i=1}^{N} c_i |\varphi_i\rangle$$

Atuação de operadores em bras

ASSIM COMO DEFINIMOS A ATUAÇÃO DE UM OPERADOR A EM KETS: $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$

PODEMOS TAMBÉM DEFINIR SUA ATUAÇÃO EM BRAS:

$\langle\psi|A$ ISSO É UM BRA $(\langle\chi|)$

OU SEJA, ESSA ATUAÇÃO LEVA BRAS EM BRAS.

COMO? ATRAVÉS DE SUA ATUAÇÃO EM KETS:

$$[\langle\psi|A]|\varphi\rangle = \langle\psi|[A|\varphi\rangle]$$

DISSO DECORRE QUE PODEMOS ESQUECER OS COLCHETES:

$$\underbrace{[\langle\psi|A]}_{\langle\chi|}|\varphi\rangle = \langle\psi|[A|\varphi\rangle] = \langle\psi|A|\varphi\rangle$$