CAPÍTULO 2: AS FERRAMENTAS MATEMÁTICAS DA MECÂNICA QUÂNTICA

COMO VIMOS NO CAPÍTULO 1, COMO $|\psi(\vec{r},t)|^2$ REPRESENTA UMA DENSIDADE DE PROBABILIDADE, TAL QUE:

$$\int |\psi(\vec{r},t)|^2 d^3r = 1$$

APENAS FUNÇÕES $\psi(\vec{r},t)$ TAIS QUE A INTEGRAL ACIMA CONVIRJA FAZEM SENTIDO FÍSICO. ELAS SÃO CHAMADAS DE FUNÇÕES DE QUADRADO INTEGRÁVEL E SEU CONJUTO É L^2 OU $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$, ONDE $\mathbb{R}^3$ QUER DIZER QUE SÃO DEFINIDAS PARA $\vec{r} \in \mathbb{R}^3$ E $\mathbb{C}$ QUE ELAS ASSUMEM VALORES COMPLEXOS.

ALÉM DISSO, É FISICAMENTE IMPORTANTE TRABALHAR APENAS COM FUNÇÕES SUAVES (INFINITAMENTE DIFERENCIÁVEIS). TAMBÉM É INTERESSANTE TRABALHAR COM FUNÇÕES QUE VÃO A ZERO RAPIDAMENTE NO INFINITO. EMBORA NÃO VAMOS USAR UM TRATAMENTO RIGOROSO, VAMOS TRABALHAR NO ESPAÇO $\mathcal{F} \in L^2$ DE FUNÇÕES REGULARES (SUAVES) $\in L^2$.

• $\mathcal{F}$ É UM ESPAÇO VETORIAL:

$\mathcal{F}$ SATISFAZ TODAS AS PROPRIEDADES DE UM ESPAÇO VETORIAL, EM PARTICULAR:

SE $\psi_1(\vec{r}) \in \mathcal{F}$ E $\psi_2(\vec{r}) \in \mathcal{F}$ ENTÃO $\psi(\vec{r}) = \lambda_1 \psi_1(\vec{r}) + \lambda_2 \psi_2(\vec{r}) \in \mathcal{F}$, ONDE $\lambda_{1,2} \in \mathbb{C}$.

PROVA:

$$|\psi(\vec{r})|^2 = |\lambda_1|^2 |\psi_1(\vec{r})|^2 + |\lambda_2|^2 |\psi_2(\vec{r})|^2 + \underbrace{2\,\mathrm{Re}\left[\lambda_1^* \lambda_2 \psi_1^*(\vec{r}) \psi_2(\vec{r})\right]}_{\mathrm{I}}$$

OS DOIS PRIMEIROS TERMOS SÃO DE QUADRADO INTEGRÁVEL. PARA O ÚLTIMO TERMO ESCREVEMOS:

$$\lambda_1^* \lambda_2 \psi_1^*(\vec{r}) \psi_2(\vec{r}) = \rho(\vec{r}) e^{i\theta(\vec{r})}$$

$$\Rightarrow \mathrm{I} = 2\rho(\vec{r}) \cos\theta(\vec{r}) = 2|\lambda_1||\lambda_2||\psi_1(\vec{r})||\psi_2(\vec{r})| \cos\theta(\vec{r})$$
$$\leq 2|\lambda_1||\lambda_2||\psi_1(\vec{r})||\psi_2(\vec{r})| \leq |\lambda_1||\lambda_2|(|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2)$$

JÁ QUE, SE $|\psi_1(\vec{r})| = a$ E $|\psi_2(\vec{r})| = b$, ENTÃO

$$(a-b)^2 = a^2 + b^2 - 2ab \geq 0 \Rightarrow 2ab \leq a^2 + b^2$$

MAS $|\lambda_1||\lambda_2|(|\psi_1(\vec{r})|^2 + |\psi_2(\vec{r})|^2)$ É DE QUADRADO INTEGRÁVEL, LOGO I TAMBÉM É (POIS É MENOR). Q.E.D.

• PRODUTO ESCALAR: DADAS DUAS FUNÇÕES DE $\mathcal{F}$, $\phi(\vec{r})$ E $\psi(\vec{r})$, DEFINIMOS O SEU PRODUTO ESCALAR, NESSA ORDEM:

$$(\phi,\psi) = \int \phi^*(\vec{r})\,\psi(\vec{r})\,d^3r \in \mathbb{C}$$

PROPRIEDADES:

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

ii) $(\phi, \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1(\phi,\psi_1) + \lambda_2(\phi,\psi_2)$ (LINEARIDADE)

iii) $(\lambda_1\phi_1 + \lambda_2\phi_2, \psi) = \lambda_1^*(\phi_1,\psi) + \lambda_2^*(\phi_2,\psi)$ (ANTI-LINEARIDADE)

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

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

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

$\sqrt{(\psi|\psi)} \Rightarrow$ NORMA DE $\psi(\vec{r})$

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

(DESIGUALDADE DE SCHWARZ)

(VER A PROVA NO COMPLEMENTO A_{II} OU ADIANTE)

ESSA ÚLTIMA É UMA GENERALIZAÇÃO DE:

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

SEJA $\phi = \psi_1 + \lambda \psi_2$

$$(\phi, \phi) = (\psi_1 + \lambda\psi_2, \psi_1 + \lambda\psi_2) = (\psi_1, \psi_1) + |\lambda|^2(\psi_2, \psi_2)$$

$$+ \lambda(\psi_1, \psi_2) + \lambda^*(\psi_2, \psi_1) \geq 0$$

FAZENDO $\lambda = -\dfrac{(\psi_2, \psi_1)}{(\psi_2, \psi_2)}$, OS 3 TERMOS EM λ

FICAM: $-\dfrac{|(\psi_1, \psi_2)|^2}{(\psi_2, \psi_2)} - \dfrac{|(\psi_1, \psi_2)|^2}{(\psi_2, \psi_2)} + \dfrac{|(\psi_1, \psi_2)|^2}{|(\psi_2, \psi_2)|^2}(\psi_2, \psi_2)$

$$= -\frac{|(\psi_1, \psi_2)|^2}{(\psi_2, \psi_2)}$$

LOGO:

$$(\psi_1, \psi_1) - \frac{|(\psi_1, \psi_2)|^2}{(\psi_2, \psi_2)} \geq 0$$

MULTIPLICANDO POR $(\psi_2, \psi_2) > 0$:

$$(\psi_1, \psi_1)(\psi_2, \psi_2) \geq |(\psi_1, \psi_2)|^2$$

$$\Longrightarrow |(\psi_1, \psi_2)| \leq \sqrt{(\psi_1, \psi_1)}\sqrt{(\psi_2, \psi_2)} \qquad \text{(Q.E.D.)}$$

- OPERADORES LINEARES:

LEVA $\psi(\vec{r}) \longrightarrow \phi(\vec{r})$

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

E É LINEAR:

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

EXEMPLOS:

a) PARIDADE Π:

$$\Pi\,\psi(x,y,z) = \Pi\,\psi(-x,-y,-z)$$

b) MULTIPLICAÇÃO POR x, $\underline{X}$:

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

c) DERIVAÇÃO EM x, D_x:

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

- PRODUTO DE OPERADORES E COMUTADORES:

A ATUAÇÃO CONSECUTIVA DE 2 OPERADORES DEFINE SEU PRODUTO:

$$C = AB$$

SE: $C\psi(\vec{r}) = A[B\psi(\vec{r})]$

A ORDEM DOS OPERADORES É IMPORTANTE: DE MANEIRA GERAL:

$$AB \neq BA$$

PARA CARACTERIZAR ISSO, É ÚTIL DEFINIR O COMUTADOR DE A E B:

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

EXEMPLO: a) $[x, D_x] = ?$

$$(xD_x - D_x x)\psi(\vec{r}) = x\frac{\partial\psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}[x\psi] =$$

$$= x\frac{\partial\psi}{\partial x} - x\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi = -\psi \quad \Rightarrow [x, D_x] = -1$$

b) VIMOS QUE O MOMENTO LINEAR ATUA COMO:

$$\vec{p} \longrightarrow \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$$

QUAL É O COMUTADOR DE X E P_x?

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

$$= \frac{\hbar}{i}[X, D_x] = -\frac{\hbar}{i} = i\hbar$$

c) $[P_x, P_y] = \left(\frac{h}{i}\right)^2[D_x, D_y] = 0$

d) $[X, Y] = 0$

NOTE ALGUMAS PROPRIEDADES:

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

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

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

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

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

PROVE AS DUAS ÚLTIMAS!

EXERCÍCIOS: CALCULEM OS SEGUINTES COMUTADORES:

a) $[X^2, P_x]$

b) $[X, P_x^2]$

c) $[X, L_y] = [X, Z P_x - X P_z]$

d) $[L_x, L_y] = [Y P_z - Z P_y, Z P_x - X P_z]$