BASES DISCRETAS EM $\mathcal{F}$

UM CONJUNTO ENUMERÁVEL DE FUNÇÕES DE $\mathcal{F}$
$u_i(\vec{r})$, $i = 1, 2, 3, \ldots$ TAL QUE:

a) $(u_i, u_j) = \int d^3r \; u_i^*(\vec{r})\, u_j(\vec{r}) = \delta_{ij}$

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{SE } i = j \\ 0 & \text{SE } i \neq j \end{cases}$$

b) TODA FUNÇÃO DE $\mathcal{F}$ PODE SER ESCRITA
("EXPANDIDA") EM TERMO DE $u_i(\vec{r})$ UNICAMENTE

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_i\, u_i(\vec{r})$$

É CHAMADO DE UMA BASE ORTONORMAL DE $\mathcal{F}$.

OS COEFICIENTES DA EXPANSÃO PODEM SER ESCRITOS COMO:

$$(u_j, \psi) = (u_j, \sum_i c_i u_i) = \sum_i c_i (u_j, u_i) = \sum_i c_i \delta_{ij} = c_j$$

$$\Rightarrow c_i = (u_i, \psi) = \int d^3r \; u_i^*(\vec{r})\, \psi(\vec{r})$$

DADA $\{u_i(\vec{r})\}$, OS c_i REPRESENTAM $\psi(\vec{r})$

. PRODUTO ESCALAR NA BASE $\{u_i(\vec{r})\}$

DADAS DUAS FUNÇÕES $\varphi(\vec{r}), \psi(\vec{r})$:

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

$$\psi(\vec{r}) = \sum_j c_j u_j(\vec{r})$$

ENTÃO: $$(\varphi, \psi) = \sum_{i,j} (b_i u_i, c_j u_j)$$

$$= \sum_{i,j} b_i^* c_j (u_i, u_j) = \sum_{i,j} b_i^* c_j \delta_{ij}$$

$$= \sum_i b_i^* c_i$$

EM PARTICULAR: $(\psi, \psi) = \sum_i |c_i|^2$

. RELAÇÃO DE FECHAMENTO

DADA $\psi(\vec{r}) \in \mathcal{F}$ E UMA BASE $\{u_i(\vec{r})\}$, VIMOS QUE:

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

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

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

ONDE TROCAMOS A ORDEM DE $\sum_i$ E $\int d^3r'$

A FUNÇÃO $F(\vec{r},\vec{r}\,')$ TAL QUE:

$$\psi(\vec{r}) = \int d^3r'\, F(\vec{r},\vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,')$$

PARA TODA $\psi(\vec{r})$ É A <u>DELTA DE DIRAC</u>

$$\psi(\vec{r}) = \int d^3r'\, \delta(\vec{r}-\vec{r}\,')\, \psi(\vec{r}\,')$$

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

RELAÇÃO DE FECHAMENTO

SE $\{u_i(\vec{r})\}$ É UMA BASE ELA SATISFAZ

BASES CONTÍNUAS DE $\mathcal{F}$

É POSSÍVEL EXPANDIR FUNÇÕES DE $\mathcal{F}$ USANDO FUNÇÕES QUE NÃO PERTENCEM A $\mathcal{F}$

a) ONDAS PLANAS: (EM 1D, PRIMEIRAMENTE)

SEJAM AS FUNÇÕES $v_p(x) = \dfrac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$, $p \in (-\infty, +\infty)$

TEMOS QUE, DA TRANSFORMADA DE FOURIER JÁ VISTA:

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

ALÉM DISSO:

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

$$= (v_p, \psi)$$

NOTE A ANALOGIA COM A BASE DISCRETA!

$$\psi(x) = \sum_i c_i u_i(x) \quad ; \quad c_i = (u_i, \psi)$$

$$c_i \longrightarrow \bar{\psi}(p) \qquad \sum_i \longrightarrow \int_{-\infty}^{\infty} dp$$

PORÉM:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |v_p(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{2\pi\hbar} \to \infty$$

E $v_p(x) \notin \mathcal{F}$

DA RELAÇÃO DE PARSEVAL:

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

QUE É ANÁLOGA AO CASO DISCRETO:

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

ORTONORMALIDADE:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, v_{p'}^*(x)\, v_p(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \frac{e^{-i(p'-p)x/\hbar}}{2\pi\hbar}$$

USANDO:

$$\int dx\, e^{ikx} = 2\pi\,\delta(k)$$

OBTEMOS: $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} dx\, v_{p'}^*(x)\, v_p(x) = \delta(p-p') = (v_{p'}, v_p)$

NOTE A ANALOGIA: $\delta_{ij} \to \delta(p-p')$

FECHAMENTO

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

NOTE $\sum_i \to \int dp$

NOTEM TAMBÉM UMA IMPORTANTE PROPRIEDADE DAS $\varphi_p(x)$. LEMBRANDO DA ATUAÇÃO DE $p \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$

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

PRODUTO ESCALAR: DADAS $\varphi(x)$ E $\psi(x)$ COM COEFICIENTES $\overline{\varphi}(p)$ E $\overline{\psi}(p)$ NA BASE $\varphi_p(x)$,

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

A GENERALIZAÇÃO PARA 3D É IMEDIATA.

b) FUNÇÕES DELTA

OUTRA BASE CONTÍNUA DE $\mathcal{F}$ É DADA POR:

$$\xi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0) \qquad x_0 \in (-\infty, +\infty)$$

EVIDENTEMENTE, $\xi_{x_0}(x) \notin \mathcal{F}$. ENTRETANTO, QUALQUER FUNÇÃO $\in \mathcal{F}$ PODE SER EXPANDIDA NESSA BASE:

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

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 DE EXPANSÃO DE $\psi(x)$ NA BASE $\xi_{x_0}(x)$.

OUTRAS PROPRIEDADES ANÁLOGAS ÀS PROVADAS PARA $v_p(x)$ SEGUEM

- PRODUTO ESCALAR DE $\varphi(x)$ E $\psi(x)$

$$(\varphi,\psi) = \int dx_0\, \varphi^*(x_0)\,\psi(x_0)$$

- ORTOGONALIDADE:

$$(\xi_{x_0}, \xi_{x_1}) = \delta(x_0 - x_1)$$

- FECHAMENTO:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_0\, \xi_{x_0}(x)\, \xi^*_{x_0}(x') = \delta(x-x')$$

- ATUAÇÃO DE X:

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

COM GENERALIZAÇÃO IMEDIATA PARA 3D.

UM PONTO IMPORTANTE: TANTO $v_p(x)$ QUANTO $\xi_{x_0}(x)$ SÃO ÚTEIS COMO FUNÇÕES BASE, MAS <u>NÃO PODEM</u> REPRESENTAR UM ESTADO FÍSICO, POIS NÃO SÃO DE QUADRADO INTEGRÁVEL

c) BASES CONTÍNUAS GERAIS

DE MANEIRA GERAL, EXISTEM OUTRAS BASES CONTÍNUAS. CHAMEMO-LAS:

$$w_\alpha(\vec{r})$$

ONDE α É UM ÍNDICE CONTÍNUO, QUE PERCORRE UM CERTO CONJUNTO DE VALORES QUE PODEM VARIAR. NESSE CASO, TEREMOS RELAÇÕES ANÁLOGAS

ORTOGONALIDADE: $(w_\alpha, w_{\alpha'}) = \int d^3r \, w_\alpha^*(\vec{r}) \, w_{\alpha'}(\vec{r}\,') =$

$$= \delta(\alpha - \alpha')$$

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

COM ELAS PODEMOS PROVAR:

EXPANSÃO DA FUNÇÃO DE ONDA:

$$\psi(\vec{r}) = \int d\alpha \; c(\alpha) \, w_\alpha(\vec{r}) \qquad \text{ONDE}$$

$$c(\alpha) = (w_\alpha, \psi) = \int d^3r \; w_\alpha^*(\vec{r}) \, \psi(\vec{r})$$

PRODUTO ESCALAR EM TERMOS DE COMPONENTES:

SE:

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

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

ENTÃO:

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

NORMA:

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

QUADRO 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	$(\psi, \psi) = \sum_i \|c_i\|^2$	$(\psi, \psi) = \int \mathrm{d}\alpha\ \|c(\alpha)\|^2$

d) BASES MISTAS

FINALMENTE, HÁ BASES FORMADAS POR UMA PARTE DISCRETA E UMA CONTÍNUA:

$u_i(\vec{r})$ $i \Rightarrow$ ÍNDICE DISCRETO

$w_\alpha(\vec{r})$ $\alpha \Rightarrow$ ÍNDICE CONTÍNUO

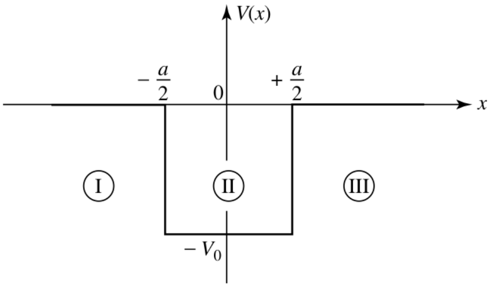
COM PROPRIEDADES:

ORTOGONALIDADE:
$$(u_i, u_j) = \delta_{i,j}$$
$$(w_\alpha, w_{\alpha'}) = \delta(\alpha - \alpha')$$
$$(u_i, w_\alpha) = 0$$

FECHAMENTO:

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

EXEMPLO: AS SOLUÇÕES DA E.S.I.T. DE UM POTENCIAL $V(\vec{r})$ FORMAM UMA BASE. POR EXEMPLO, O POÇO DE POTENCIAL QUADRADO:



QUE TEM SOLUÇÕES NO CONTÍNUO $E > 0$

$$\begin{aligned}
\varphi_{\mathrm{I}}(x) &= A_1\, e^{ik_1 x} + A_1'\, e^{-ik_1 x} \\
\varphi_{\mathrm{II}}(x) &= A_2\, e^{ik_2 x} + A_2'\, e^{-ik_2 x} \\
\varphi_{\mathrm{III}}(x) &= A_3\, e^{ik_1 x} + A_3'\, e^{-ik_1 x}
\end{aligned}$$

E ESTADOS LIGADOS DE QUADRADO INTEGRÁVEL PARA ALGUNS VALORES DISCRETOS $E_i < 0$:

$$\begin{aligned}
\varphi_{\mathrm{I}}(x) &= B_1\, e^{\rho x} + \cancel{B_1'\, e^{-\rho x}} \\
\varphi_{\mathrm{II}}(x) &= A_2\, e^{ikx} + A_2'\, e^{-ikx} \\
\varphi_{\mathrm{III}}(x) &= \cancel{B_3\, e^{\rho x}} + B_3'\, e^{-\rho x}
\end{aligned}$$

O CONJUNTO DE TODAS AS SOLUÇÕES POSSÍVEIS FORMA UMA BASE MISTA EM 1D.