

F 789 – Mecânica Quântica II

1^o Semestre de 2023

06/03/2023

Aula 1

Site da disciplina na minha página:

<http://sites.ifi.unicamp.br/emiranda>

Aba Ensino



Prof. Eduardo Miranda
Universidade Estadual de Campinas (The University of Campinas)

Quem sou Pesquisa Publicações Teses e dissertações **Ensino** Notas de aulas Links GFSMC Contato

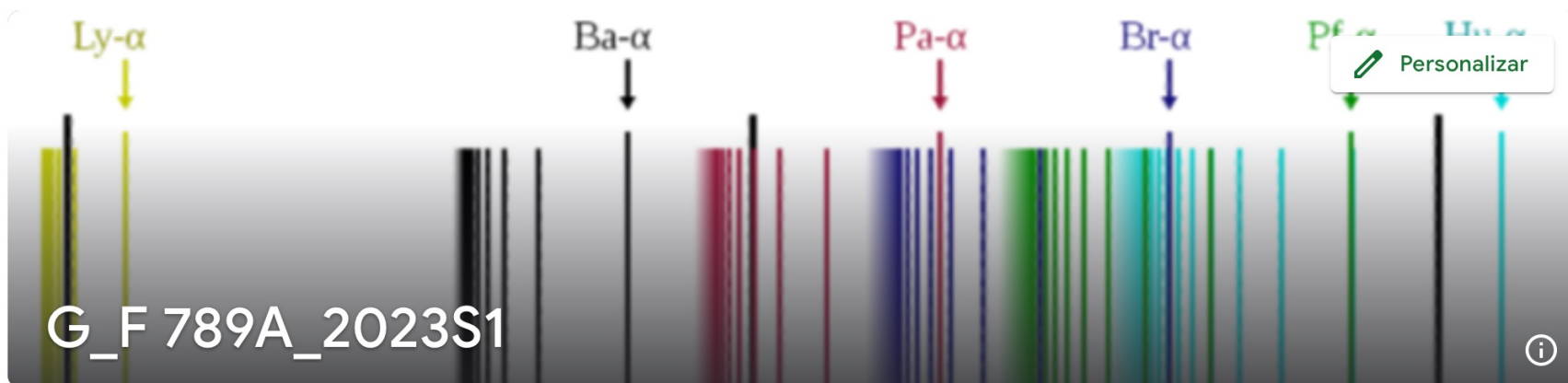
F 789 – Mecânica Quântica II (1o. sem. de 2023)


AVISOS:

Busca


Google Classroom: G_F 789A_2023S1:


- Blog para troca de informações, discussão de dúvidas, perguntas, etc.
- Slides das aulas (também no site).



Meet 



Gerar link



Código da turma: 

mpsetr7 

Próximas atividades

Nenhuma atividade para a próxima semana

 Escreva um aviso para sua turma 

 Eduardo Miranda 
2 de mar.

Pessoal, bem vindos à disciplina F 789 - Mecânica Quântica II, do primeiro semestre de 2023. Nesse mural, postarei todas as informações relevantes sobre a disciplina. Muitas dessas informações estão duplicadas na página da disciplina na minha home page. O endereço é:

<https://sites.ifi.unicamp.br/emiranda/f-789-mecanica-quantica-ii-1o-sem-de-2023/>

Esse mural também servirá para que todos possamos postar dúvidas, respostas às dúvidas, esclarecimentos, links interessantes e qualquer material relativo à disciplina.

Livro adotado:

Quantum Mechanics, Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Franck Laloë, Vols. I e II, 1ª edição, Wiley, 1977.

Fontes adicionais:

Introduction to Quantum Mechanics, D. J. Griffiths, 2ª edição, Addison-Wesley, 2004.

Quantum Mechanics, Nouredine Zettili, 2ª edição, Wiley, 2009.

Principles of Quantum Mechanics, R. Shankar, 2ª edição, Springer, 2008.

The Feynman Lectures on Physics – vol. III, R. P. Feynman, R. B. Leighton e M. Sands, Addison-Wesley, 1964.

Ementa: Caps. 7 ao 14 do Cohen-Tannoudji.

1. Partícula num potencial central: o átomo de hidrogênio.
2. Introdução à teoria quântica do espalhamento por um potencial.
3. O spin do elétron.
4. Adição de momentos angulares.
5. Teoria de perturbação independente do tempo.
6. Aplicações da teoria de perturbação independente do tempo: as estruturas fina e hiperfina do átomo de hidrogênio.
7. Teoria de perturbação dependente do tempo.
8. Sistemas de partículas idênticas.

Conteúdo das aulas

Prof. Eduardo Miranda
Universidade Estadual de Campinas (The University of Campinas)

Quem sou Pesquisa Publicações Teses e dissertações Ensino ▾ Notas de aulas Links GFSMC Contato

Estrutura de aulas de F 789 (1o. sem. de 2023)

ATENÇÃO: ARTIGOS DE REVISTAS CIENTÍFICAS PODEM SER BAIXADOS DE DENTRO DA UNICAMP (OU DE FORA, USANDO O VPN).

Capítulo 7: Partícula num potencial central: o átomo de hidrogênio. (4 aulas) (Notas de aula: [Chap7a](#), [Chap7b](#), [Chap7c](#))

06/03 – Revisão de Mecânica Quântica I. Partícula num potencial central: análise clássica (início).

08/03 – (video da aula) Partícula num potencial central: análise clássica (fim); análise quântica: quantidades conservadas, potencial efetivo, equação radial, comportamento da função radial nas vizinhanças da origem, números quânticos, normalização para espectro discreto e contínuo, conjunto completo de operadores que comutam.

slides anotados das aulas

Busca



IDIOMA:



LOGIN

[Acessar](#)

[Feed de posts](#)

[Feed de comentários](#)

Avaliação:

Haverá 3 Provas (P1, P2, P3)

$$M = (P1+P2+P3)/3$$

Se $M \geq 5.0$, aprovado.

Se $M < 2.5$, reprovado.

Se $2.5 \leq M < 5.0$, $MF = (M + E)/2$, onde E = Exame final. Se $MF \geq 5.0$, aprovado. Do contrário, reprovado.

Datas das provas:

P1: 10 de abril (Caps. 7 e 8)

P2: 17 de maio (Caps. 9, 10 e 11)

P3: 28 de junho (Caps. 12, 13 e 14)

Exame: 10 de julho (Caps. 7 ao 14)

Não cobrarei as listas, mas elas são parte importante da preparação para as provas.

“Highlights” de Mecânica Quântica I

O **estado** de um sistema é especificado por sua **função de onda** $\psi(\mathbf{r}, t)$.
Ela satisfaz a **equação de Schrödinger**:

$$\frac{P^2}{2m} \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}$$

$$\vec{P} = \hbar \vec{\nabla}$$

Interpretação probabilística:

$$dP(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r \rightarrow dx dy dz$$

Para potenciais **independentes** do tempo: $\psi(\mathbf{r}, t) = \phi_E(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar}$
 $V(\mathbf{r})$

Equação de Schrödinger independente do tempo (ESIT):
equação de **auto-valores do Hamiltoniano**.

$$\underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right]}_H \phi_E(\mathbf{r}) = E \phi_E(\mathbf{r}) \Rightarrow H \phi_E(\mathbf{r}) = E \phi_E(\mathbf{r})$$

Notação de Dirac: independente de representação (base)

Cada estado corresponde a um **ket** num espaço \mathcal{E} : $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$

Dentre várias **representações** ou bases possíveis, duas se destacam:

auto-estados de **posição**: $\{\lvert\mathbf{r}\rangle\} \rightarrow \int d^3r \lvert\mathbf{r}\rangle \langle\mathbf{r}\rvert = \mathbb{1}$
 $\vec{r} \Rightarrow (x, y, z)$

auto-estados de **momento linear**: $\{\lvert\mathbf{p}\rangle\} \rightarrow \int d^3p \lvert\mathbf{p}\rangle \langle\mathbf{p}\rvert = \mathbb{1}$
 $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$

As **funções de onda** são as componentes na representação de **posição**:

$$\langle\mathbf{r}\lvert\psi\rangle = \psi(\mathbf{r})$$

As componentes na representação de **momentos** são a **transformada de Fourier** da função de onda:

$$\langle\mathbf{p}\lvert\psi\rangle = \bar{\psi}(\mathbf{p}) = \int d^3r \langle\mathbf{p}\lvert\mathbf{r}\rangle \langle\mathbf{r}\lvert\psi\rangle = \int d^3p \frac{e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \psi(\mathbf{r})$$

Postulados da Mecânica Quântica

Postulado 1: O estado de um sistema físico num instante t_0 é determinado por um ket do espaço de estados \mathcal{E} :

$$|\psi(t_0)\rangle \in \mathcal{E}$$

Postulado 2: Toda quantidade física \mathcal{A} é descrita por um operador A que age em \mathcal{E} . A é um **observável**, ou seja, um operador Hermitiano cujos auto-estados formam uma base de \mathcal{E} .

$$A = A^\dagger$$

Postulado 3: Os únicos resultados possíveis de serem obtidos em uma medida de \mathcal{A} são os **auto-valores do operador A** .

$$A |u_n^i\rangle = a_n |u_n^i\rangle, \quad (i = 1, 2, \dots, g_n) \quad \langle u_m^i | u_n^j \rangle = \delta_{mn} \delta_{ij}$$

Postulados da Mecânica Quântica

Postulado 4 (Princípio da decomposição espectral): Se o estado do sistema é $|\psi\rangle$ a probabilidade de se obter um determinado auto-valor de A é:

a) **Espectro de A é discreto:** $A|u_n^i\rangle = a_n|u_n^i\rangle$, $(i = 1, 2, \dots, g_n)$ $\langle u_m^i|u_n^j\rangle = \delta_{mn}\delta_{ij}$

$$P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i|\psi\rangle|^2 = \langle\psi|P_n|\psi\rangle, \quad P_n = \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle\langle u_n^i|$$

b) **Espectro de A é contínuo:** $A|v_\alpha\rangle = \alpha|v_\alpha\rangle$, $\langle v_\alpha|v_{\alpha'}\rangle = \delta(\alpha - \alpha')$

Probabilidade de obter α no intervalo $[\alpha, \alpha+d\alpha]$

$$dP(\alpha) = |\langle v_\alpha|\psi\rangle|^2 d\alpha = \langle\psi|P_\alpha|\psi\rangle, \quad P_\alpha = |v_\alpha\rangle\langle v_\alpha|$$

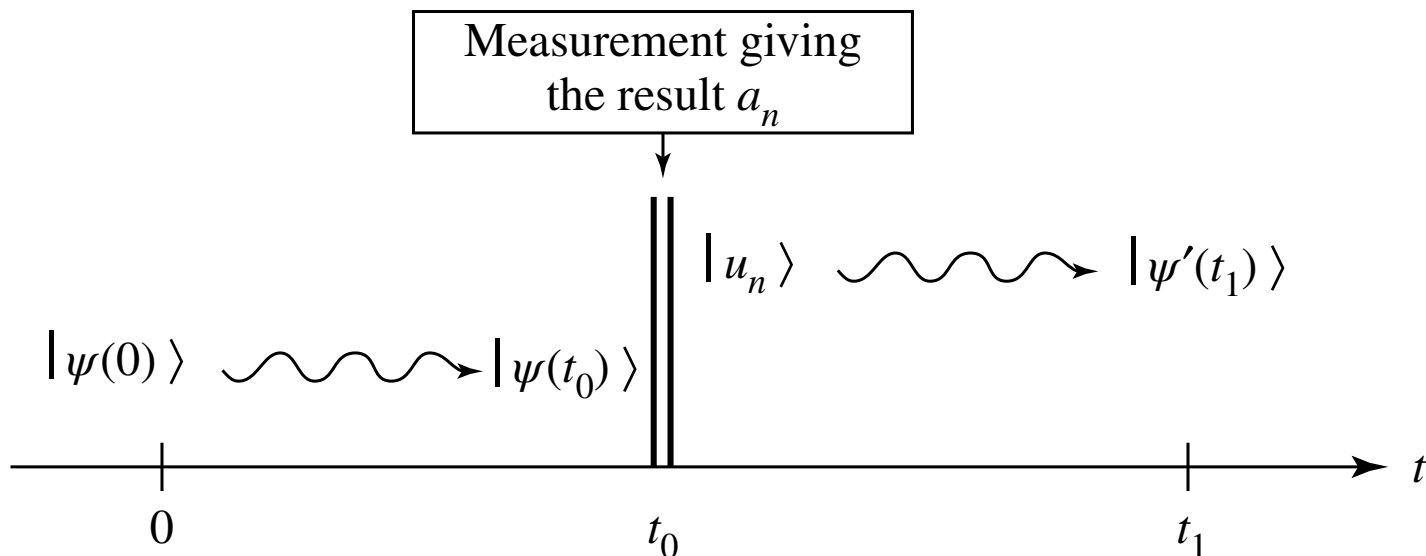
$$dP(\alpha) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_\alpha^i|\psi\rangle|^2 d\alpha$$

Postulados da Mecânica Quântica

Postulado 5 (Colapso da função de onda): Se o estado do sistema é $|\psi\rangle$ e, na medida de um observável A obtém-se o auto-valor a_n , então, imediatamente após a medida o estado do sistema passa a ser

$$\frac{P_n |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | P_n | \psi \rangle}} = K \sum_{i=1}^{g_n} \langle u_n^i | \psi \rangle |u_n^i\rangle$$

que é a projeção normalizada no auto-sub-espaço de a_n .



Postulados da Mecânica Quântica

Postulado 6: A evolução temporal do sistema é determinada pela equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = H(t) |\psi(t)\rangle$$

onde $H(t)$ é o Hamiltoniano do sistema (geralmente sua energia total).

Momento angular

Definição geral de momento angular: 3 operadores tais que

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

$$\begin{aligned} [J_x, J_y] &= i\hbar J_z \\ [J_y, J_z] &= i\hbar J_x \\ [J_z, J_x] &= i\hbar J_y \end{aligned}$$

Módulo quadrado do momento angular: $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$
 $[J^2, J_i] = 0 \quad i = x, y, z$

Assim, escolheremos J^2 e, por exemplo, J_z , para formar um par de operadores que comutam.

Também definimos os operadores “escada”: $J_{\pm} = J_x \pm iJ_y$

$$(J_+)^{\dagger} = (J_-)$$

Momento angular

Auto-vetores simultâneos de J^2, J_z :

$$J^2 |k, j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |k, j, m\rangle$$

$$J_z |k, j, m\rangle = m\hbar |k, j, m\rangle$$

onde k distingue entre os auto-vetores diferentes com mesmo (j, m) .

Os valores possíveis de (j, m) são: $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, \dots$

$$m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$$

Para cada j , há $2j+1$ valores possíveis de m .

Ação **universal** dos operadores **J**:

$$J_+ |k, j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\hbar |k, j, m+1\rangle$$

$$J_- |k, j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\hbar |k, j, m-1\rangle$$

Momento angular orbital

Momento angular orbital: $\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$ $L_x = yP_z - zP_y$; $L_y = \dots$
Satisfazem as regras de comutação genéricas do momento angular.

Operadores \mathbf{L} na representação de posição (em coordenadas esféricas r, θ, ϕ) só dependem dos ângulos:

$$L_x = i\hbar \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \phi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

$$L_y = i\hbar \left(-\cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\sin \phi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

$$L_{\pm} = \hbar e^{\pm i\phi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{i}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]$$

Auto-funções do momento angular orbital

Auto-funções simultâneas de L^2 e L_z :

$$-\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \psi(r, \theta, \phi) = l(l+1) \psi(r, \theta, \phi)$$
$$-i \frac{\partial}{\partial \phi} \psi(r, \theta, \phi) = m \psi(r, \theta, \phi)$$

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$$

m e l só podem assumir valores inteiros.

$$\psi(r, \theta, \phi) = R_{kl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = Z_{lm}(\theta) \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}}$$

Os $Y_{lm}(\theta, \phi)$ são chamados de **harmônicos esféricos**.

Ortonormalização:
$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_{l'm'}^*(\theta, \phi) Y_{lm}(\theta, \phi) = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}$$

Exemplos de harmônicos esféricos

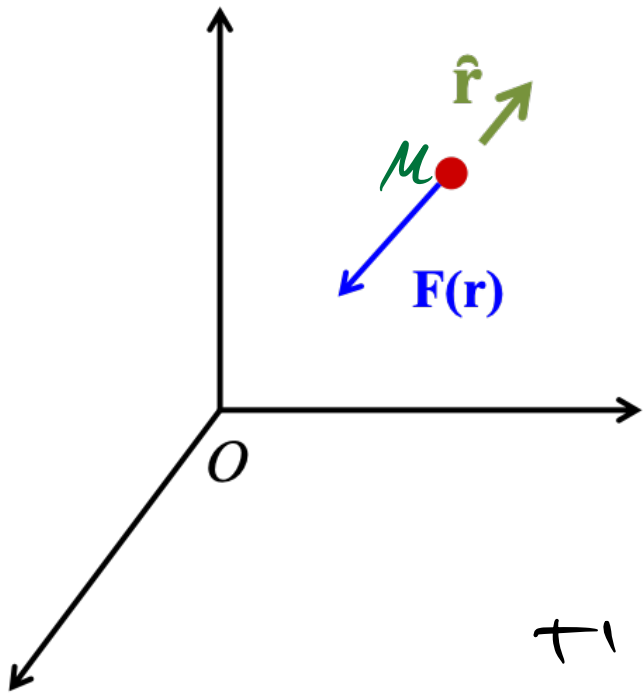
$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$\begin{cases} Y_1^{\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} \\ Y_1^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \end{cases}$$

$$\begin{cases} Y_2^{\pm 2}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi} \\ Y_2^{\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi} \\ Y_2^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) \end{cases}$$

Força central

Força central: sempre na direção de um ponto fixo (a origem do sistema de coordenadas, por exemplo).



$$\vec{F}(\vec{r}) = F(r) \hat{r}$$

↳ $r =$ DISTÂNCIA A 0

ELA É CONSERVATIVA:

$$\vec{\nabla} \times \vec{F}(\vec{r}) = 0 \Leftrightarrow \vec{F} = -\vec{\nabla} V(r)$$

TODA FORÇA CENTRAL É CONSERVA-

TIVA:

$$\vec{\nabla} \times (F(r) \hat{r}) = 0 \Rightarrow \vec{F} = -\frac{\partial V(r)}{\partial r} \hat{r}$$

$$\Rightarrow V(r)$$

Análise clássica

O momento angular é conservado. $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = \mu \vec{r} \times \vec{v} = \mu \vec{r} \times \dot{\vec{r}}$

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \mu \frac{d}{dt} (\vec{r} \times \dot{\vec{r}}) = \mu (\dot{\vec{r}} \times \dot{\vec{r}} + \vec{r} \times \ddot{\vec{r}}) = \vec{r} \times (\underbrace{\mu \ddot{\vec{r}}}_{\vec{F}})$$

$$= \vec{r} \times \vec{F} = \vec{r} \times [F(r) \hat{n}] = F(r) \underbrace{\vec{r} \times \hat{n}}_{\vec{0}} = 0$$

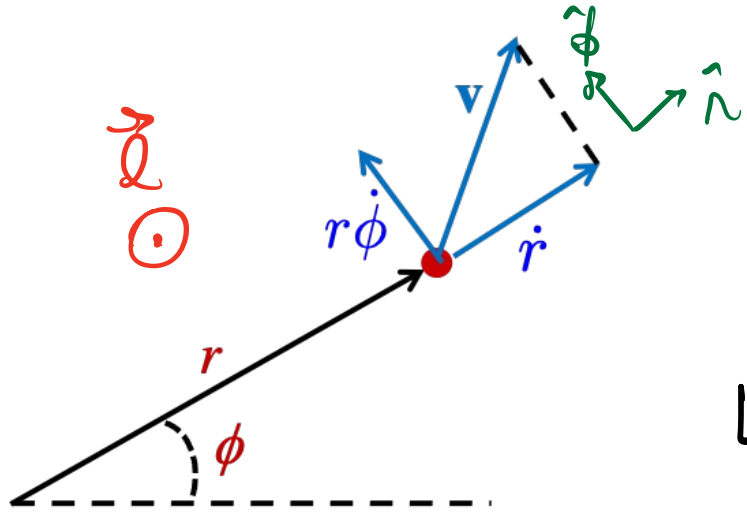
$$\Rightarrow \vec{L} = \text{CONST.}$$

O movimento se dá sempre no plano normal ao vetor momento angular.

$$\vec{L} = \mu (\vec{r} \times \vec{v}) = \text{CONST.} \Rightarrow \vec{r} \perp \vec{L} \text{ e } \vec{v} \perp \vec{L}$$

Análise clássica

Trabalhando com coordenadas polares no plano (r, ϕ)



$$\vec{v} = \dot{r} \hat{n} + r \dot{\phi} \hat{\phi}$$

$$T = \frac{\mu}{2} v^2 = \frac{\mu}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2)$$

$$L = T - V = \frac{\mu}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2) - V(r)$$

(LAGRANGIANA)

$$\vec{L} = \mu \vec{n} \times \vec{v} = \mu (r \hat{n}) \times (\dot{r} \hat{n} + r \dot{\phi} \hat{\phi}) = \underbrace{\mu r^2 \dot{\phi}}_L \hat{z} = \text{CONST.}$$

EQS. DE EULER-LAGRANGE:

$$r: \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{r}} \right) - \frac{\partial L}{\partial r} = 0 = \frac{d}{dt} [\mu \dot{r}] - \mu r \dot{\phi}^2 + \frac{\partial V}{\partial r} = 0$$

$$\phi: \dot{\phi} = \frac{L}{\mu r^2}$$

$$\phi: \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} \right) - \frac{\partial L}{\partial \phi} = 0 \Rightarrow \frac{d}{dt} [\mu r^2 \dot{\phi}] = 0 \Rightarrow \mu r^2 \dot{\phi} = \text{CONST.} = L$$

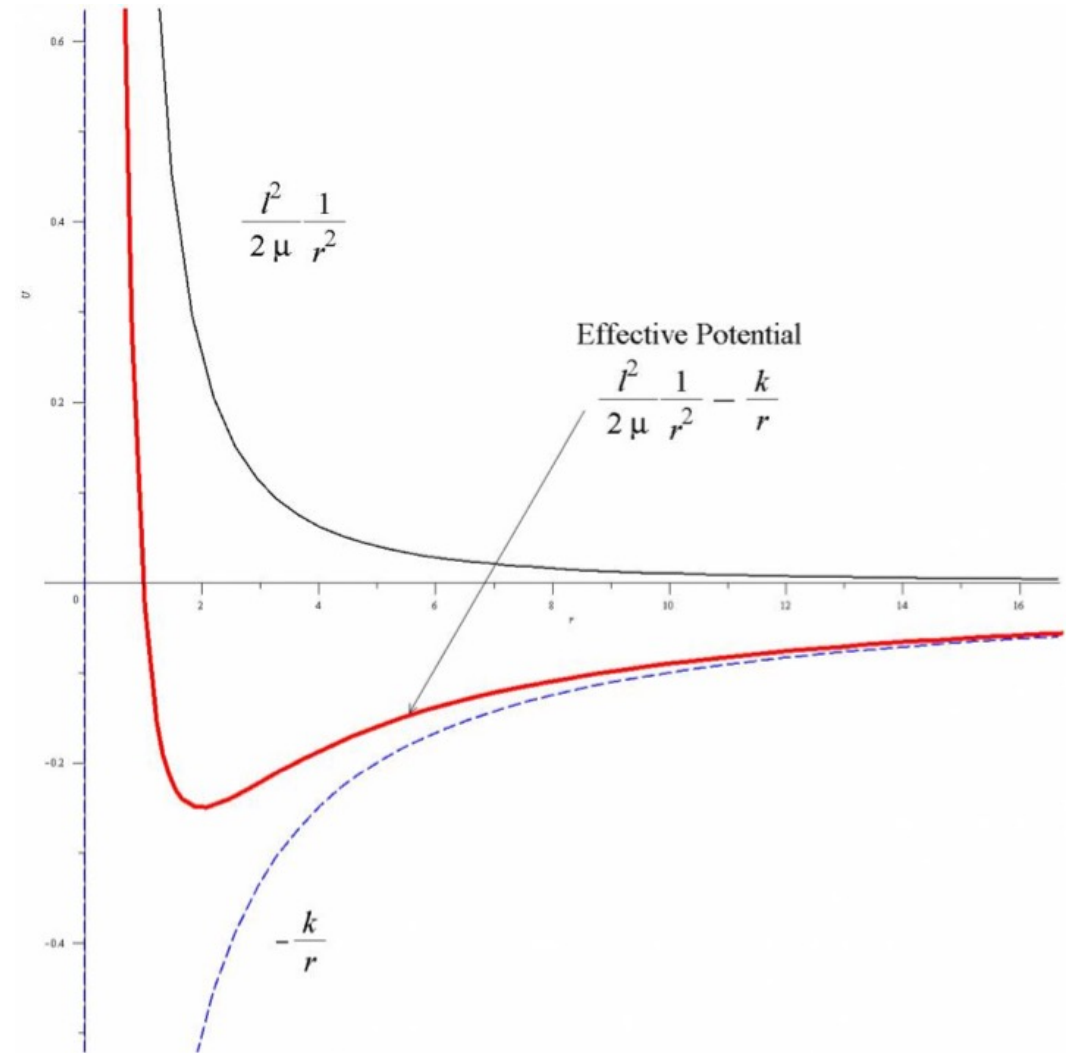
$$\left. \begin{aligned} \mu \ddot{r} - \underbrace{\mu r \dot{\phi}^2}_{\mu r \frac{l^2}{\mu^2 r^4}} + \frac{\partial V}{\partial r} = 0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \mu \ddot{r} = \frac{l^2}{\mu r^3} - \frac{\partial V}{\partial r} = - \frac{dV_{\text{eff}}(r)}{dr}$$

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{l^2}{2\mu r^2} ; \quad \frac{dV_{\text{eff}}(r)}{dr} = \frac{dV}{dr} - \frac{l^2}{\mu r^3}$$

$$\text{EM 1D: } \mu \ddot{x} = - \frac{dV}{dx}$$

O potencial efetivo

Se: $V(r) = -\frac{k}{r}$



Formalismo hamiltoniano

$$P_n = \frac{\partial L}{\partial \dot{n}} = \mu \dot{n}$$

$$P_\phi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = \mu n^2 \dot{\phi} = Q \quad P_\phi = \text{CONST.}$$

$$H = \sum_i P_i \dot{q}_i - L = P_n \dot{n} + P_\phi \dot{\phi} - L = P_n \left(\frac{P_n}{\mu} \right) + P_\phi \left(\frac{P_\phi}{\mu n^2} \right) - \\ = \frac{\mu}{2} \left[\left(\frac{P_n}{\mu} \right)^2 + n^2 \left(\frac{P_\phi}{\mu n^2} \right)^2 \right] + V(n)$$

$$H = \frac{P_n^2}{2\mu} + \frac{P_\phi^2}{2\mu n^2} + V(n) = \frac{P_n^2}{2\mu} + \underbrace{\frac{Q^2}{2\mu n^2}}_{V_{\text{eff}}(n)} + V(n)$$

$$H = \frac{P^{\rightarrow 2}}{2\mu} + V(n)$$