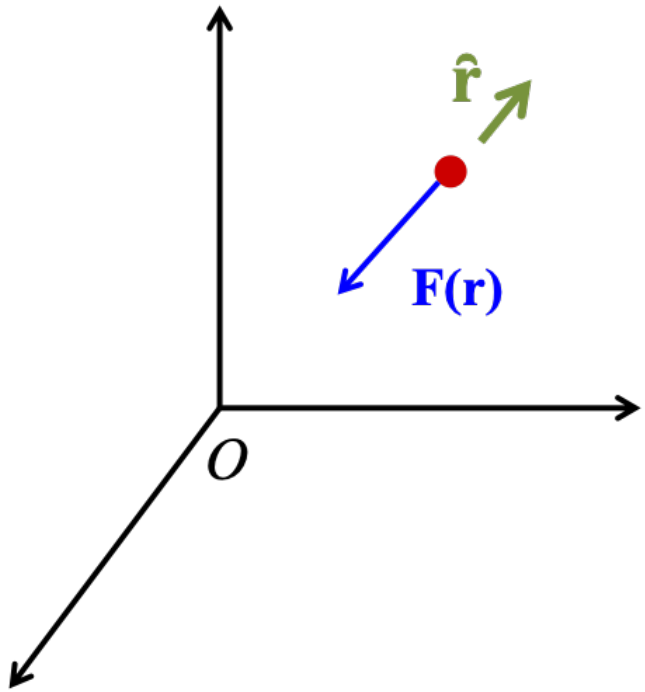
F 789 – Mecânica Quântica II

1º Semestre de 2023
08/03/2023
Aula 2

Aula passada

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



$$\mathbf{F} = F\left(r\right)\hat{\mathbf{r}} = -\frac{\partial V\left(r\right)}{\partial r}\hat{\mathbf{r}}$$

Aula passada

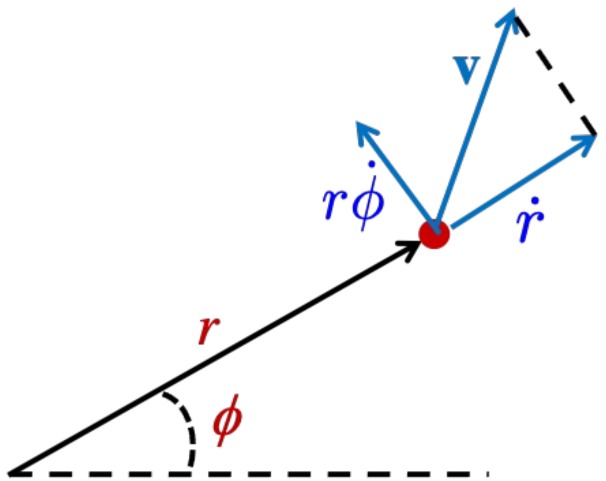
Análise clássica:

- O momento angular é conservado.

$$\mathbf{l} = \mu \mathbf{r} \times \dot{\mathbf{r}} = \text{const.} \Rightarrow \mathbf{r}, \mathbf{v} \perp \mathbf{l}$$ O movimento é confinado a 2D.

- Utilizando coordenadas polares (r,ϕ) no plano do movimento, a Lagrangiana é:

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



- Equações de Euler-Lagrange:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}}\right) - \frac{\partial L}{\partial \phi} = 0 \Rightarrow \mu r^2 \dot{\phi} = |\mathbf{l}| = \text{const.}$$

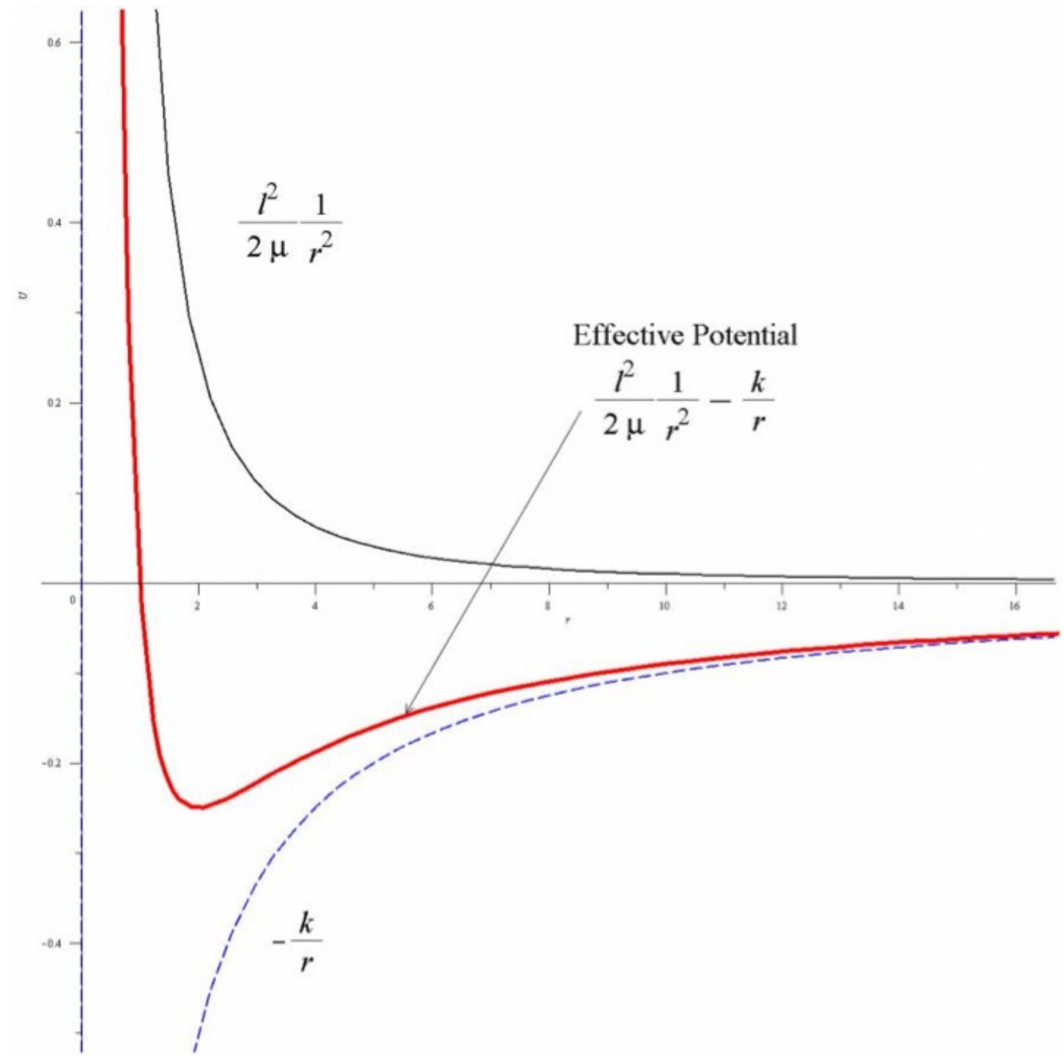
$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{r}}\right) - \frac{\partial L}{\partial r} = 0 \Rightarrow \mu \ddot{r} = \frac{l^2}{\mu r^3} - \frac{dV(r)}{dr} = -\frac{dV_{\text{eff}}(r)}{dr}$$

$$\boxed{V_{\text{eff}}(r) = \frac{l^2}{2\mu r^2} + V(r)}$$

Aula passada

O potencial effetivo $V_{\text{eff}}(r)$ para:

$$V\left(r\right)=-\frac{k}{r}$$



Aula passada

O formalismo Hamiltoniano.

Momentos canonicamente conjugados a r e ϕ:

$$p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = \mu \dot{r}$$

$$p_\phi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = \mu r^2 \dot{\phi} = l = \text{const.}$$

O Hamiltoniano é a energia mecânica total:

$$H = \frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{l^2}{2\mu r^2} + V\left(r\right) = \frac{p_r^2}{2\mu} + V_{\text{eff}}\left(r\right)$$

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V\left(r\right)$$

Análise quântica

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2\mu} + V(r) \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r) \qquad \nabla^2 = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r) + \frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]$$

REPR. DE COORDENADAS $\{|\vec{r}\rangle\}$

EM COORD. ESFÉRICAS (r,θ,ϕ)

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

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r) - \frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] + V(r)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r) + \frac{1}{2\mu r^2}L^2 + V(r)$$

$$H\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

Momento angular orbital

Operadores **L** na representação de posição (em coordenadas esféricas r, θ, ϕ) só dependem dos ângulos: $\vec{L} = \vec{R} \times \vec{P}$

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

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

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

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

$$[L_x, L^2] = [L_y, L^2] = [L_z, L^2] = 0$$

Quantidades conservadas

L^2 É CONSERVADO, OU SEJA, $[L^2, H] = 0$

POIS $L^2 f(r) = f(r) L^2 \Rightarrow [L^2, f(r)] = 0$

$L^2 \frac{d}{dr} = \frac{d}{dr} L^2 \Rightarrow [L^2, \frac{d}{dr}] = 0$

ALÉM DISSO, L_x, L_y E L_z TAMBÉM COMUTAM COM H, POIS COMUTAM COM $f(r)$ E $\frac{d}{dr}$ E COM L^2

CONCLUSÃO: $[L^2, H] = [L_z, H] = [L^2, L_z] = 0$

PORTANTO, EXISTEM AUTO-FUNÇÕES SIMULTÂNEOS DE $\{H, L^2, L_z\}$

$$H\varphi(\vec{r}) = E\,\varphi(\vec{r})$$

$$L^2\varphi(\vec{r}) = \ell(\ell+1)\hbar^2\varphi(\vec{r})$$ (JÁ RESOLVIDO)

$$L_z\varphi(\vec{r}) = m\hbar\,\varphi(\vec{r})$$ (TAMBÉM JÁ RESOLVIDO)

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

$$m = -\ell, -\ell+1, \dots, \ell-1, \ell$$ (2ℓ+1 VALORES DE m)

$$\varphi_{\ell m}(\vec{r}) = R(r)\,Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

POSSO LEVAR ESSA $\varphi_{\ell m}(\vec{r})$ NA EQ. $H\varphi = E\varphi$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\ ) + \frac{1}{2\mu r^2}L^2 + V(r)\right]R(r)\,Y_{\ell m}(\theta,\phi) = E\,R(r)\,Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

$$\cancel{Y_{\ell m}(\Omega)}\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\ ) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r)\right]R(r) = E\,R(r)\,\cancel{Y_{\ell m}(\Omega)}$$

"EQUAÇÃO RADIAL"

Auto-estados de L^2 e L_z

$$-\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]Y_{lm}(\theta,\phi)=l(l+1)Y_{lm}(\theta,\phi)$$

$$-i\frac{\partial}{\partial\phi}Y_{lm}(\theta,\phi)=mY_{lm}(\theta,\phi)$$

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

$$\boxed{\begin{array}{c} l=0,1,2,3,\ldots \\ m=-l,-l+1,\ldots,l-1,l \end{array}}$$

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

$$\begin{cases} Y_1^{\pm1}(\theta,\varphi)=\mp\sqrt{\dfrac{3}{8\pi}}\,\sin\theta\;\mathrm{e}^{\pm i\varphi} \\ Y_1^0(\theta,\varphi)=\sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}\,\cos\theta \end{cases}$$

$$\begin{cases} Y_2^{\pm2}(\theta,\varphi)=\sqrt{\dfrac{15}{32\pi}}\,\sin^2\theta\;\mathrm{e}^{\pm2i\varphi} \\ Y_2^{\pm1}(\theta,\varphi)=\mp\sqrt{\dfrac{15}{8\pi}}\,\sin\theta\cos\theta\;\mathrm{e}^{\pm i\varphi} \\ Y_2^0(\theta,\varphi)=\sqrt{\dfrac{5}{16\pi}}\,(3\cos^2\theta-1) \end{cases}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r)\right]R(r) = E\,R(r)$$

EQ. NÃO DEPENDE DE $\underline{m}$ MAS DEPENDE DE $\underline{\ell}$

$$R(r) \to R_\ell(r)$$

PARA CADA $\underline{\ell}$ PODE HAVER DIFERENTES AUTO-FUNÇÕES. VAMOS ROTULÁ-LAS COM $\underline{k}$

$$R_\ell(r) \to R_{k\ell}(r) \qquad E \to E_{k\ell}$$

$$\varphi_{k\ell m}(\vec{r}) = R_{k\ell}(r)\,Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

A equação radial

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r+\frac{l\,(l+1)\,\hbar^2}{2\mu r^2}+V\,(r)\right]R_{k,l}\,(r)=E_{k,l}R_{k,l}\,(r)}$$

VAMOS DEFINIR: $R_{k\ell}(r) = \dfrac{u_{k,\ell}(r)}{r}$

$$\frac{d^2}{dr^2}\left[r R_{k\ell}(r)\right] = \frac{d^2}{dr^2}u_{k\ell}(r)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu r}\frac{d^2}{dr^2}+\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^3}+\frac{V(r)}{r}\right]u_{k\ell}(r)=E_{k,\ell}\frac{u_{k,\ell}(r)}{r}$$

MULTIPLICO A EQ. POR r:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2}+\underbrace{\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2}+V(r)}_{V_{eff}(r)}\right]u_{k\ell}(r)=E_{k,\ell}\,u_{k,\ell}(r)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2}+V_{eff}(r)\right]u_{k,l}(r)=E_{k,l}\,u_{k,l}(r)$$

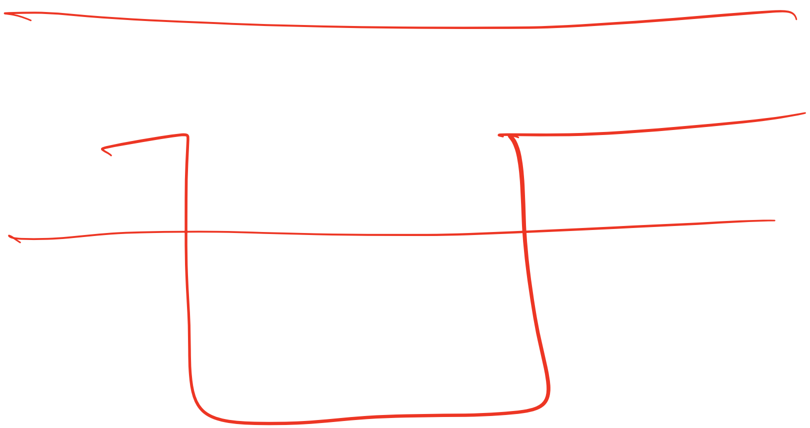
LEMBRA A EQ. DE SCH. 1D:

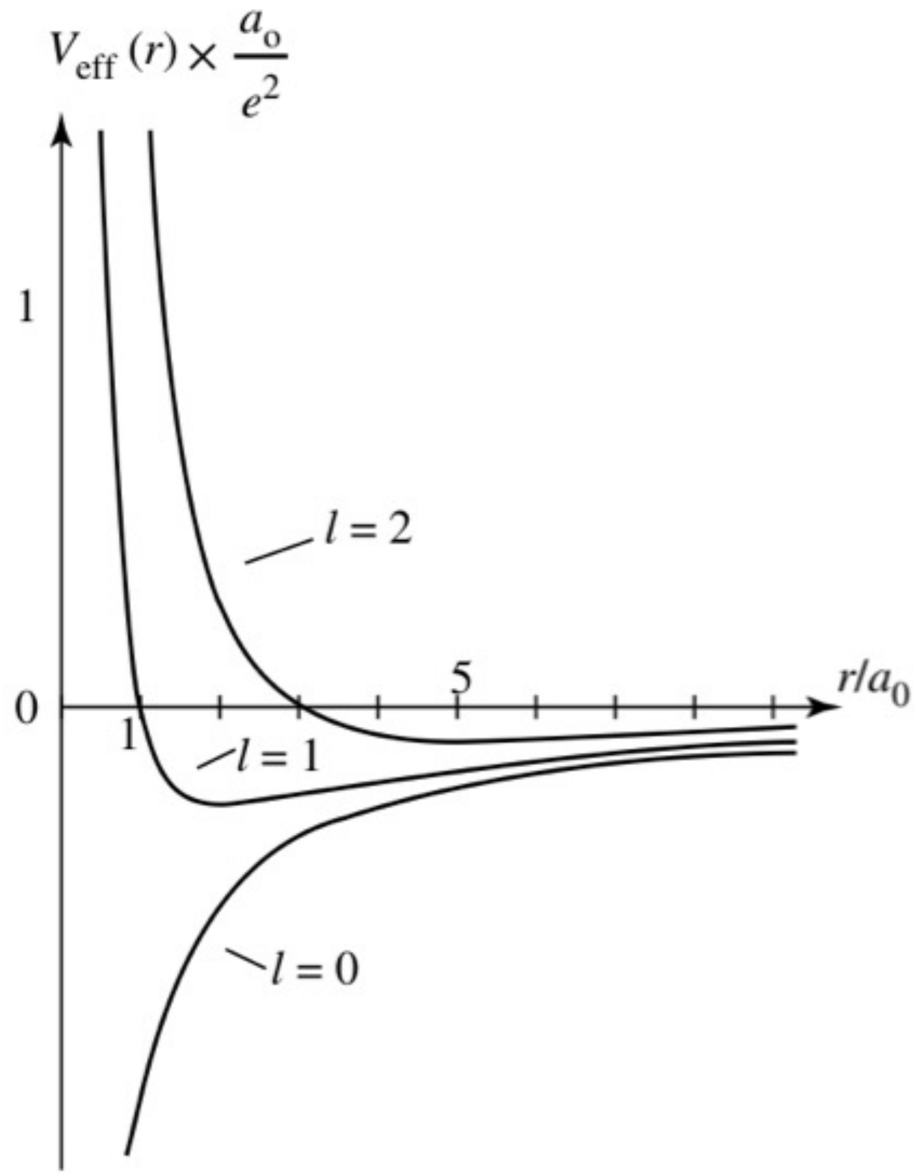
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]\psi(x)=E\,\psi(x)$$

MAS LEMBRE-SE QUE $r \geq 0$.

Exemplo de potencial efetivo quântico

Se: $V\left(r\right)=-\dfrac{k}{r}$





Comportamento de $u_{k,l}(r)$ na origem

$u_{kl}(r \to 0) = ?$ $(r \to 0)$

CONSIDERAREMOS APENAS POTENCIAIS TAIS QUE:

$$r V(r) \xrightarrow[r \to 0]{} \text{CONST.}$$

P.EX.: $V(r) \sim \frac{k}{r}$ MAS $V(r) \sim \cancel{\frac{k''}{r^2}}$

$V(r) \sim k' r^{\mu}$ $\mu > 0$ $V(r) \sim r^{\lambda}$ $\lambda > -1$

SUPONHA QUE $R_{k,l}(r) \sim C\, r^{s}$ QUANDO $r \to 0$

LEVO NA EQ. RADIAL:

1º TERMO: $-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2}\left[r R_{k,l}(r)\right] \sim -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{C}{r} \frac{d^2}{dr^2}\left[C\, r^{(s+1)}\right]$

$$-\frac{\hbar^2 C (s+1) s}{2\mu} \frac{r^{(s-1)}}{r} = -\frac{\hbar^2 C}{2\mu} s(s+1)\, r^{(s-2)}$$

2º TERMO: $+\frac{\hbar^2 c\,\ell(\ell+1)}{2\mu}\, r^{(s-2)}$

3º TERMO: $V(r)\, R_{k\ell}(r) = c\,V(r)\, r^{s} \ll r^{(s-2)}$ SE $r \to 0$

4º TERMO: $E_{k,\ell}\, R_{k\ell}(r) = c\,E_{k,\ell}\, r^{s} \ll r^{(s-2)}$ SE $r \to 0$

PORTANTO, NO LIMITE $r \to 0$:

$$c\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\right)\underbrace{\left[s(s+1)-\ell(\ell+1)\right]}_{=0} r^{(s-2)} = 0$$

PRECISO ACHAR s TAL QUE: $s(s+1) = \ell(\ell+1)$

$$s = \begin{cases} \ell \\ -(\ell+1) \end{cases}$$ DUAS SOLUÇÕES POSSÍVEIS

MAS: $R_{k,\ell}(r) = \dfrac{C}{r^{(\ell+1)}}$ NÃO É FISICAMENTE ACEITÁVES PORQUE:

$$\nabla^2\left(\frac{C}{r^{(\ell+1)}}\right) \sim \delta'(r)$$

O QUE RESOLVE A EQ. RADIAL PARA OS POTENCIAIS QUE ESTAMOS CONSIDERANDO.

FINALMENTE: $R_{k,\ell}(r) \sim C r^{\ell}$ $\quad r \to 0$

$$u_{k,\ell}(r) = r\,R_{k,\ell}(r) \sim C\, r^{(\ell+1)} \quad r \to 0$$

COMO $\ell = 0, 1, 2, \ldots$ $u_{k,\ell}(r) \to 0$ QUANDO $r \to 0$

"PAREDE DURA"

Números quânticos

Auto-funções genéricas para o potencial central:

$$\varphi_{k,l,m}(\mathbf{r}) = R_{k,l}(r)\,Y_{l,m}(\theta,\phi) = \frac{1}{r}u_{k,l}(r)\,Y_{l,m}(\theta,\phi)$$

Auto-funções simultâneas de $\{H, L^2, L_z\}$:

$$H\varphi_{k,l,m}(\mathbf{r}) = E_{k,l}\varphi_{k,l,m}(\mathbf{r})$$
$$L^2\varphi_{k,l,m}(\mathbf{r}) = l(l+1)\hbar^2\varphi_{k,l,m}(\mathbf{r})$$
$$L_z\varphi_{k,l,m}(\mathbf{r}) = m\hbar\varphi_{k,l,m}(\mathbf{r})$$

k = NÚMERO QUÂNTICO RADIAL

l = " " AZIMUTAL

m = " " MAGNÉTICO

Normalização

DEPENDENDO DA FORMA DO POTENCIAL $V(r)$ OS AUTO-VALORES DE H, $E_{k,l}$, FORMAM UM CONJUNTO DISCRETO, CONTÍNUO OU PARTE DISCRETA E PARTE CONTÍNUA.

PARTE DISCRETA, AS AUTO-FUNÇÕES SÃO DE QUADRADO INTEGRÁVEL:

$$\int d^3r \, |\varphi_{k,l,m}(\vec{r})|^2 = 1$$

$$\int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \sin\theta \, d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \, |\varphi_{k,l,m}(\vec{r})|^2 = 1$$

USANDO: $\varphi_{k,l,m}(\vec{r}) = R_{k,l}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$

$$\underbrace{\int_0^\infty r^2 |R_{kl}(r)|^2 dr \int_0^\pi \sin\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, |Y_{lm}(\theta,\phi)|^2}_{} = 1$$

$= 1$ (POR CONVERSÃO)

$$\int_0^\infty r^2 |R_{k,l}(r)|^2 dr = 1$$

OU: $\int_0^\infty |u_{k,l}(r)|^2 dr = 1$

NA PARTE CONTÍNUA DO ESPECTRO:

$$\int_0^\infty r^2 R^*_{k',l}(r) R_{k,l}(r)\, dr = \int_0^\infty u^*_{k'l}(r)\, u_{k,l}(r)\, dr =$$

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

$\{H, L^2, L_z\}$ formam um C.C.O.C.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r)\right]R_{k,l}(r) = E_{k,l}R_{k,l}(r)$$

PARA CADA (l, m), TOME UM AUTO-VALOR $E_{k,l}$ DO ESPECTRO, A EQ. RADIAL, QUE É UMA EDO DE 2ª ORDEM TEM 2 SOLUÇÕES L.I. PORÉM UMA DELAS TEM O JÁ VISTO COMPORTAMENTO NÃO ACEITÁVEL FISICAMENTE:

$$R_{k,l}(r) \sim \frac{C}{r^{(l+1)}}$$

APENAS A SOLUÇÃO $R_{k,l}(r) \sim C\, r^{l}$ É FISICAMENTE ACEITÁVEL: SÓ HÁ UMA SOLUÇÃO: $\{H, L^2, L_z\}$ FORMAM UM CCOC.