F 789 – Mecânica Quântica II

1º Semestre de 2023
13/03/2023
Aula 3

Aula passada

Potencial central, análise quântica: equação de Schrödinger ind. do tempo

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\overbrace{\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]}^{-L^2/\hbar^2}+V(r)\right]\varphi(\mathbf{r})=E\varphi(\mathbf{r})$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r+\frac{L^2}{2\mu r^2}+V(r)\right]\varphi(\mathbf{r})=E\varphi(\mathbf{r})$$

Quantidades conservadas: L^2, L_z ; $[H,L^2]=[H,L_z]=0$

- $\{H, L^2, L_z\}$ podem ser diagonalizadas simultaneamente e formam um C.C.O.C:

$$H\varphi_{k,l,m}(\mathbf{r})=E_{k,l}\varphi_{k,l,m}(\mathbf{r})$$

$$L^2\varphi_{k,l,m}(\mathbf{r})=l(l+1)\hbar^2\varphi_{k,l,m}(\mathbf{r}),\quad (l=0,1,2,3\ldots)$$

$$L_z\varphi_{k,l,m}(\mathbf{r})=m\hbar\varphi_{k,l,m}(\mathbf{r}),\qquad (m=-l,-l+1,\ldots,l-1,l)$$

Aula passada

- As auto-funções simultâneas de $\{H, L^2, L_z\}$ são do tipo:

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

- $Y_{l,m}(\theta,\phi)$ são os harmônicos esféricos:

$$L^2 Y_{l,m}(\theta,\phi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{l,m}(\theta,\phi)\,, \quad (l = 0,1,2,3\ldots)$$
$$L_z Y_{l,m}(\theta,\phi) = m\hbar Y_{l,m}(\theta,\phi)\,, \qquad (m = -l, -l+1, \ldots, l-1, l)$$

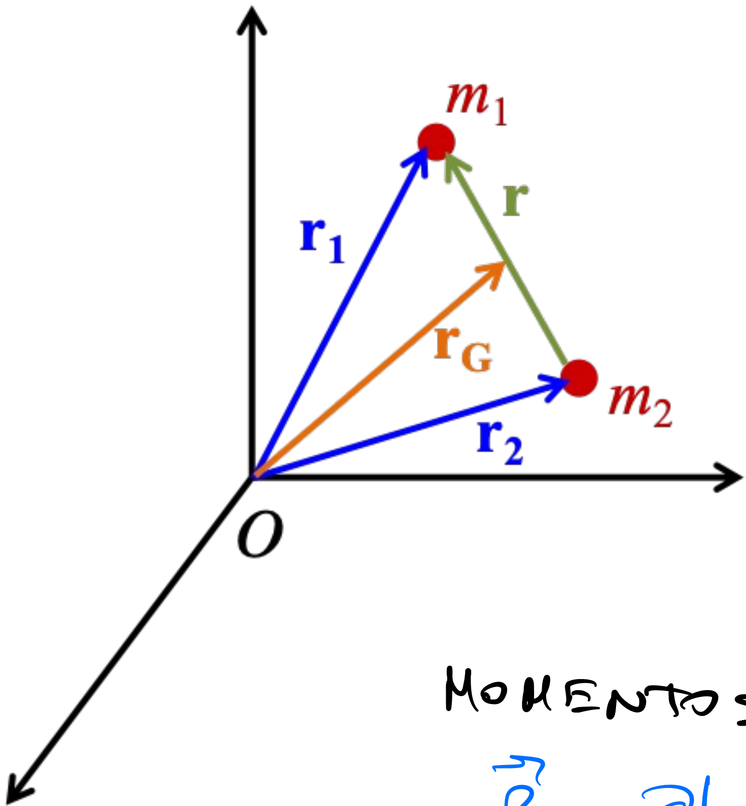
- Funções radiais:

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

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

- Comportamento na origem: $R_{k,l}(r) \to r^l,\ u_{k,l}(r) \to r^{(l+1)}$ quando $r \to 0$

O problema de dois corpos



Análise clássica:

POTENCIAL QUE SÓ DEPENDE DA DISTÂNCIA ENTRE ELAS:

$$V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$$

LAGRANGIANA:

$$L = T - V = \frac{1}{2} m_1 \dot{\vec{r}}_1^{\,2} + \frac{1}{2} m_2 \dot{\vec{r}}_2^{\,2} - V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$$

MOMENTOS CANONICAMENTE CONJUGADOS:

$$\vec{p}_1 = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}_1} = m_1 \dot{\vec{r}}_1 \quad \text{E} \quad \vec{p}_2 = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}_2} = m_2 \dot{\vec{r}}_2$$

COORDENADA DO CENTRO DE MASSA:

$$\vec{r}_G = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{M}, \quad M = m_1 + m_2$$

COORDENADA RELATIVA: $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$

TRANSFORMAÇÃO INVERSA:

$$\vec{r}_1 = \vec{r}_G + \frac{m_2}{M}\vec{r} \qquad \vec{r}_2 = \vec{r}_G - \frac{m_1}{M}\vec{r}$$

TROCANDO COORDENADAS NA LAGRANGIANA:

$$L = \underbrace{\frac{M}{2}\dot{\vec{r}}_G^{\,2}}_{L_G} + \underbrace{\frac{\mu}{2}\dot{\vec{r}}^{\,2} - V(r)}_{L_r} \qquad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

= MASSA REDUZIDA

A LAGRANGIANA SE DESACOPLA:

EQS. DE EULER-LAGRANGE

$$\frac{d}{dt}\left[\frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}_G}\right] - \frac{\partial L}{\partial \vec{r}_G} = 0 \Rightarrow \frac{d}{dt}\left[M\dot{\vec{r}}_G\right] = 0 \Rightarrow \dot{\vec{r}}_G = \text{CONST.}$$

$$\frac{d}{dt}\left[\frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}}\right] - \frac{\partial L}{\partial \vec{r}} = 0 \Rightarrow \boxed{\mu\ddot{\vec{r}} = -\frac{\partial V}{\partial r}\hat{r}}$$

FORMALISMO HAMILTONIANO:

$$\vec{p}_1 = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}_1} = m_1 \dot{\vec{r}}_1 \qquad \vec{p}_2 = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}_2} = m_2 \dot{\vec{r}}_2$$

$$H = \vec{p}_1 \cdot \dot{\vec{r}}_1 + \vec{p}_2 \cdot \dot{\vec{r}}_2 - L = \frac{\vec{p}_1^{\,2}}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^{\,2}}{2m_2} + V(r)$$

EM TERMOS DAS NOVAS COORDENADAS:

$$\vec{p}_G = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}_G} = M \dot{\vec{r}}_G$$

$$= \underbrace{m_1 \dot{\vec{r}}_1}_{\vec{p}_1} + \underbrace{m_2 \dot{\vec{r}}_2}_{\vec{p}_2}$$ = MOMENTO LINEAR TOTAL

$$\vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}} = \mu \dot{\vec{r}} = \frac{m_1 m_2}{M} \left(\dot{\vec{r}}_1 - \dot{\vec{r}}_2 \right) = \frac{m_2}{M} \vec{p}_1 - \frac{m_1}{M} \vec{p}_2$$

QUE É CHAMADO DE MOMENTO RELATIVO

$$H = \dot{\vec{r}}_G \cdot \vec{p}_G + \dot{\vec{r}} \cdot \vec{p} - L = \overbrace{\frac{\vec{p}_G^{\,2}}{2M}}^{H_G} + \overbrace{\frac{\vec{p}^{\,2}}{2\mu} + V(r)}^{H_r} \equiv H_G + H_r$$

Análise quântica

REGRAS DE QUANTIZAÇÃO:

$$\vec{r}_1 \to \vec{R}_1 \qquad \vec{r}_2 \to \vec{R}_2 \qquad \vec{p}_1 \to \vec{P}_1 \qquad \vec{p}_2 \to \vec{P}_2$$

REGRAS DE COMUTAÇÃO:

$$[X_1, P_{1x}] = i\hbar = [Y_1, P_{1y}] = [Z_1, P_{1z}] = [X_2, P_{2x}] = [Y_2, P_{2x}] = [Z_2, P_{2z}]$$

E TODOS OS OUTROS SE ANULAM:

$$[X_1, P_{1y}] = [X_1, Y_1] = [X_2, P_{2y}] = [X_1, X_2] = \dots = 0$$

PARA AS NOVAS COORDENADAS:

$$\vec{R}_G = \frac{m_1 \vec{R}_1 + m_2 \vec{R}_2}{M} \qquad \vec{R} = \vec{R}_1 - \vec{R}_2$$

$$\vec{P}_G = \vec{P}_1 + \vec{P}_2 \quad ; \quad \vec{P} = \frac{m_2}{M}\vec{P}_1 - \frac{m_1}{M}\vec{P}_2$$

COMUTADORES: $[X_G, P_{Gx}] = i\hbar = [Y_G, P_{Gy}] = [Z_G, P_{Gz}]$

E OS CRUZADOS SE ANULAM. $[X_G, P_{Gz}] = 0 \ \ldots$

$[X, P_x] = i\hbar = [Y, P_y] = [Z, P_z]$ E OS OUTROS SE ANULAM. FINALMENTE, QUALQUER COMUTADOR ENTRE OPERADORES DO C.M. E OPERADORES DA COORD. RELATIVA SE ANULAM.

HAMILTONIANO QUÂNTICO:

$$H = \underbrace{\frac{\vec{P}_G^2}{2M}}_{H_G} + \underbrace{\frac{\vec{P}^2}{2\mu} + V(R)}_{H_r} \Rightarrow [H_G, H_r] = 0$$

E AS DINÂMICAS SE DESACOPLAM.

EQ. DE SCHRÖDINGE INDEPENDENTE DO TEMPO (NA REPRESENTAÇÃO DE COORDENADAS):

$$\psi_E(\vec{r}_G,\vec{r}) \equiv \psi_E(x_G, y_G, z_G, x, y, z)$$

$$\vec{P}_G = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_G \rightarrow \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial x_G}, \frac{\partial}{\partial y_G}, \frac{\partial}{\partial z_G}\right)$$

$$\vec{P} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_R \rightarrow \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$\vec{R}_G \xrightarrow{\text{MULTIPLICAÇÃO POR}} (x_G, y_G, z_G) \qquad \vec{R} \xrightarrow{\text{MULTIPLICAÇÃO POR}} (x, y, z)$$

RELEMBRANDO: ESTADO $|\psi\rangle$

NA REPRESENTAÇÃO DE POSIÇÃO: $\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$

$$\langle x|P_x|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}, \ldots$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_G^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_R^2 + V(r)\right]\psi_E(\vec{r}_G,\vec{r}) = E\,\psi_E(\vec{r}_G,\vec{r})$$

SEPARAÇÃO DE VARIÁVEIS:

$$\psi_E(\vec{r}_G,\vec{r}) = \chi_G(\vec{r}_G)\varphi_r(\vec{r})$$

$$\varphi_r(\vec{r})\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_G^2\chi_G\right] + \chi_G(\vec{r}_G)\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_R^2\varphi_r(\vec{r}) + V(\vec{r})\varphi_r(\vec{r})\right] =$$

$$= E\,\chi(\vec{r}_G)\varphi_r(\vec{r})$$

DIVIDO POR $\chi_G(\vec{r}_G)\varphi_r(\vec{r})$:

$$\underbrace{\frac{1}{\chi_G}\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_G^2\chi_G\right]}_{E_G} + \underbrace{\frac{1}{\varphi_r(\vec{r})}\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_R^2\varphi_r(\vec{r}) + V(r)\varphi_r(\vec{r})\right]}_{E_r} = E$$

$$\Rightarrow E = E_G + E_r$$

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_G^2\chi_G(\vec{r}_G) = E_G\,\chi_G(\vec{r}_G)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_R^2 + V(r)\right]\varphi_r(\vec{r}) = E_r\varphi_r(\vec{r})$$

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_G^2 \chi_G(\vec{r}_G) = E_G\, \chi_G(\vec{r}_G)$$ PARTÍCULA LIVRE

SOLUÇÃO: ONDAS PLANAS

$$\chi_G^{(\vec{p}_G)}(\vec{r}_G) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\vec{p}_G\cdot\vec{r}_G/\hbar}$$

$$E_G = \frac{p_G^2}{2M}$$

A PARTE NÃO TRIVIAL É:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_R^2 + V(r)\right]\varphi_r(\vec{r}) = E_r\,\varphi_r(\vec{r})$$

QUE É A EQUAÇÃO QUE ANALISAMOS NAS DUAS PRIMEIRAS AULAS.

O átomo de hidrogênio

Um próton e um elétron orbitando um em volta do outro:

$$m_e = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$$
$$m_p = 1.7 \times 10^{-27} \text{ kg} \approx 1800\ m_e$$
$$q_p = -q_e \equiv q = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$$

$m_2 = m_p >> m_1 = m_e$

$\mu = m_e$

O potencial de interação coulombiana:

$$V(r) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r} \equiv -\frac{e^2}{r}$$

$$e^2 = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0}$$

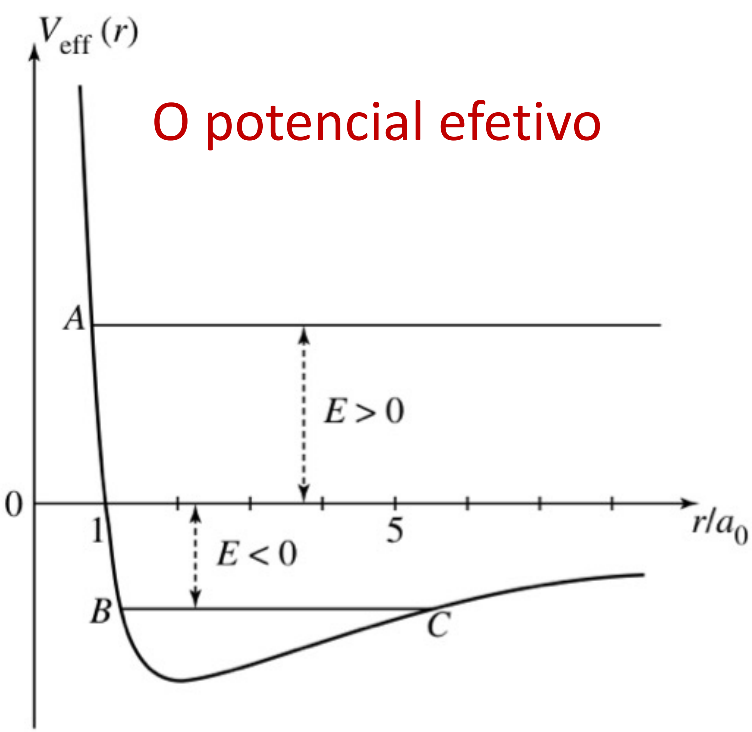
O POTENCIAL EFETIVO:

$$V_{eff}(r) = \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r}$$

Equação radial para o átomo de H

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

$$u_{k,l}\,(r)\rightarrow r^{(l+1)}\ \text{quando}\ r\rightarrow 0$$



O potencial efetivo

ANÁLISE QUALITATIVA DESSE POTENCIAL $V_{eff}(r)$ NOS DÁ...

$E<0$: ESTADOS NORMALIZÁVEIS (QUADRADO INTEGRÁVEL) E ESPECTRO DISCRETO.

$E>0$: ESTADOS NÃO NORMALIZÁVEIS, ESPECTRO CONTÍNUO

Troca de variáveis

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \approx 0.52\ \text{Å} \ \ \text{(raio de Bohr)}$$

$$E_I = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \approx 13.6\ \text{eV}$$

Equação radial:

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

$E_{k\ell} = -|E_{k\ell}|$

ESPECTRO DISCRETO

DIVIDO A EQ. RADIAL POR E_I:

$$\left[-\frac{\hbar^4}{\mu^2 e^4}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^4}{\mu^2 e^4 r^2} - \frac{2\hbar^2}{\mu e^2 r}\right] u_{k,\ell}(r) = -\underbrace{\frac{|E_{k,\ell}|}{E_I}}_{\lambda^2_{k,\ell}} u_{k,\ell}(r)$$

TROCO VARIÁVEIS: $\rho = \frac{r}{a_0} = \frac{\mu e^2}{\hbar^2} r$

$$\Rightarrow \boxed{\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \lambda^2_{k,\ell}\right]\bar{u}_{k,\ell}(\rho) = 0}$$

EQ. RADIAL ADIMENSIONAL

$$\bar{u}_{k,\ell}(\rho) = u_{k,\ell}(r)$$

CONDIÇÃO DE CONTORNO: $\bar{u}_{k,\ell}(\rho) \xrightarrow[\rho \to 0]{} \rho^{(\ell+1)}$