Notas: Mecânica Quântica - MQ

André V. Silva

1 de dezembro de 2025

MQ → Teoria fundamental para compreensão dos fenômenos físicos.

MQ descreve a interação entre matéria e radiação

Século XIX eram descritas por teorias distintas:

- Corpos Materiais: Leis da Mecânica Newtoniana
- Radiaçcão: Teoria Eletromagnética
- interação radiação-materia: Força de Lorentz.

Os fenômenos que deram origem a teoria da MQ foram:

- Radiação de Corpo Negro
- Efeito Fotoelétrico
- Efeito Comptom

2. Bound state of a particle in a "delta function potential"

Consider a particle whose Hamiltonian H [operator defined by formula (D-10) of chapter I] is:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - \alpha\delta(x),$$

where α is a positive constant whose dimensions are to be found.

(a) Integrate the eigenvalue equation of H between $-\epsilon$ and $+\epsilon$. Letting $\epsilon \to 0$, show that the derivative of the eigenfunction $\varphi(x)$ presents a discontinuity at $x = 0$ and determine it in terms of α, m, and $\varphi(0)$.

Resolução:

A equação de Schrödinger independente do tempo é:

$$H\varphi(x) = E\varphi(x),$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} - \alpha\delta(x)\varphi(x) = E\varphi(x),$$

onde E é a energia da partícula. Vamos integrar essa equação em torno de $x = 0$.

Integração da equação: Integrando ambos os lados da equação de Schrödinger em $x \in [-\epsilon, +\epsilon]$, temos:

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} - \alpha\delta(x)\varphi(x)\right]dx = \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} E\varphi(x)dx.$$

1. O termo com $\delta(x)$:

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\delta(x)\varphi(x)dx = \varphi(0),$$

pois $\delta(x)$ só contribui em $x = 0$.

2. O termo com $\frac{d^2\varphi}{dx^2}$:

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\frac{d^2\varphi}{dx^2}dx = \left.\frac{d\varphi}{dx}\right|_{x=0^+} - \left.\frac{d\varphi}{dx}\right|_{x=0^-}.$$

3. Como $\epsilon \to 0$, o termo $\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} E\varphi(x)dx$ tende a zero.

Assim, temos:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left.\frac{d\varphi}{dx}\right|_{x=0^+} - \left.\frac{d\varphi}{dx}\right|_{x=0^-}\right] = -\alpha\varphi(0).$$

Resultado: A descontinuidade da derivada é:

$$\left.\frac{d\varphi}{dx}\right|_{x=0^+} - \left.\frac{d\varphi}{dx}\right|_{x=0^-} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\varphi(0).$$

(b) Assume that the energy E of the particle is negative (bound state). The eigenfunction $\varphi(x)$ can then be written:

$$\varphi(x) = \begin{cases} A_1 e^{\rho x} + A_1' e^{-\rho x}, & x < 0, \\ A_2 e^{\rho x} + A_2' e^{-\rho x}, & x > 0. \end{cases}$$

Express the constant ρ in terms of E and m. Using the results of the preceding question, calculate the matrix M defined by:

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ A_2' \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_1 \\ A_1' \end{pmatrix}.$$

Then, using the condition that $\varphi(x)$ must be square-integrable, find the possible values of the energy. Calculate the corresponding normalized wave functions.

Resolução:

A função de onda $\varphi(x)$ para $E < 0$ (estado ligado) é escrita como:

$$\varphi(x) = \begin{cases} A_1 e^{\rho x} + A_1' e^{-\rho x}, & x < 0, \\ A_2 e^{\rho x} + A_2' e^{-\rho x}, & x > 0, \end{cases} \tag{1}$$

onde $\rho > 0$ é uma constante relacionada à energia E.

Determinando ρ

Para $x \neq 0$, o potencial $-\alpha\delta(x)$ não contribui, e a equação de Schrödinger é:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = E\varphi(x). \tag{2}$$

Rearranjando:

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = -\frac{2m|E|}{\hbar^2}\varphi(x), \tag{3}$$

onde $E = -|E|$, pois o estado é ligado ($E < 0$).

A solução geral dessa equação diferencial é exponencial:

$$\varphi(x) \propto e^{\pm\rho x}, \quad \text{com } \rho = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}. \tag{4}$$

Condição de continuidade em $x = 0$

A função de onda $\varphi(x)$ deve ser contínua em $x = 0$. Assim:

$$\varphi(0^-) = \varphi(0^+). \tag{5}$$

Substituindo:

$$A_1 + A_1' = A_2 + A_2'. \tag{6}$$

Condição de descontinuidade da derivada

A descontinuidade da derivada é dada por:

$$\left.\frac{d\varphi}{dx}\right|_{x=0^+} - \left.\frac{d\varphi}{dx}\right|_{x=0^-} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\varphi(0). \tag{7}$$

Calculando as derivadas:

- Para $x > 0$:

$$\left.\frac{d\varphi}{dx}\right|_{x=0^+} = \rho A_2 - \rho A_2'. \tag{8}$$

- Para $x < 0$:

$$\left.\frac{d\varphi}{dx}\right|_{x=0^-} = \rho A_1' - \rho A_1. \tag{9}$$

Substituindo na equação da descontinuidade:

$$(\rho A_2 - \rho A_2') - (\rho A_1' - \rho A_1) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\varphi(0). \tag{10}$$

Reorganizando:

$$\rho(A_2 - A_2' - A_1' + A_1) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\varphi(0). \tag{11}$$

Como $\varphi(0) = A_1 + A_1' = A_2 + A_2'$, temos:

$$\rho(A_2 - A_2' - A_1' + A_1) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}(A_1 + A_1'). \tag{12}$$

Construção da matriz M

A matriz M é definida como:

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ A_2' \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_1 \\ A_1' \end{pmatrix}, \tag{13}$$

$$A_2 = M_{11}A_1 + M_{12}A_1' \tag{14}$$

$$A_2' = M_{21}A_1 + M_{22}A_1' \tag{15}$$

com M escrita explicitamente a partir das condições de continuidade e descontinuidade. Da continuidade:

$$A_1 + A_1' = A_2 + A_2', \quad \text{ou seja, } A_2 = A_1 + A_1' - A_2'. \tag{16}$$

$$A_1 + A_1' = A_2 + A_2', \quad \text{ou seja, } A_2' = A_1 - A_2 - A_1'. \tag{17}$$

Da descontinuidade da derivada:

$$\rho(A_2 - A_2' - A_1' + A_1) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}(A_1 + A_1'). \tag{18}$$

Substituindo A_2 em função de A_1, A_1' e A_2', temos:

$$\rho\Big[(A_1 + A_1' - A_2') - A_2' - A_1' + A_1\Big] = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}(A_1 + A_1'). \tag{19}$$

Simplificando:

$$2\rho A_1 - 2\rho A_2' = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}(A_1 + A_1'). \tag{20}$$

$$-2\rho A_2' = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}(A_1 + A_1') - 2\rho A_1 \tag{21}$$

$$A_2' = \frac{m\alpha}{\hbar^2 \rho}(A_1 + A_1') + A_1 \tag{22}$$

$$\boxed{A_2' = \left(\frac{m\alpha}{\hbar^2 \rho} + 1\right) A_1 + \frac{m\alpha}{\hbar^2 \rho} A_1'} \tag{23}$$

$$\boxed{A_2' = M_{21} A_1 + M_{22} A_1'} \tag{24}$$

Da descontinuidade da derivada:

$$\rho(A_2 - A_2' - A_1' + A_1) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}(A_1 + A_1'). \tag{25}$$

Substituindo A_2' em função de A_1, A_1' e A_2, temos:

$$\rho\Big[(A_2 - A_2' - A_1' + A_1\Big] = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}(A_1 + A_1'). \tag{26}$$

$$\rho\Big[(A_2 - A_1 + A_2 - A_1' - A_1' + A_1\Big] = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}(A_1 + A_1'). \tag{27}$$

$$2\rho\Big[(A_2 - A_1'\Big] = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}(A_1 + A_1'). \tag{28}$$

$$\boxed{A_2 = -\frac{m\alpha}{\hbar^2\rho}A_1 + \left(1 - \frac{m\alpha}{\hbar^2\rho}\right)A_1'} \tag{29}$$

$$\boxed{A_2 = M_{11}A_1 + M_{12}A_1'} \tag{30}$$

Simplificando:

Reorganizando os termos, obtemos A_2 e A_2' em função de A_1 e A_1', definindo assim os elementos de M:

$$M = \begin{pmatrix} -\frac{m\alpha}{\hbar^2\rho} & \left(1 - \frac{m\alpha}{\hbar^2\rho}\right) \\ \left(\frac{m\alpha}{\hbar^2\rho} + 1\right) & \frac{m\alpha}{\hbar^2\rho} \end{pmatrix}. \tag{31}$$

(c) Trace these wave functions graphically. Give an order of magnitude for their width Δx.

Resolução:

Trace as funções de onda $\varphi(x)$ para os valores permitidos de E. A largura Δx pode ser estimada como:

$$\Delta x \sim \frac{1}{\rho} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m|E|}}.$$

(d) What is the probability $\mathcal{P}(p)$ that a measurement of the momentum of the particle in one of the normalized stationary states calculated above will give a result included between p and $p + dp$? For what value of p is this probability maximum? In what domain, of dimension Δp, does it take on non-negligible values? Give an order of magnitude for the product $\Delta x \cdot \Delta p$.

Resolução:

A probabilidade $\mathcal{P}(p)$ de encontrar o momento entre p e $p + dp$ é dada pela transformada de Fourier da função de onda:

$$\mathcal{P}(p) \propto \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x) e^{-ipx/\hbar} dx \right|^2 .$$

Passos: 1. Calcule $\mathcal{P}(p)$ explicitamente para $\varphi(x)$. 2. Encontre o valor de p para o qual $\mathcal{P}(p)$ é máxima. 3. Determine a largura Δp onde $\mathcal{P}(p)$ é significativa.

Incerteza: A relação de incerteza deve ser verificada:

$$\Delta x \cdot \Delta p \sim \hbar.$$