Aula 11 (25/Fev)

<u>Na aula de hoje:</u>

* Revisão da aula anterior.
* Produto escalar em $\mathcal{F}$.
* Bases de $\mathcal{F}$.
* Operadores lineares em $\mathcal{F}$

—————— // ——————

<u>Revisão da aula anterior</u>

* Salto de potencial com $E > V_0$ e $E < V_0$.
* Espaço das funções de onda $\mathcal{F}$.
* Estrutura de $\mathcal{F}$.

—————— // ——————

4.1 Espaço das funções de onda (de uma partícula): (cont.)

$N_\psi = (\psi, \psi)$

4.1.2) Produto escalar em $\mathcal{F}$

Definimos produto escalar entre 2 funções de $\mathcal{F}$, $\phi(\vec{r})$ e $\psi(\vec{r})$, como

$$(\cdot,\cdot) : \mathcal{F}, \mathcal{F} \longrightarrow \mathbb{C}$$

$$\phi, \psi \longrightarrow \boxed{(\phi, \psi) = \int d^3\vec{r}\ \phi^*(\vec{r}) . \psi(\vec{r})}$$

Assim, a norma ao quadrado de uma f.o. ψ, i.e. N_ψ, é produto escalar de ψ consigo próprio,

$$N_\psi^2 = (\psi, \psi) = \int d^3\vec{r}\ \psi^*(\vec{r})\, \psi(\vec{r}) = \int d^3\vec{r}\ |\psi(\vec{r})|^2$$

Norma de um número complexo $z = x + iy$ é um número real positivo,

$$|x+iy| = \sqrt{x^2+y^2} \in \mathbb{R}^+$$

Propriedades do produto escalar:

(i) Não é simétrico: $(\phi, \psi) = (\psi, \phi)^*$

$$(\psi, \phi)^* = \left[\int d^3\vec{r}\ \psi^*(\vec{r})\phi(\vec{r})\right]^* = \int d^3\vec{r}\ \overbrace{(\psi^*(\vec{r}))^*}^{\psi(\vec{r})} . \phi^*(\vec{r})$$

$$= \int d^3\vec{r}\ \psi(\vec{r}) . \phi^*(\vec{r}) = (\phi, \psi)$$

(ii) Linear no 2º argumento:

$$(\phi, \alpha_1 \psi_1 + \alpha_2 \psi_2) = \alpha_1 (\phi, \psi_1) + \alpha_2 (\phi, \psi_2)$$

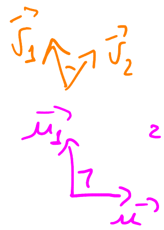
(iii) Anti-linear no 1º argumento:

$$(\alpha_1 \phi_1 + \alpha_2 \phi_2, \psi) = \alpha_1^* (\phi_1, \psi) + \alpha_2^* (\phi_2, \psi)$$

(iv) Duas funções $\phi(\vec{r})$ e $\psi(\vec{r})$ são ortogonais se

$$(\phi, \psi) = 0.$$

Nota: Análogo ao conceito de ortogonalidade entre vectores



$\vec{v}_1 \cdot \vec{v}_2 \neq 0$

$\vec{u}_1 \cdot \vec{u}_2 = 0$

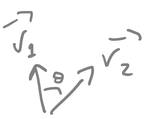
(v) Norma de ψ é $N_\psi = \sqrt{(\psi, \psi)}$, sendo é real, positiva ou zero.

$$(\psi, \psi) = \int d^3\vec{r} \underbrace{|\psi(\vec{r})|^2}_{\geq 0 \ \forall \vec{r}}$$

(vi) Obedece à desigualdade de Schwarz, ou seja, é finito,

$$|(\psi_1, \psi_2)| \leq \sqrt{(\psi_1, \psi_1)} \cdot \sqrt{(\psi_2, \psi_2)} = N_{\psi_1} \cdot N_{\psi_2} < \infty$$

Nota: Desigualdade de Schwarz num espaço vectorial 2D



$$\Rightarrow |\vec{v}_1 \cdot \vec{v}_2| = |\vec{v}_1| . |\vec{v}_2| \underbrace{|\cos\theta|}_{} \leq |v_1| . |v_2|$$

↳ $0 \leq |\cos\theta| \leq 1$

4.2 Bases de $\mathcal{F}$

Funções de onda vivem em espaço vectorial, logo é natural definir uma base para escrever f.o.

É um conjunto completo de funções em que podemos expandir de modo único cada $\psi \in \mathcal{F}$.

4.2.1) Bases ortonormais discretas em $\mathcal{F}$

Consideremos um conjunto de funções de onda $u_i(\vec{r}) \in \mathcal{F}$, onde $i = 1, 2, 3, \ldots$

→ notação para "conjunto de funções onde $u_i(\vec{r})$ com $i = 1, 2, 3, \ldots$".

* Este $\{u_i(\vec{r})\}$ será base do $\mathcal{F}$ se toda e qualquer função de $\mathcal{F}$ puder ser expandida unicamente em termos dos $u_i(\vec{r})$, i.e.

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i \underbrace{c_i}\, u_i(\vec{r}) = c_1 u_1(\vec{r}) + c_2 u_2(\vec{r}) + c_3 \cdot u_3(\vec{r}) + \ldots$$

→ componentes da f.o. na base $\{u_i(\vec{r})\}$; são em geral números complexos.

* A base $\{u_i(\vec{r})\}$ será base ortonormal se as f.o. da base, $u_i(\vec{r})$, forem mutuamente ortogonais e normalizadas, i.e.

$$(u_i, u_j) = \delta_{ij} = \begin{cases} 0, & \text{se } i \neq j \\ 1, & \text{se } i = j \end{cases}$$

* Os componentes de f.o. ψ na base $\{u_i\}$, i.e. os c_i, são dados por

$$(u_i, \psi) = \int d^3\vec{r} \; u_i^*(\vec{r}) \cdot \underbrace{\psi(\vec{r})}_{= \sum_j c_j u_j(\vec{r})}$$

$$= \int d^3\vec{r} \; u_i^*(\vec{r}) \sum_j c_j u_j(\vec{r})$$

$$= \sum_j c_j \int d^3\vec{r} \; u_i^*(\vec{r}) \cdot u_j(\vec{r})$$

$$= \sum_j c_j (u_i, u_j)$$

$$= \sum_j c_j \cdot \delta_{ij}$$

$$= c_i$$

Nota: Inteiramente análogo a vectores em 3D ou 2D

$\hookrightarrow \vec{v} = \alpha \hat{e}_x + \beta \hat{e}_y \Rightarrow \left\| \begin{array}{l} \alpha = \hat{e}_x \cdot \vec{v} \\ \beta = \hat{e}_y \cdot \vec{v} \end{array} \right.$

Nota: Os coeficientes de $\psi(\vec{r})$ vão ser diferentes em diferentes bases, tal como acontece com vectores em 2D ou 3D,

$$\vec{v} = \alpha . \hat{e}_x + \beta \hat{e}_y = \alpha' \hat{e}_\omega + \beta' \hat{e}_\xi$$

$$\Rightarrow \left| \begin{array}{l} \alpha \neq \alpha' \\ \beta \neq \beta' \end{array} \right.$$

* Produto escalar (ϕ, ψ) pode ser expresso, se $\phi(\vec{r}) = \sum_i b_i u_i(\vec{r})$ e $\psi(\vec{r}) = \sum_j c_j u_j(\vec{r})$, como

$$(\phi, \psi) = \int d^3\vec{r} \; \phi^*(\vec{r}) . \psi(\vec{r})$$

$$= \int d^3\vec{r} \sum_{i,j} b_i^* . c_j \; u_i^*(\vec{r}) . u_j(\vec{r})$$

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

$$= \sum_{ij} b_i^* c_j \; \delta_{ij}$$

$$= \sum_i b_i^* c_i$$

* A norma da f. o $\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r})$ será

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

* A relação de fecho, que expressa o facto de o conjunto $\{u_i(\vec{r})\}$ ser uma base, pode ser obtida fazendo,

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r}) = \sum_i \underbrace{(u_i, \psi)}_{\parallel} . u_i(\vec{r})$$

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

$$= \int d\vec{r}\,' . \psi(\vec{r}\,') . \underbrace{\left[\sum_i u_i^*(\vec{r}\,') . u_i(\vec{r}) \right]}_{\text{"} \delta(\vec{r}\,' - \vec{r})}$$

→ por consistência (i.e para termos o mesmo no início e no fim)

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

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

e assim, a relação de fecho será

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

4.2.2) "Bases" não pertencentes a $\mathcal{F}$

As funções $u_i(\vec{r})$ da secção anterior pertencem a $\mathcal{F}$. Mas por vezes é útil trabalhar com base de $\mathcal{F}$ composta por funções não pertencentes a $\mathcal{F}$.

↳ Vejamos dois exemplos que nos são bem familiares.

4.2.2.1) Ondas planas

Consideremos o caso 1D por simplicidade. Definamos um conjunto de funções $v_p(x)$ como

$$v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} ,$$

que sabemos não serem normalizáveis ou seja $v_p(x) \notin L^2$, pois

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |v_p(x)|^2 . dx = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} 1 . dx = \infty ,$$

logo $v_p(x) \notin L^2 \Rightarrow v_p(x) \notin \mathcal{F}$.

Consideramos todo o conjunto de ondas planas $\{v_p(x)\}$, onde p é um índice que varia continuamente entre $-\infty$ e $+\infty$.

Podemos escrever a Transf. Fourier de uma função $\psi(x)$ como

Note que estamos a usar $p = \hbar k$ em vez de k

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \, . \, \hat{\psi}(p) \, e^{ipx/\hbar}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dp \, . \, \hat{\psi}(p) \, . \, v_p(x) \qquad (1)$$

A Transf. Fourier inversa é dada por

$$\hat{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, . \, \psi(x) \, . \, e^{-ipx/\hbar}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \; v_p^*(x) \, . \, \psi(x) = (v_p, \psi) \qquad (2)$$

As duas expressões em cima, (1) e (2), são análogas a duas expressões que acabamos de obter no contexto de bases discretas,

$$(1) \longleftrightarrow \psi(x) = \sum_i c_i u_i(x)$$

$$(2) \longleftrightarrow c_i = (u_i, \psi)$$

Podemos também escrever o análogo de $(\psi,\psi) = N_\psi^2 = \sum_i |c_i|^2$ (obtido anteriormente para uma base discreta), para o caso de base de ondas planas $v_p(x)$

$$(\psi,\psi) = \int dx\, \psi^*(x)\, \psi(x)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dp\, \hat{\psi}^*(p)\, v_p^*(x) \int_{-\infty}^{+\infty} dp'\, \hat{\psi}(p')\, v_{p'}(x)$$

$$= \underbrace{\frac{1}{2\pi\hbar} \iint dp\, dp'\, \hat{\psi}^*(p)\, \hat{\psi}(p') \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, e^{i(p-p')x/\hbar}}_{= \delta(p-p')}$$

$$= \int dp\, \hat{\psi}^*(p)\, \psi(p)$$

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

Podemos também escrever relação de "ortonormalização" entre os $v_p(x)$, análoga a $(u_i, u_j) = \delta_{ij}$ na base discreta, como

$$(v_p, v_{p'}) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \; v_p^*(x) \, . \, v_{p'}(x)$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \; e^{i(p'-p)x/\hbar}$$

$$= \delta(p'-p) = \begin{cases} 0 \;, & \text{se } p \neq p' \\ \underbrace{\delta(0) = \infty}_{}, & \text{se } p = p' \end{cases}$$

↳ o facto de aqui não termos $\underline{\underline{1}}$ resulta de os $v_p(x) \notin \mathcal{F}$.

Relação de fecho análoga ao caso discreto, $\sum_i u_i^*(\vec{r}\,') \, u_i(\vec{r}) = \delta(\vec{r}\,' - \vec{r})$, é obtida,

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \; \hat{\psi}(p) \; v_p(x)$$

$$= (v_p, \psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} v_p^*(x') \, \psi(x') \, dx'$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \, \psi(x') \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dp \;\; v_p^*(x') \; v_p(x)}_{= \delta(x-x')}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \, \psi(x') \, . \, \delta(x - x') = \psi(x) \, .$$

Então a relação de fecho será

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} dp\, v_p^*(x')\, v_p(x) = \delta(x-x')}$$

Concluimos então $\{v_p(x)\}$ formam uma "base" contínua "ortonormal" de $\mathcal{F}$.

<u>Nota</u>: Relembre $v_p(x) \notin \mathcal{F}$.

<u>Nota</u>: Os $v_p(x)$ não são ortonormais.

<u>Nota</u>: Podemos resumir a passagem en o caso discreto e o caso contínuo (seja com 1 índice contínuo, ou com mais) como,

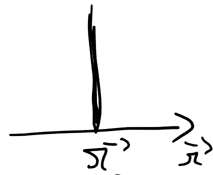
$$i \longleftrightarrow p \longleftrightarrow \vec{p}$$

$$\sum_i \longleftrightarrow \int dp \longleftrightarrow \int d^3\vec{p}$$

$$\delta_{ij} \longleftrightarrow \delta(p-p') \longleftrightarrow \delta(\vec{p}-\vec{p}\,')$$

4.2.2.2) Deltas de Dirac

As funções delta Dirac $\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)$ são outro exemplo de uma "base" "ortonormal" contínua de $\mathcal{F}$



$$\begin{cases} 0, & \vec{r}\neq\vec{r}_0 \\ \infty, & \vec{r}=\vec{r}_0 \end{cases}$$

Por simplicidade, trabalhemos em 1D,

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

onde $x_0\in\,]-\infty,+\infty[$. As funções $\xi_{x_0}(x)$ não pertencem a $\mathcal{F}$ pois

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\xi_{x_0}(x)|^2\,dx=\int\left[\delta(x-x_0)\right]^2dx=\infty.$$

É possível mostrar que mesmo que $\xi_{x_0}(x)\notin\mathcal{F}$, estas formam uma base de $\mathcal{F}$, isto é, podemos expandir toda e qualquer função de $\mathcal{F}$ em termos de $\xi_{x_0}(x)$, de uma forma única,

$$\star\quad \psi(x)=\int dx_0\,\psi(x_0)\cdot\overbrace{\xi_{x_0}(x)}^{\delta(x-x_0)}$$

$$= \int dx_0\, \psi(x_0) \cdot \delta(x - x_0) = \psi(x)$$

* $\psi(x_0) = (\xi_{x_0}, \psi) = \int dx\, \xi^*_{x_0}(x) \cdot \psi(x)$

* $(\xi_{x_0}, \xi_{x_0'}) = \dots = \delta(x_0 - x_0') = \begin{cases} 0, & x_0 \neq x_0' \\ \underline{\underline{\infty}}, & x_0 = x_0' \end{cases}$

→ o facto de aqui não termos $\underline{\underline{1}}$ resulta de os $\xi_{x_0}(x) \notin \mathcal{F}$.

* $(\phi, \psi) = \dots = \int dx_0 \cdot \phi^*(x_0)\, \psi(x_0)$

* $N_\psi^2 = (\psi, \psi) = \dots = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0\, |\psi(x_0)|^2$

* $\psi(x) = \int dx_0\, \psi(x_0)\, \xi_{x_0}(x) = \int dx_0 \int dx'\, \xi^*_{x_0}(x')\, \psi(x') \cdot \xi_{x_0}(x)$

$$= \int dx'\, \psi(x') \underbrace{\int dx_0\, \xi^*_{x_0}(x') \cdot \xi_{x_0}(x)}_{\text{“}\delta(x' - x)}$$

→ por consistência

$$= \int dx'\, \psi(x') \cdot \delta(x' - x) = \psi(x)$$

e então podemos escrever a relação de fecho como

$$\boxed{\int dx_0 \; \xi^*_{x_0}(x') \cdot \xi_{x_0}(x) = \delta(x'-x)}$$

Os deltas Dirac são também "base" contínua "ortonormal" de $\mathcal{F}$.