Aula 10 (23/Fev)

Na aula de hoje

* Revisão da última aula.
* Salto de potencial.
* Formalismo matemático da MQ.

Revisão da última aula

* Potenciais 1D "quadrados" indep. do tempo.
* Salto de potencial.

3.3 Potenciais 1D quadrados indep. do tempo

3.3.3) Exemplos de potenciais quadrados

3.3.3.1) Salto de Potencial $E > V$ (cont.):

É natural definir factor de transmissão, T, e factor de reflexão, R, como

$$\boxed{T \equiv \frac{I_t}{I_i}} = \frac{\cancel{|A_1|^2}\,\frac{\cancel{\hbar} k_2}{\cancel{2m}} \left|\frac{2k_1}{k_1+k_2}\right|^2}{\cancel{|A_1|^2}\,\frac{\cancel{\hbar} k_1}{\cancel{2m}}} = \frac{4k_1 \cdot k_2}{(k_1+k_2)^2}$$

$$\boxed{R \equiv \frac{I_r}{I_i}} = \frac{\cancel{|A_1|^2}\,\frac{\cancel{\hbar} \cancel{k_1}}{\cancel{2m}} \left|\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}\right|^2}{\cancel{|A_1|^2}\cdot\frac{\cancel{\hbar} \cancel{k_1}}{\cancel{2m}}} = \frac{(k_1-k_2)^2}{(k_1+k_2)^2}$$

que podemos interpretar como probabilidade de de transmissão e reflexão pois

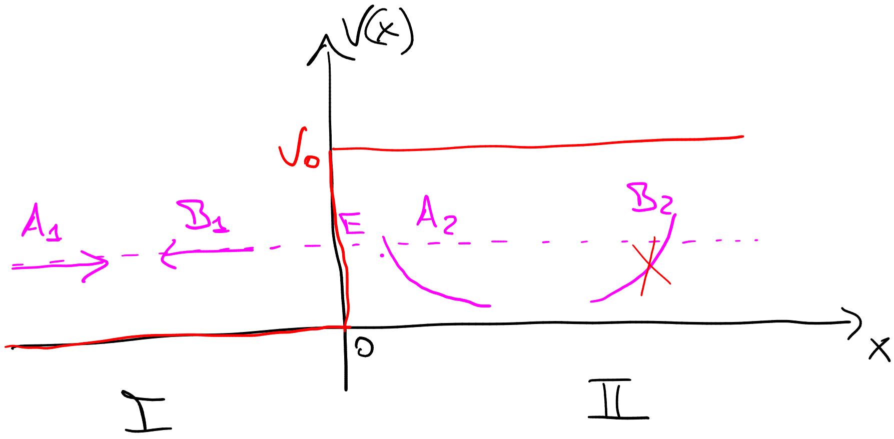
$$R+T = \frac{k_1^2 - 2k_1k_2 + k_2^2}{(k_1+k_2)^2} + \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2}$$

$$= \frac{k_1^2 + 2k_1k_2 + k_2^2}{(k_1+k_2)^2} = \frac{(k_1+k_2)^2}{(k_1+k_2)^2} = 1$$

Comentário: Ao contrário da Mecânica Clássica R pode ser maior do que zero, ou seja, a partícula pode ser refletida num problema quântico.

Nota: Em M. Clássica se $E_c > V$, partícula é (sempre) transmitida,

3.3.3.2) Salto de potencial com $E < V_0$



Soluções nas duas regiões

$$\begin{cases} \phi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x} & , \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\ \phi_2(x) = A_2 e^{-k_2 x} + B_2 e^{k_2 x} & , \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \end{cases}$$

Faremos $B_2 = 0$, porque f.o. em II diverge quando $x \to \infty$, logo não faz sentido fisicamente.

Requeremos continuidade da f.o. e da sua derivada,

$$\begin{cases} \phi_1(0) = \phi_2(0) \\ \left.\frac{d\phi_1}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\phi_2}{dx}\right|_{x=0} \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 & (1) \\ ik_1 (A_1 - B_1) = -k_2 A_2 & (2) \end{cases}$$

que podemos resolver como

$$① \Rightarrow B_1 = A_2 - A_1$$

$$② \Rightarrow A_1 - A_2 + A_1 = i\frac{k_2}{k_1}A_2 \iff A_2\left(i\frac{k_2}{k_1}+1\right) = 2A_1$$

$$\iff A_2 = \frac{2k_1}{k_1+ik_2}\cdot A_1$$

$$① \Rightarrow B_1 = \frac{2k_1 - k_1 - ik_2}{k_1+ik_2}A_1 = \frac{k_1-ik_2}{k_1+ik_2}A_1$$

Como a onda de amplitude A_2 é evanescente, não podemos atribuir-lhe uma intensidade. Teremos então intensidade apenas da onda incidente, I_i, e da onda refletida, I_r,

$$I_i = |A_1|^2 \cdot \frac{\hbar k_1}{2m}$$

$$I_r = |B_1|^2 \frac{\hbar k_1}{2m} = |A_1|^2 \frac{\hbar k_1}{2m}\cdot\underbrace{\left|\frac{k_1-ik_2}{k_1+ik_2}\right|^2}_{=1}$$

$$= \left|\frac{(k_1-ik_2)^2}{k_1^2+k_2^2}\right|^2 = \left|\frac{k_1^2-k_2^2-2ik_1k_2}{k_1^2+k_2^2}\right|^2$$

$$= \frac{(k_1^2-k_2^2)^2+4k_1^2k_2^2}{(k_1^2+k_2^2)^2} = \frac{(k_1^2+k_2^2)^2}{(k_1^2+k_2^2)^2} = 1$$

Então a probabilidade reflexão será

$$R = \frac{I_r}{I_i} = \frac{\cancel{|A_1|^2}\,\cancel{\frac{\hbar k_1}{2m}}}{\cancel{|A_1|^2}\,\cancel{\frac{\hbar k_1}{2m}}} = 1$$

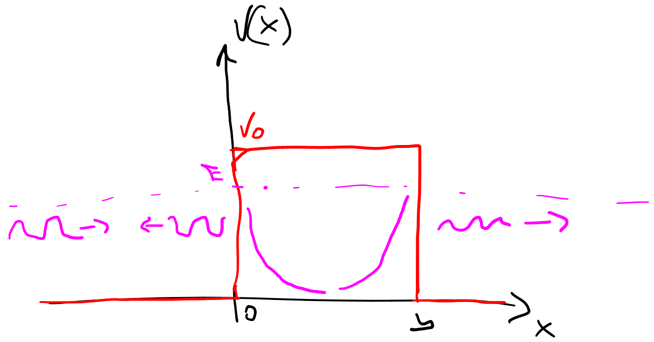
Comentário: Como em M. Clássica a partícula é sempre refletida.

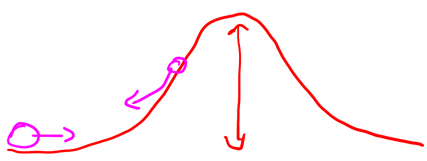
Comentário: Mas ao contrário M. Clássica, a partícula pode ser encontrada na região II (onda evanescente).

Comentário: Se tivéssemos barreira de comprimento finito, por exemplo, definida por

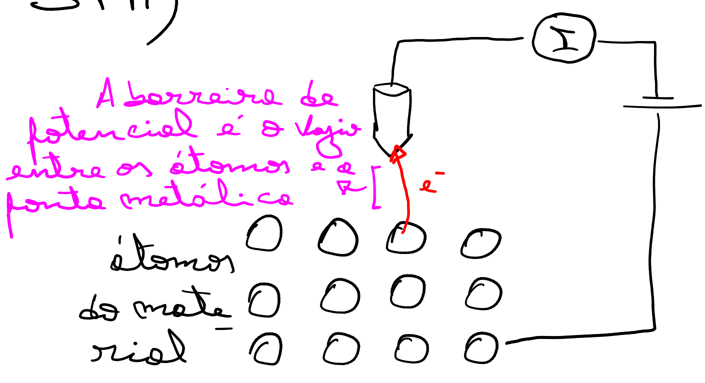
$$V(x) = \begin{cases} V_0 & , \ 0 < x < b , \\ 0 & , \ x < 0 \text{ e } x > b , \end{cases}$$

com $E < V_0$, teríamos que a partícula poderia tunelar através da barreira (mesmo isso não sendo possível classicamente), i.e. $T > 0$,





Este é o mecanismo básico por trás do microscópio efeito túnel (Scanning tunneling microscope, STM)



Comentário: Note que $\frac{B_1}{A_1} = \text{Re}[\cdots] + i\,\text{Im}[\cdots]$, tem parte imaginária, ou seja, podemos escrever B_1 como

$$B_1 = e^{i\varphi} \cdot A_1 \, ,$$

e assim a f.o. na região I poderá ser escrita na forma

$$\phi_1(x) = A_1 \left(e^{ik_1x} + e^{-i(k_1x - \varphi)} \right) ,$$

que podemos interpretar como diferença de fase da onda refletida relativamente à onda incidente, essencialmente por esta ter penetrado um pouco na região II.

Comentário: ~~Se~~ $V_0 \longrightarrow \infty$, então teremos

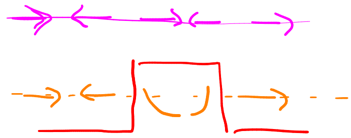
$k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \longrightarrow \infty$ e assim

$$\phi_{II}(x) = A_2 e^{-k_2 x} \longrightarrow 0 \, ,$$

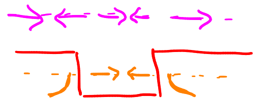
ou seja, f.o. será zero na região II, não penetra nessa região.

3.3.3.3) Outros exemplos

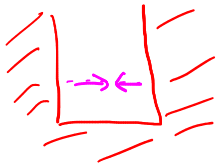
* Barreira de potencial.



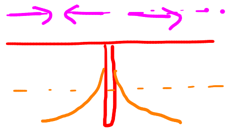
* Poço de potencial.



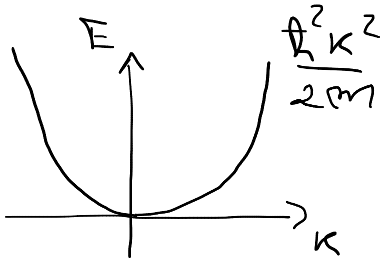
* Poço de potencial infinito.



* Potencial Delta Dirac.



Problema de espalhamento ("scattering") em que preparamos partícula de energia $E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ em $x = -\infty$ e enviamos essa partícula em direção a $x = +\infty$, medindo onda refletida e onda transmitida.



(4) Capítulo (4): Formalismo Matemático da Mecânica Quântica

Refs:

* Cohen, cap. 2
* Sakurai, cap. 1
* Shankar, cap. 1

Neste capítulo vamos introduzir as ferramentas matemáticas fundamentais usadas no estudo (moderno) de sistemas quânticos.

(4.1) Espaço das funções de onda (de uma partícula)

$\psi(t,\vec{r})$ é amplitude de probabilidade

$\frac{|\psi(t,\vec{r})|^2}{N_\psi} \cdot d^3\vec{r}$ = probabilidade encontrar a partícula num volume $d^3\vec{r} = dx\,dy\,dz$ em torno $\vec{r}$, num instante t.

Nota: Função onda normalizável tem norma finita

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

Isto implica que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{|\psi(t,\vec{r})|^2}{N_\psi} \cdot d^3\vec{r} = 1$$

$$N_\psi = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(t,\vec{r})|^2 \cdot d^3\vec{r} < \infty$$

ou seja a partícula tem que estar em algum ponto.

↳ As f. o. $\psi(t,\vec{r})$ têm que ser normalizáveis ou seja, têm que ter norma finita,

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

Somos então levados a estudar o espaço das f.o. de quadrado somável (i.e. $\int |\psi|^2 d^3\vec{r}$ é integral convergente) sobre corpo dos números complexos.

Este espaço é espaço vectorial designado de "L^2", e tem estrutura de um espaço de Hilbert.

Nota: Espaço de Hilbert é generalização espaço Euclideano para número finito ou infinito de dimensões.

↳ espaço vectorial.

↳ produto escalar (real ou complexo).

↳ produto escalar define distâncias e ângulos.

Discutamos um pouco o que queremos dizer quando falamos em "espaço vectorial de funções de onda".

Uma f.o. é uma "máquina" que transfor

ma um ponto do espaço 3D num número complexo

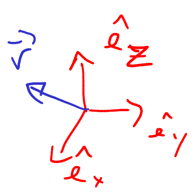
$$\psi(\vec{r}) : \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{C}$$
$$\vec{r} \longrightarrow \psi(\vec{r}) \quad .$$

Temos infinitas funções desse tipo. O conjunto (ou espaço) dessas funções/máquinas forma um espaço vectorial, por exemplo, se ψ_1 e ψ_2 pertencem a esse espaço, então $\psi_3 = \alpha_1 \psi_1 + \alpha_2 \psi_2$ também pertence a esse espaço.

↳ em tudo análogo ao espaço 3D ou 2D, onde se $\vec{v}_1$ e $\vec{v}_2$ são vectores nesse espaço, então $\vec{u} = a\vec{v}_1 + b\vec{v}_2$ é também vector desse espaço.

↳ A diferença é que no espaço das f.o. temos funções e não vectores (que são "máquinas" diferentes), para além de $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{C}$ enquanto $a, b \in \mathbb{R}$.

Seja no espaço 3D ou no espaço 2D, podemos escolher uma base de versores, $\vec{e}_x$, $\vec{e}_y$, $\vec{e}_z$, em termos dos quais expressamos unicamente cada um dos (infinitos) vectores deste espaço



$$\vec{v} = \underline{a}\, \hat{e}_x + \underline{b}\, \hat{e}_y + \underline{c}\, \hat{e}_z$$

onde a, b, c são números reais, aos quais chamamos componentes do vector $\vec{v}$ na base $\{\vec{e_x}, \vec{e_y}, \vec{e_z}\}$.

O mesmo acontece no espaço vectorial de funções de onda. Também nele podemos escolher um conjunto de funções de onda, em termos do qual iremos expressar unicamente cada uma das funções de onda (do espaço de todas as f.o.)

$$\psi(\vec{r}) = \alpha\, \phi_1(\vec{r}) + \beta\, \phi_2(\vec{r}) + \gamma\, \phi_3(\vec{r}) + \dots$$

onde os $\{\phi_1(\vec{r}), \phi_2(\vec{r}), \phi_3(\vec{r}), \dots\}$ são os "versores" da nossa base de f.o., sendo os $\alpha, \beta, \gamma, \dots$, as componentes da f.o. $\psi(\vec{r})$ expressa nessa base.
↳ em geral números complexos

Note que podemos mudar a base em que descrevemos $\psi(\vec{r})$, o que irá mudar as componentes α, $\beta, \gamma, \dots$, mas a f.o. $\psi(\vec{r})$ ficará igual. Em exacta analogia com o que acontece no espaço 2D ou 3D

Mas estamos interessados num sub-conjunto de funções de L^2, que façam sentido fisicamente:

↳ Queremos funções definidas em todo espaço, contínuas, infinitamente diferenciáveis (pois experiências conseguem ver até escalas $\sim 10^{-30}$ m não fazendo por isso sentido falar de descontinuidades no espaço)

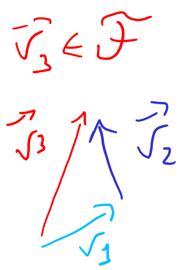
↳ Queremos funções limitadas no espaço (a partícula pode ser encontrada em região finita do espaço, ex. laboratório).

Funções "suficientemente regulares" de L^2 $\Longrightarrow$ funções de $\mathcal{F}$ que é sub-espaço de L^2.

$$\text{Todas} \longrightarrow L^2 \longrightarrow \mathcal{F}$$

4.1.1) Estrutura de $\mathcal{F}$

É possível mostrar que $\mathcal{F}$ tem todas as propriedades de espaço vectorial.



Nota: Vamos omitir os argumentos t e $\vec{r}$ nas f.o. para simplificar a notação.

Por exemplo, se

$$\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{F} \Longrightarrow \psi = \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \in \mathcal{F}$$

onde λ_1, λ_2 são números complexos.

↳ Para demonstrarmos que ψ é função de quadrado somável, i.e.

$$N_\psi = \int |\psi|^2 . d^3\vec{r} < \infty$$

Podemos notar que

$$|\psi|^2 = |\alpha_1|^2 . |\psi_1|^2 + |\alpha_2|^2 . |\psi_2|^2 + \alpha_1^* \alpha_2 \psi_1^* \psi_2 +$$
$$+ \alpha_1 \alpha_2^* \psi_1 \psi_2^*$$

Os dois últimos termos têm o mesmo módulo. Podemos escrever para cada um deles

$$|\alpha_1^* . \alpha_2 \psi_1^* \psi_2| = |\alpha_1| . |\alpha_2| . |\psi_1| . |\psi_2| \leq |\alpha_1| |\alpha_2| \frac{|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2}{2}$$

que podemos usar na expressão de $|\psi|^2$,

$$|\psi|^2 \leq |\alpha_1|^2 . |\psi_1|^2 + |\alpha_2|^2 . |\psi_2|^2 + |\alpha_1| . |\alpha_2| . (|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2)$$

que são todos integráveis, logo

$$\int |\psi|^2 . d^3\vec{r} < \infty \Rightarrow \psi \in L^2$$

Por fim, como $\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{F}$ são suaves e localizadas, então é natural que $\psi = \alpha_1 \psi_1 + \alpha_2 \psi_2$ também seja suave é localizada.

Logo concluímos que $\varphi \in \mathcal{F}$, tal qual queríamos mostrar.