Aula 8 (18/Fev)

Na aula de hoje:

* Revisão das últimas aulas.
* Sobreposição contínua de ondas planas.
* Potenciais independentes do tempo.
* Potenciais 1D indep. do tempo.

—— // ——

Revisão das últimas aulas

* Aula 6
  - ↳ Aplicabilidade da MQ.
  - ↳ Descrição partícula livre.
  - ↳ Pacote Ondas
* Aula 7
  - ↳ Resolução exercícios Folha 2 (ex 1, 3, 4).

—— // ——

3.1) Descrição quântica de uma partícula livre ($V=0$) — Pacote de Ondas (cont.)

3.1.2) Sobreposição contínua de ondas planas

Equivale a substituir o somatório em k (da última aula) por integral em todo o k, $\sum_{k_j} \longrightarrow \int d^3\vec{k}$.

A sobreposição contínua de ondas planas, (também chamada de pacote de ondas) será

$$\boxed{\psi(t,\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^{3}} \int d^3\vec{k}\; \hat{\psi}(\vec{k}) \cdot e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega(k).t)}}$$

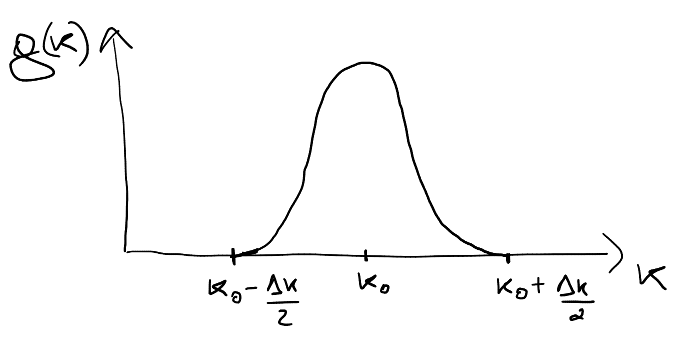
que nada mais é do que a transformada de Fourier (neste caso em 3D).

Por simplicidade trabalhemos em 1D e escrevemos $\hat{\psi}(k) = \underbrace{|\hat{\psi}(k)|}_{\equiv g(k)} \cdot e^{i\phi(k)} = g(k) \cdot e^{i\phi(k)}$.

Assim teremos

$$\psi(t,x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) \cdot e^{i(kx + \phi(k) - \omega(k).t)} \cdot dk$$

Vamos assumir Δk é finito, ou seja, $g(k) \neq 0$ só em $k \in \left[k_0 - \frac{\Delta k}{2}, k_0 + \frac{\Delta k}{2}\right]$,



$$\Longrightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \ldots dk \longrightarrow \int_{k_0 - \frac{\Delta k}{2}}^{k_0 + \frac{\Delta k}{2}} \ldots dk$$

Vamos assumir também que $\phi(k)$ varia lentamente em $\left[k_0 - \frac{\Delta k}{2}, k_0 + \frac{\Delta k}{2}\right]$, logo podemos expandir

$\phi(k)$ em torno de k_0 (série de Taylor)

$$\phi(k) = \phi(k_0) + \underbrace{\left.\frac{d\phi}{dk}\right|_{k_0}}_{= \phi_0'} \cdot (k-k_0) + \mathcal{O}\left[(k-k_0)^2\right]$$

$$\equiv \phi_0 + \phi_0' \cdot (k-k_0) + \dots$$

Assumindo o mesmo para $\omega(k)$ $\left[\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}\right.$ se $V=0$; mas diferente se $V(x) \neq$ const$\left.\right]$, podemos também usar expansão em série de Taylor para escrever $\omega(k)$ como,

$$\omega(k) = \omega(k_0) + \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k_0} \cdot (k-k_0) + \mathcal{O}\left[(k-k_0)^2\right]$$

$$\equiv \omega_0 + \omega_0' \cdot (k-k_0) + \dots$$

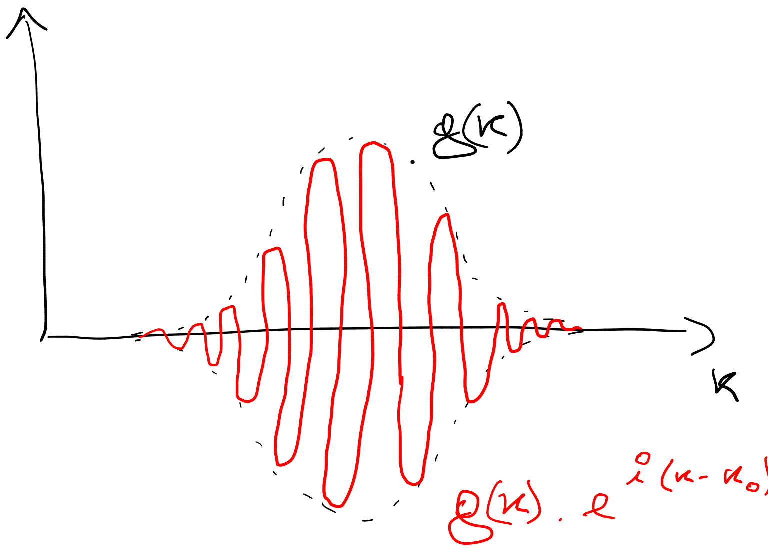
Assim, teremos

$$\psi(t,x) = \frac{e^{i(k_0 x + \phi_0 - \omega_0 t)}}{\sqrt{2\pi}} \int_{k_0 - \frac{\Delta k}{2}}^{k_0 + \frac{\Delta k}{2}} g(k) \cdot e^{i(k-k_0)(x+\phi_0' - \omega_0' t)} \, dk$$

$$= e^{i(k_0 x + \phi_0 - \omega_0 t)} \cdot A(t,x)$$

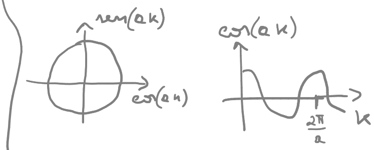
<u>Onde fica o centro do pacote de ondas?</u>

- Para $|x + \phi_0' - \omega_0' t| \gg \left|\frac{1}{k-k_0}\right|$, a exponencial $e^{i(k-k_0)(x+\phi_0' - \omega_0 t)}$ oscila muito rapidamente.



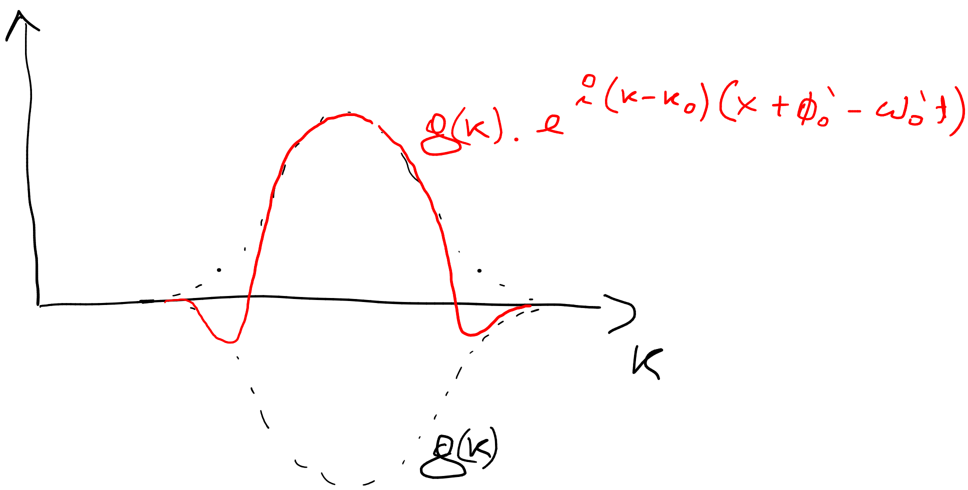
Oscilação da exponencial complexa:

$$e^{iak} = \cos(ak) + i\,\mathrm{sen}(ak)$$



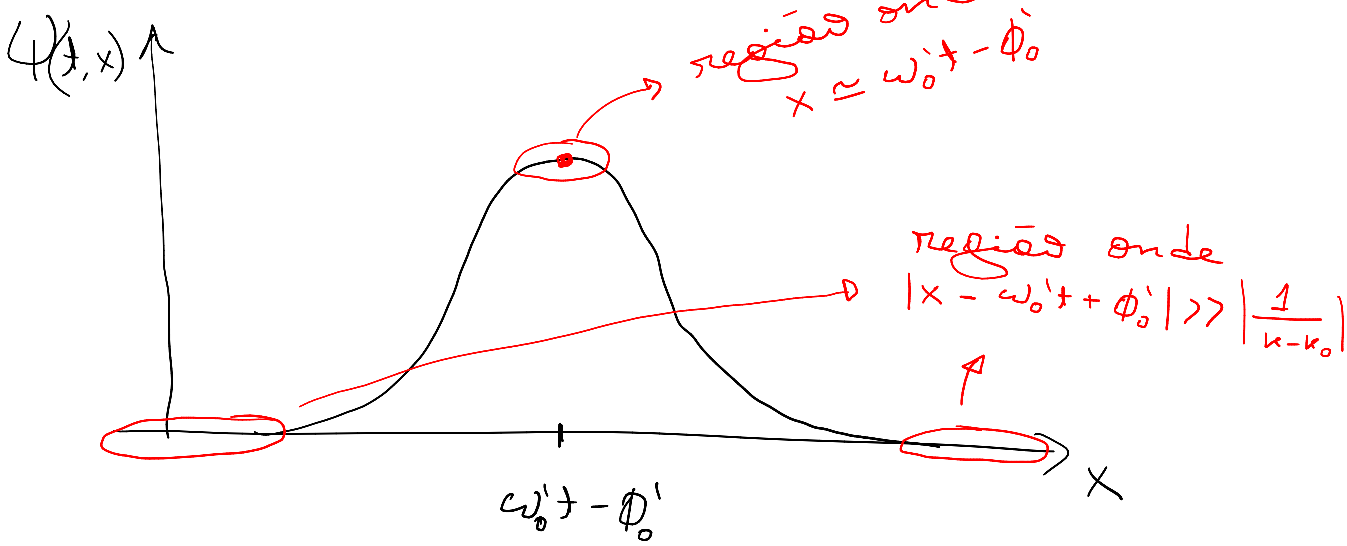
e por isso o integral é essencialmente zero, i.e., $A(t,x) \simeq 0 \Rightarrow \psi(t,x) \simeq 0$.

- Para $x \simeq \omega_0' t - \phi_0'$ a exponencial praticamente não oscila entre $k_0 - \frac{\Delta k}{2}$ e $k_0 + \frac{\Delta k}{2}$, e assim o integrando vai ser próximo de $g(k)$



que resulta num integral não-nulo, e por isso $\psi(t,x)$ será também não-nulo.

Vamos ter algo como



Assim $A(t,x)$ tem máximo em

$$x_{max} = \omega_0' t - \phi_0'$$

$$\Longleftrightarrow \boxed{x_{max} = \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k_0} \cdot t - \left.\frac{d\phi}{dk}\right|_{k_0}}$$

Qual velocidade de grupo?

$$\boxed{v_{grupo} = v_{máximo} = \frac{d\,x_{max}(t)}{dt} = \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k_0}}$$

que podemos reescrever usando Einstein - de Broglie

$$E = \hbar\omega$$
$$|\vec{p}| = \hbar|\vec{k}|$$

$$v_{grupo} = \frac{d\omega}{dE}\frac{dE}{dp}\frac{dp}{dk}\bigg|_{k_0} = \frac{1}{\cancel{\hbar}}\frac{dE}{dp}\cancel{\hbar}\bigg|_{p_0=\hbar k_0}$$

$$E = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow \frac{p_0}{m} = v_0$$

que é a velocidade clássica da partícula.

A f.o. ainda é periódica?

Voltemos à expressão

$$\psi(t,x) = A(t,x)\cdot e^{i(k_0 x + \phi_0 - \omega_0 t)}$$

Vimos antes que se $\left|x + \phi_0' - \omega_0' t\right| \gg \left|\frac{1}{k-k_0}\right|$, a $A(t,x) \longrightarrow 0$, e por isso $\psi(t,x)$ tenderá para zero quando

$$|x| \gg \left|\frac{1}{k-k_0}\right| - \left|\phi_0' - \omega_0' t\right| ,$$

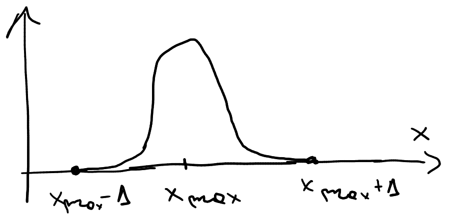
e por isso não será periódica!

Norma é infinita?

Se $A(t,x) \longrightarrow 0$ quando $|x| \gg \left|\frac{1}{k-k_0}\right| - \underbrace{|\phi_0' - \omega_0' t|}_{x_{max}}$

então

$$|\Psi(t,x)|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} |A(t,x)|^2 . dx$$



$$= \int_{|\phi_0'-\omega_0' t|-\Delta}^{|\phi_0'-\omega_0' t|+\Delta} |A(t,x)|^2 . dx = \text{finito}$$

será finito, logo f.o. será normalizável.

↳ Nota: Se quiséssemos ser mais cuidadosos, teríamos que mostrar que o integrando decai mais rapidamente do que $1/x$.

Nota: Δx aumenta com o aumento de t.
[Folha 3]

3.2 Potenciais independentes do tempo

Quando o potencial sentido pela partícula não depende do tempo,

$$V(t,\vec{r}) = V(\vec{r})$$

3.2.1) Eq. de Schrödinger independente do tempo

Podemos escrever a eq. de Schrödinger como

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$i\hbar \, \frac{\partial \Psi(t,\vec{r})}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] \Psi(t,\vec{r}) \, .$$

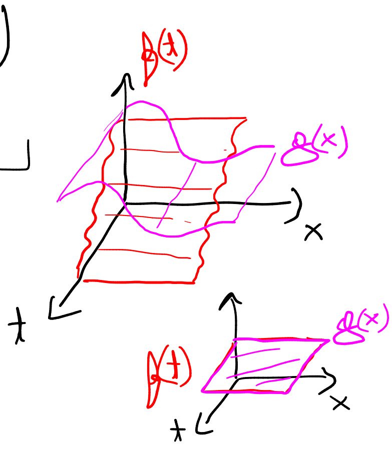
Como a variável t na direita só aparece em $\Psi(t,\vec{r})$, sendo que a variável $\vec{r}$ na esquerda também só aparece em $\Psi(t,\vec{r})$, vamos tomar o ansatz

$$\Psi(t,\vec{r}) = \chi(t) . \phi(\vec{r}) \, ,$$

que nos vai permitir separar variáveis t e $\vec{r}$, colocando de um lado do sinal de igual apenas termos envolvendo a variável t, e do outro lado apenas termos envolvendo $\vec{r}$:

$$\phi(\vec{r}) . i\hbar \, \frac{\partial}{\partial t} \chi(t) = \chi(t) \left[-\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] . \phi(\vec{r})$$

$$\Longleftrightarrow \underbrace{\frac{i\hbar}{\chi(t)} \frac{\partial \chi(t)}{\partial t}}_{= f(t)} = \underbrace{\frac{1}{\phi(\vec{r})} \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] \phi(\vec{r})}_{= g(\vec{r})}$$



$$\Longleftrightarrow f(t) = g(\vec{r}) = \text{constantes!}$$

Análise dimensional:

$$\left[\frac{i\hbar}{\chi(t)}\frac{\partial \chi(t)}{\partial t}\right] = E.T.\frac{1}{T} = E$$

$$E = M L^2 . T^{-2}$$

$$\left[\frac{1}{\phi}\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\phi\right)\right] = E^2.T^2.\frac{1}{L^2}\frac{1}{M} = E^2.\frac{1}{E} = E$$

então $[\text{constante}] = E$.

Ficaremos com duas eqçs diferenciais (onde diremos que constante $= E$),

$$\begin{cases} i\hbar\dfrac{\partial \chi(t)}{\partial t} = E.\chi(t) & (1) \\[2ex] \boxed{\left[-\dfrac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m} + V(\vec{r})\right]\phi(\vec{r}) = E.\phi(\vec{r})} & (2) \end{cases}$$

↳ Eqç. Schr. indep. tempo

(1) ⟶ parte temporal das soluções Eqç Schr.

(2) ⟶ parte espacial das soluções Eqç Schr.

Definamos dois operadores diferenciais lineares:

↳ Operador $\hat{O}$ é linear se $\hat{O}.(\alpha.f + \beta.g) = \alpha.\hat{O}f + \beta.\hat{O}g$

$$\boxed{\hat{T} \equiv i\hbar \frac{\partial}{\partial t}}$$ → Op. translações temporais

$$\boxed{\hat{H} \equiv -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} + V(\vec{r})}$$ → Operador Hamiltoniano (energia total)

E assim podemos escrever as eqçs (1) e (2) em cima como

$$\begin{cases} \hat{T}\, \chi(t) = E\, \chi(t) \\ \hat{H}\, \phi(\vec{r}) = E\, \phi(\vec{r}) \end{cases}$$

que são eqçs de auto-valores e auto-funções (também chamadas de valores próprios e funções próprias; "eigen-values" e "eigen-functions"; auto-valores e auto-vectores; etc.).

Nota: As auto-funções do operador $\hat{O}$ são aquelas funções que quando atuadas por $\hat{O}$ são transformadas nelas próprias multiplicadas por um número (que pode ser complexo), ao qual chamamos auto-valor. Matematicamente, podemos escrevê-lo como

$$\boxed{\hat{O}\, \phi = \lambda\, \phi}$$

→ auto-valor (associado à auto-função ϕ)

→ auto-função do operador $\hat{O}$

Exemplo 1: $\hat{O} = \frac{\partial}{\partial x}$, $f(x) = e^{iax}$

$$\Rightarrow \hat{O} f = \frac{\partial}{\partial x} e^{iax} = ia\, e^{iax} = \underset{\lambda}{ia}\, f(x)$$

$f = e^{iax}$ é auto-função do operador $\hat{O} = \frac{\partial}{\partial x}$ com auto-valor $\lambda = ia$.

Exemplo 2: $\hat{O} = \frac{\partial}{\partial x}$, $g(x) = ax$

$$\Rightarrow \hat{O} g = \frac{\partial}{\partial x} ax = a \neq \lambda . g$$

$g = ax$ não é auto-função deste operador $\hat{O} = \partial / \partial x$.

3.2.2) Estados estacionários

É fácil resolver a equação (1) em cima,

$$\hat{T} \chi(t) = E . \chi(t)$$

$$\Leftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi(t) = E . \chi(t)$$

onde podemos usar o ansatz

$$\chi(t) = e^{i\alpha t} ,$$

onde α é uma constante, para já, indeterminada. Usando este ansatz na eq (1)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{i\alpha t} = E\, e^{i\alpha t}$$

$$\Leftrightarrow i\hbar\, i\alpha\, \cancel{e^{i\alpha t}} = E \cdot \cancel{e^{i\alpha t}}$$

$$\Leftrightarrow \alpha = -\frac{E}{\hbar} \implies \boxed{\chi(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}}$$

Assim, a solução da eq Schr. (com as variáveis temporal e espacial) terá a forma

$$\psi(t,\vec{r}) = \phi(\vec{r}) \cdot \chi(t)$$
$$= \phi(\vec{r}) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Mas a constante E ainda nos é desconhecida. Para a determinarmos teremos que resolver a eq Schrodinger independente do tempo (onde a constante E também aparece)

$$\hat{H}\phi = E\phi$$

Em geral, para um dado operador Hamiltoniano, teremos várias soluções, isto é, várias auto-funções $\phi_i(\vec{r})$ e seus auto-valores, E_i, que satisfarão a equação de Schr. independente do tempo,

$$\hat{H}\,\phi_i(\vec{r}) = E_i\,\phi_i(\vec{r})$$

$\hookrightarrow$ o índice i identifica as diferentes soluções (cada auto-função tem auto-valor associado).

<u>Nota</u>: Auto-funções do operador Hamiltoniano são também chamados de "auto-estados", sendo que os auto-valores do operador Hamiltoniano são também chamados de "auto-energias".

Assim, as soluções da equação de Schrodinger (para potenciais independentes do tempo) pode ser escrita como

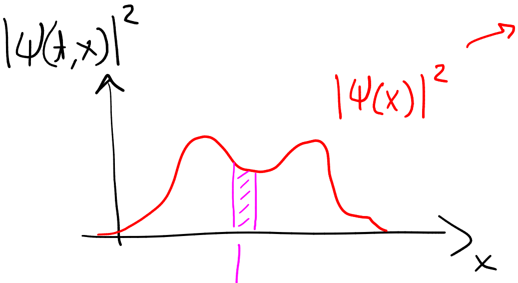
$$\boxed{\psi_i(t,\vec{r}) = \phi_i(\vec{r})\cdot e^{-i\frac{E_i}{\hbar}t}}$$

<u>Comentários</u>:

* Este tipo de soluções são chamados <u>estados estacionários</u>,

$$|\psi_i(t,\vec{r})|^2 = |\phi_i(\vec{r})\cdot e^{i\frac{E_i}{\hbar}t}|^2 = \overbrace{|\phi_i(\vec{r})|^2}^{\text{independente do tempo}}$$

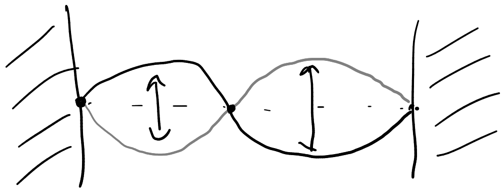
pois o seu módulo ao quadrado (i.e. densidade de probabilidade) não depende do tempo



→ independente do tempo

probabilidade de encontrar a partícula nesta região não varia no tempo.

<u>Nota</u>: Semelhante aos modos normais de vibração de uma corda



* Como $\hat{H}$ é independente do tempo, a energia total é constante do movimento; estados estacionários têm energia bem definida.

$$\langle E \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\psi_i^* \overbrace{\hat{H}\psi_i}^{=E_i\psi_i}}{N_{\psi_i}} dx = E_i \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\psi_i^* \psi_i}{N_{\psi_i}} dx = E_i$$

* Função de onda geral $\psi(t,x)$, pode ser escrita em $t = t_0$, como combinação linear dos auto-estados de $\hat{H}$,

$$\psi(t_0,x) = \sum_i c_i^0 \cdot \phi_i(\vec{r})$$

Assim saberemos escrever trivialmente a evolução temporal de tal f.o.

$$\boxed{\psi(t,x) = \sum_i c_i^0 \cdot \phi_i(\vec{r}) \cdot e^{-i\frac{E_i}{\hbar}t}}$$

Por isto, estaremos constantemente à procura dos estados estacionários dos problemas que estivermos a resolver (quando o $\hat{H}$ desses problemas não depender do tempo).

↳ Queremos repetidamente encontrar os auto-estados e as auto-energias de um dado sistema