Aula 6 (11/Fev)

Na aula de hoje:

* Revisão da última aula.
* Aplicabilidade da Mecânica Quântica.
* Partícula quântica livre – Pacote de Ondas.
* Potenciais independentes do tempo.

—— // ——

Revisão última aula

* Inadequação de conceitos clássicos.
* Função de Onda e Eq. Schrödinger.
* Princípio da Incerteza Heisenberg.

—— // ——

(2.4) Regime de aplicabilidade da Mec. Quântica

Em Teoria da Relatividade, precisamos apenas de usar o formalismo relativista se $v \lesssim c$:

$$\Longrightarrow \begin{cases} \text{se } v \ll c \Rightarrow \text{usamos fórmulas clássicas} \\ \text{se } v \lesssim c \Rightarrow \text{usamos fórmulas relativistas} \end{cases}$$

⇒ Critério: Magnitude de v relativa a c.

Em MQ a constante de Planck está sempre presente ⇒ h entra no critério?

As dimensões de h?

$$[h] = \overset{\text{energia}}{E} . \overset{\text{tempo}}{T}$$

$h = 6.626 \times 10^{-34}$ J.s

A acção (típica) do sistema

$$S = \int dt . \mathcal{L}(q, \dot{q}, t) \Rightarrow [S] = T . [\mathcal{L}] = T . E$$

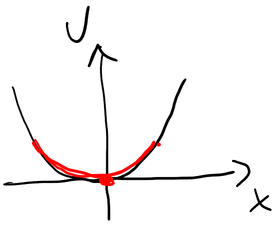
Usar como critério que acção típica seja da ordem de h, para termos que usar formalismo quântico,

$$\boxed{S_t \simeq h}$$

Nota: Não precisamos calcular S_t, mas apenas variável dinâmica com dimensões de acção.

Oscilador Harmónico 1D

↳ energia total dividida pela frequência do oscilador tem dimensões de acção

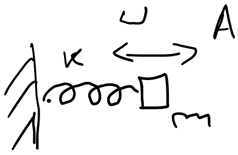


$$V(A) = \frac{K}{2}A^2 = \frac{m}{2}\omega^2 A^2$$

$$S_t \simeq \frac{m}{2}\omega^{\cancel{2}} A^2 / \cancel{\omega}$$

$$\simeq \frac{m}{2}\omega \cdot A^2$$

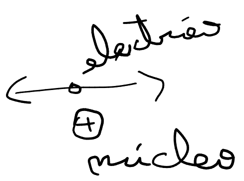
Ex 1: Mola com $\omega = 10\, s^{-1}$, $A = 0,1 m$, $m = 1g$



$$\Rightarrow S_t \simeq \dots = \boxed{5\times 10^{-5}\, J.s \gg h}$$

↳ Não necessita de tratamento quântico

Ex 2: Electrão oscilando, $m \simeq 10^{-31} kg$,
$A \simeq 10^{-10} m$, $\omega = 10^{-17} s^{-1}$



$$\Rightarrow S_t \simeq \dots = \boxed{10^{-34}\, J.s \simeq h}$$

↳ Teremos que usar formalismo quântico.

③ Capítulo 3 : A equação de Schrödinger

Referências :

Cap. 1, Cohen Vol. 1

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

Partícula livre $\Rightarrow$ $V = \text{constt} \Rightarrow \vec{F} = -\vec{\nabla} V = 0.$

Nota: Vamos usar constt = 0 por simplicidade.

Temos então a eqç de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \vec{r}) = -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} \psi(t, \vec{r}) ,$$

cuja solução mais simples é onda plana,

$$\psi(t, \vec{r}) = A \, . \, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)}$$

$$\Rightarrow i\hbar(-i\omega) \cancel{\psi} = -\frac{\hbar^2}{2m} (i\vec{k})^2 \cancel{\psi}$$

$$\Leftrightarrow \hbar\omega = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \Rightarrow \omega(\vec{k}) = \frac{\hbar \vec{k}^2}{2m}.$$

A distribuição de probabilidade associada a esta solução é problemática

$$\mathcal{P}(t,\vec{r}) = \frac{\psi^*(t,\vec{r})\,\psi(t,\vec{r})}{N_\psi} = \frac{|\psi(t,\vec{r})|^2}{N_\psi}$$

onde N_ψ é dada por

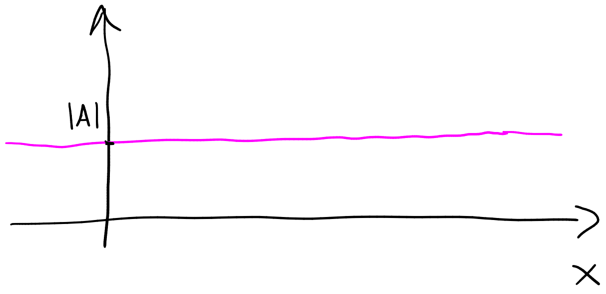
$$N_\psi = \int d^3\vec{r}\,|\psi(t,\vec{r})|^2$$

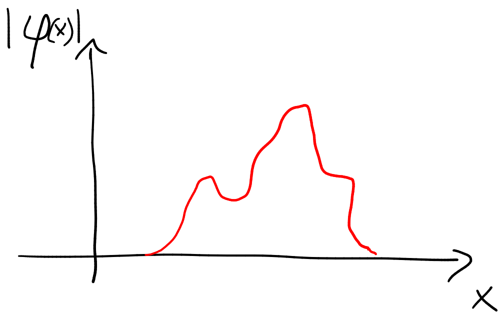
é a norma da função de onda. Substituindo nestas expressões a f.o. correspondente a uma onda plana,

$$N_\psi = \int d^3\vec{r}\,\left|A.\,e^{i(\vec{k}.\vec{r}-\omega t)}\right|^2$$

$$= \int d^3\vec{r}\,|A|^2 = |A|^2.\underbrace{\int 1.d^3\vec{r}}_{\to\infty} = \infty$$

$$|\psi(x)| = \left|A.e^{i(\vec{k}.\vec{r}-\omega t)}\right| = |A|$$





Nota: Usualmente trabalhamos com f.o. normalizadas, $N_\psi = 1$.

Nota: Consideremos $\phi(x)$ com $N_\phi = 3.32$.
Podemos então normalizá-la fazendo

$$\phi(x) \longrightarrow \frac{\phi(x)}{\sqrt{N_\phi}} \equiv \tilde{\phi}(x) = \frac{\phi(x)}{\sqrt{3,32}}$$

$$\Rightarrow N_{\tilde{\phi}} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, |\tilde{\phi}|^2 = \frac{1}{\cancel{3.32}} \underbrace{\int dx\, |\phi(x)|^2}_{\hookrightarrow N_\phi = \cancel{3.32}} = 1$$

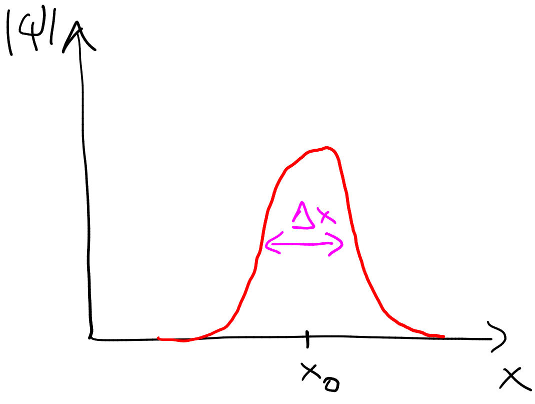
Dizemos que f.o. é normalizável se a podemos normalizar (i.e., se a sua norma original é finita).

Nota: Onda plana não é normalizável, porque $N_\psi = \infty \Rightarrow \tilde{\psi}(x) = \frac{\psi(x)}{\sqrt{\infty}} = 0$.

Nota: Onda plana tem vector onda bem definido, $|\vec{k}|$, $\Delta k = 0 \Rightarrow \Delta x = \infty$, logo partícula deslocalizada em todo o espaço.

Onda plana não é boa descrição

↳ combinaremos diferentes ondas planas formando pacote de ondas.



Um Pacote de Ondas é formalmente escrito como integral (soma contínua) de ondas planas

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) . e^{i(kx - \omega t)} dk$$

Nota: Isto é a transf. Fourier onde

$$g(k) = \frac{\hat{\psi}(k)}{\sqrt{2\pi}} ,$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\psi}(k) e^{ikx} dk$$

$$\hat{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) . e^{-ikx} dx$$

Para percebermos melhor isto, vamos começar por olhar para um sistema mais simples.

3.1.1) Sobreposição discreta de ondas planas

$$\boxed{\psi(t, \vec{r}) = \sum_{j=1}^{n} A_j . e^{i(\vec{k}_j \cdot \vec{r} - \omega_j t)}}$$

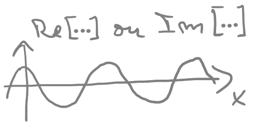
A_j é coeficiente ("peso"). Cada onda plana é identificada por $\vec{k}_j$ e $\omega_j = \omega(k_j)$.

↳ A norma de tal f.o. é dada por

$$N_\psi = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(t,\vec{r})|^2 d^3\vec{r} = \sum_{j=1}^{n} |A_j|^2 . \overset{\overset{\infty}{\shortparallel}}{\overline{\delta(0)}} = \underline{\underline{\infty}}$$

Integrais de ondas planas:

Zonas positivas cancelam zonas negativas



$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(k_i-k_j)x} . dx = \begin{cases} \text{se } k_i \neq k_j \Rightarrow I = 0 \\ \int_{-\infty}^{+\infty} 1 . dx = \infty \text{ se } k_i = k_j \end{cases} = \delta(k_i - k_j)$$

função delta de Dirac

Por simplicidade, trabalhemos em <u>1D</u> com <u>3 ondas</u> planas apenas, $n = 3$,

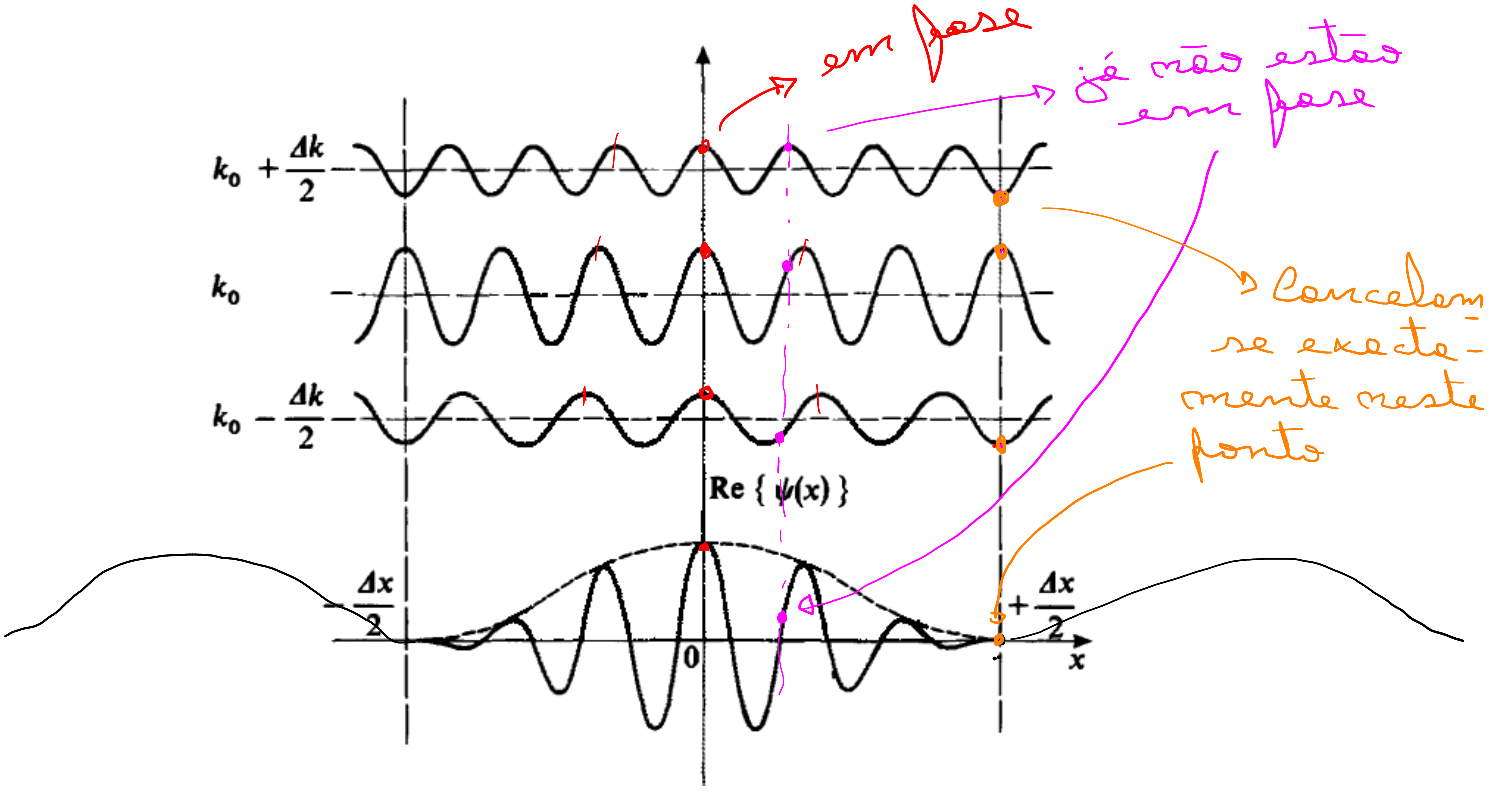
$$k_j = \left(k_0 - \frac{\Delta k}{2}, k_0, k_0 + \frac{\Delta k}{2}\right), \qquad A_j = \frac{\hat{\psi}(k_0)}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2}\right)$$

que resulta na f.o. seguinte $(t=0)$

$$\psi(0,x) = \frac{\hat{\psi}(k_0)}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{e^{i(k_0 - \frac{\Delta k}{2})x}}{2} + e^{ik_0x} + \frac{e^{i(k_0 + \frac{\Delta k}{2})x}}{2} \right]$$

$$= \frac{\hat{\psi}(k_0)}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_0x} \left[1 + \cos\left(x . \frac{\Delta k}{2}\right) \right]$$

Graficamente esta f.o. é dada por



O máximo de $|\psi(0,x)| = \frac{|\hat{\psi}(k_0)|}{\sqrt{2\pi}}\left(1+\cos\left(x\frac{\Delta k}{2}\right)\right)$ é dado pelo máximo do co-seno, i.e. quando argumento do co-seno for zero $\Longleftrightarrow x_{max}=0$.

Já o mínimo $|\psi(0,x)|$ será dado por

$$x_{min}\frac{\Delta k}{2} = \pi \Rightarrow x_{min} = \frac{2\pi}{\Delta k}$$

$$\Rightarrow \Delta x = \frac{4\pi}{\Delta k} \Rightarrow \Delta x . \Delta k = 4\pi$$

Nota: $\psi(0,x)$ é periódica porque combinamos número finito de ondas planas.

↳ se fizermos $\sum_j^n \to \int_{-\infty}^{+\infty} dk$ a f.o. passará a ser não periódica.

Nota: A norma $\Psi(0,X)$ continua a ser infinita pois $|\Psi(0,X)|$ continua a ser periódica.

↳ razão matemática é o aparecimento dos deltas de Dirac.

Como é que $\Psi(t,X)$ evolui no tempo?

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} \Longrightarrow \omega_j = \left(\omega_0 - \frac{\Delta\omega}{2}, \omega_0, \omega_0 + \frac{\Delta\omega}{2}\right)$$

Assim teremos $\omega_0 = \hbar k_0^2 / 2m$. Para obter $\Delta\omega$, temos que fazer o mesmo para as outras ondas planas, i.e.

↳ Para $\omega_0 - \frac{\Delta\omega}{2} = \frac{\hbar}{2m}\left(k_0 - \frac{\Delta k}{2}\right)^2 = \frac{\hbar}{2m}\left(k_0^2 - \Delta k + \cdots\right) \Rightarrow \Delta\omega = \frac{\hbar}{m}\Delta k$

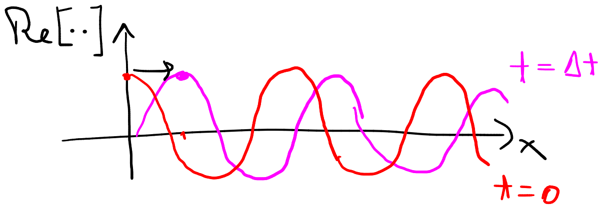
A nossa $\Psi(t,x)$ será

$$\Psi(t,x) = \frac{\hat{\Psi}(k_0)}{\sqrt{2\pi}}\left[\frac{1}{2} e^{i\left[(k_0+\frac{\Delta k}{2})x - (\omega_0 - \frac{\Delta\omega}{2})t\right]} + \right.$$

$$\left. + e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} + e^{i\left[(k_0+\frac{\Delta k}{2})x - (\omega_0 + \frac{\Delta\omega}{2})t\right]}\right]$$

$$= \frac{\hat{\Psi}(k_0)}{\sqrt{2\pi}} e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}\left[1 + \cos\left(x \cdot \frac{\Delta k}{2} - t\,\frac{\Delta\omega}{2}\right)\right]$$

▲ Velocidade de fase (de cada onda plana)



A velocidade de fase é a velocidade com a qual se move a "crista da onda".

Em $t=0$, "cristas da onda" de $\mathrm{Re}\left[e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}\right] = \cos(k_0 x - \omega_0 t)$ é dada pelo argumento do co-seno igual a zero (ou múltiplo de 2π).

Escolhemos seguir "crista" em $x=0$ quando $t=0$, isto é, fase do co-seno 0. Assim

$$e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \Longrightarrow k_0 x - \omega_0 t = 0 \Rightarrow x(t) = \frac{\omega_0}{k_0}.t$$

$$\Rightarrow v_{fase} = \frac{dx}{dt} = \frac{\omega_0}{k_0}$$

Fazendo o mesmo para as outras ondas planas

$$v_{fase} = \left(\frac{2\omega_0 - \Delta\omega}{2k_0 - \Delta k}, \frac{\omega_0}{k_0}, \frac{2\omega_0 + \Delta\omega}{2k_0 + \Delta k} \right)$$

usando $\Delta\omega \simeq \frac{\hbar}{m}\Delta k$

$$\simeq \frac{\hbar}{2m}\left(\frac{k_0^2 - \Delta k}{k_0 - \Delta k/2}, k_0, \frac{k_0^2 + \Delta k}{k_0 + \Delta k/2} \right)$$

$1 + x - x^2 + \dots$ se $\frac{\Delta k}{2k_0} << 1$. $\quad 1 - x + x^2 + \dots$

$$= \frac{\hbar}{2m}\left(\frac{k_0^2 - \Delta k}{k_0} \boxed{\frac{1}{1 - \Delta k/2k_0}}, k_0, \frac{k_0^2 + \Delta k}{k_0} \cdot \boxed{\frac{1}{1 + \Delta k/2k_0}} \right)$$

$$\simeq \frac{\hbar}{2m}\left(\frac{1}{k_0}\left[k_0^2 - \Delta k.\left(1 - \frac{k_0}{2}\right) + \dots\right], k_0, \frac{1}{k_0}\left[k_0^2 + \Delta k\left(1 - \frac{k_0}{2}\right) + \dots\right] \right)$$

Se $k_0/2 < 1 \Rightarrow$ onda $k_0 - \frac{\Delta k}{2}$ terá menor v_{fase}.

Se $k_0/2 > 1 \Rightarrow$ onda $k_0 + \frac{\Delta k}{2}$ terá maior v_{fase}.

▲ Velocidade de grupo

↳ velocidade do máximo do pacote de ondas (coincide com velocidade partícula "clássica")

A posição do máximo de $|\Psi(t,x)|$ ocorre quando co-seno é igual a 1:

$$|\Psi(t,x)| = \frac{\hat{\Psi}(k_0)}{\sqrt{2\pi}} e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \left[1 + \cos\left(x . \frac{\Delta k}{2} - t \frac{\Delta \omega}{2} \right) \right]$$

então teremos que

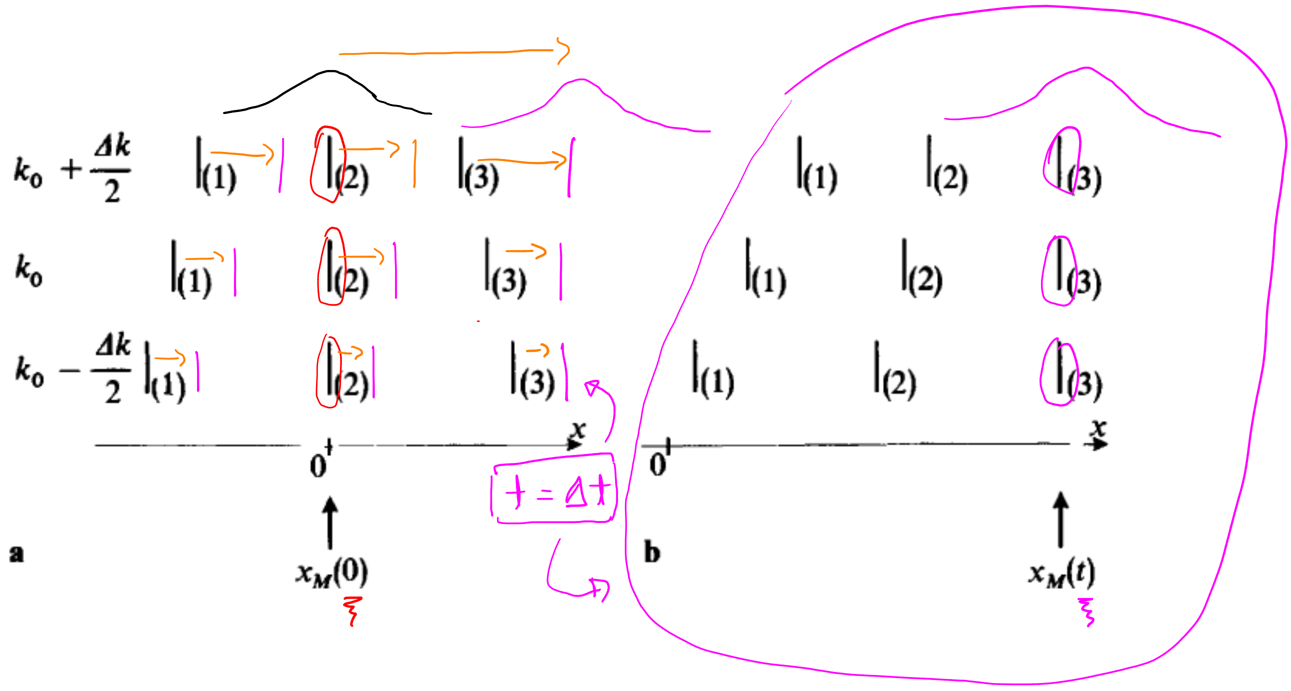
quando $\cos(\ldots) = 1 \Rightarrow \ldots = 0$

$$\max\left[\Psi(t,x)\right] \Rightarrow x_{max} . \frac{\Delta k}{2} - t . \frac{\Delta \omega}{2} = 0$$

$$\Rightarrow x_{max}(t) = \frac{\Delta \omega}{\Delta k} . t$$

$$\Rightarrow v_{grupo} = \frac{d x_{max}(t)}{dt} = \frac{\Delta \omega}{\Delta k}$$

que é ≠ das 3 v_{fase} das 3 ondas planas.



As três ondas têm velocidades de fase diferentes. A interferências dessas 3 ondas planas é que vai determinar a v_{grupo} do pacote de ondas.

Em geral v_{grupo} é diferente das v_{fase}.