Estrutura Geral da Mecânica Ondulatória

Ney Lemke

Mecânica Quântica

2013

Resumo

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$$

onde:

$$\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

$$\psi(x,t) = u_E e^{-iEt/\hbar} \quad \hat{H}u_E(x) = Eu_E(x)$$

Observações

- $$\int_{-\infty}^{\infty} dx u_{E_1}^*(x) u_{E_2}(x) = \delta_{E_1,E_2}$$

  o valor a.
- Uma vez que o sistema é medido o pacote de onda colapsa e em medidas imediatamente subsequentes o observável A valerá a.

Teorema:

$$\sum_a |C_a|^2 = 1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^* \psi = 1$$

$$\int dx \psi^* \sum_a C_a u_a$$

$$\sum_{a,a'} C_a C_{a'}^* \int dx u_a u_{a'}^* = \sum_{a,a'} C_a C_{a'}^* \delta_{aa'} = \sum_a |C_a|^2 = 1$$

Teorema:

$$\sum_a u_a^*(x)u_a(y) = \delta(x-y)$$

$$\sum_a C_a^* C_a = \sum_a \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x) u_a^*(x) \int_{-\infty}^{\infty} dy \psi^*(y) u_a(y) = 1$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \psi^*(y)\psi(x) \sum_a u_a(x)u_a(y) = 1$$

A única forma de satisfazermos essa igualdade é se:

$$\sum_a u_a^*(x)u_a(y) = \delta(x-y)$$

Operador Conjugado

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^* Q^\dagger \psi = \int_{-\infty}^{\infty} dx (Q\psi(x))^* \psi$$

Operador Auto-Adjunto:

$$Q^\dagger = Q$$

Teorema

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$$

$$\int dx (AB\phi)^* \psi = \int dx (A\chi)^* \psi = \int dx \chi^* A^\dagger \psi$$

$$= \int dx \phi^* B^\dagger A^\dagger \psi$$

Teorema

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4}\left\langle i[A,B]\right\rangle^2$$

Este resultado mostra que que se A e B não comutam eles não podem ser medidos simultaneamente.

Degenerescência e Observáveis Simultâneos

Teorema: Se u_a são autofunções de A e B simultaneamente para qualquer a então $[A, B] = 0$.

$$Au_a = au_a \quad Bu_a = bu_a$$

$$ABu_a = abu_a = bau_a = BAu_a$$

Logo:

$$AB = BA$$

Degenerescência e Observáveis Simultâneos

Se $[A, B] = 0$ as autofunções de A são também autofunções de B se as autofunções são não degeneradas.

$$ABu_A = BAu_A = aBu_A$$

Se as autofunções de A são não degeneradas temos que:

$$Bu_a = bu_a$$

O que acontece no caso degenerado?

Caso degenerado

$$Au_A = au_a^1 \quad Au_a^2 = au_A^2$$

$$Bu_a^1 = b_{11}u_a^1 + b_{12}u_a^2 \quad Bu_a^2 = b_{21}u_a^1 + b_{22}u_a^2$$

Escolhemos então v_a^1 e v_a^2 tais que:

$$Av_{ab} = av_{ab} \quad Bv_{ab} = bv_{ab}$$

Caso degenerado

Se houver ainda um terceiro operador que comute com A e B, C neste caso podemos extender esse processo e definir:

$$Aw_{abc} = aw_{abc} \quad Bw_{abc} = bw_{abc}$$

$$Cw_{abc} = cw_{abc}$$

Caso degenerado

Neste caso dizemos que os observáveis A, B e C formam um conjunto completo de observáveis que comutam (admitimos que as autofunções w_{abc} são não degeneradas.
Os observáveis A e B e C são as quantidades que podemos conhecer simultâneamente de um determinado sistema físico.
Exemplo: E, L^2 e L_z no caso do átomo de hidrogênio.

Dependência Temporal

$$\langle A_t \rangle = \int \psi^*(x,t) A(t) \psi(x,t)$$

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \int dx \left[\frac{\partial \psi^*}{\partial t} A \psi + \psi^* \frac{\partial A}{\partial t} \psi + \psi^* A \frac{\partial \psi}{\partial t} \right]$$

$$= \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle + \int dx \left[\left(\frac{1}{i\hbar} H \psi \right)^* A \psi \right] + \left[\psi^* A \left(\frac{1}{i\hbar} H \psi \right) \right]$$

$$= \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int dx \left[-\psi^* H A \psi + \psi^* A H \psi \right]$$

$$= \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle + \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle$$

Dependência Temporal $\langle x \rangle$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$$

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle [H, x] \rangle$$

$$= \frac{i}{\hbar}\left\langle \left[\frac{p^2}{2m} + V(x), x \right] \right\rangle$$

$$= \frac{i}{\hbar}\left\langle \left[\frac{p^2}{2m}, x \right] \right\rangle$$

Dependência Temporal $\langle x \rangle$

$$\left[\frac{p^2}{2m}, x\right] = \frac{1}{2m}[p^2, x]$$

$$\frac{1}{2m}(p^2x - xp^2 + pxp - pxp)$$

$$\frac{1}{2m}(p[p, x] + [p, x]p) = \frac{\hbar}{im}p$$

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{\langle p \rangle}{m}$$

Dependência Temporal $\langle p \rangle$

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left\langle \left[\frac{p^2}{2m} + V(x), p\right] \right\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [V(x), p]\rangle$$

$$\frac{\hbar}{i} V \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}(V\psi)$$

$$\frac{\hbar}{i} V \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\hbar}{i}\frac{\partial V}{\partial x} - \frac{\hbar}{i} V \frac{\partial \psi}{\partial x} = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x}$$

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle$$

Limite Clássico

$$m\frac{d^2\langle x\rangle}{dt^2} = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle$$

Note que:

$$\left\langle \frac{dV}{dx} \right\rangle \neq \frac{d\langle V(\langle x\rangle)}{d\langle x\rangle}$$

$$F(x) = F(\langle x\rangle) + (x - \langle x\rangle)F'(\langle x\rangle)$$

$$F(x) \sim F(\langle x\rangle)$$