Postulado da Expansão

Ney Lemke

Mecânica Quântica

2012

Outline

1. Autovalores e autofunções
2. Partícula em uma Caixa
3. Colapso
4. Outros Resultados

Outline

1. Autovalores e autofunções
2. Partícula em uma Caixa
3. Colapso
4. Outros Resultados

Equação de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\right]\psi(x,t) = \hat{H}\psi(x,t)$$

Separação de Valores:

$$\psi(x,t) = u(x)T(t)$$

Usando separação de variáveis tempos que:

$$\frac{i\hbar T'}{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{u''}{u} + V$$

$$i\hbar T' = ET \quad T(t) = Ae^{-i\hbar Et/\hbar}$$

Equação de Autovalores

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2} + V(x)u(x) = Eu(x)$$

$$\hat{H}u = Eu$$

Operador Linear

Um operador Linear deve satisfazer asseguintes condições:

1. $L(\alpha u_1) = \alpha L(u_1)$
2. $L(u_1 + u_2) = L(u_1) + L(u_2)$
3. $L(0) = 0$

Operadores Lineares - Exemplos

$$\hat{L} = \frac{df(x)}{dx} - 2f(x)$$

$$\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

Postulado da Expansão

A função de onda pode ser escrita como:

$$\psi(x,t) = \sum_n C_n u_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} +$$

$$\int dE C(E) u_E(x) e^{-iEt/\hbar}$$

Outline

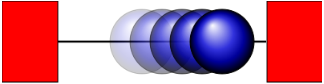
1 Autovalores e autofunções

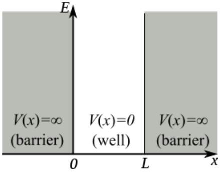
2 Partícula em uma Caixa

3 Colapso

4 Outros Resultados

Descrição Física





Descrição Matemática

$$u(0) = u(a) = 0$$

A equação de Schrödinger nesse caso pode ser escrita como:

$$\frac{d^2u}{dx^2} + \frac{2mEu}{\hbar^2} = 0$$

$$k^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2}$$

Autofunções

$E < 0$

$$u'' - k^2 u = 0 \quad u = Ae \pm kx$$

Não satisfaz as condições de contorno.

$E > 0$

$$u'' + k^2 u = 0$$

$$u(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

Usando a condição de contorno, temos que $B = 0$ e

$$ka = n\pi$$

Autovalores de Energia

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2} \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

$$u_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

Normalização

$$\int_0^a dx |A_n|^2 \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) = \frac{a}{2}$$

$$A_n = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

Note que:

$$\int_0^a u_n(x) u_m(x)\, dx = \delta_{nm}$$

Resultados

Vamos assumir que a partícula está em um dos seus autoestados u_n.

Estado Fundamental

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^2}$$

Valor esperado Momentum

$$\begin{aligned}
\langle p \rangle &= \int_0^a dx u_n^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) u_n(x) \\
&= \frac{-2i\hbar}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = 0
\end{aligned}$$

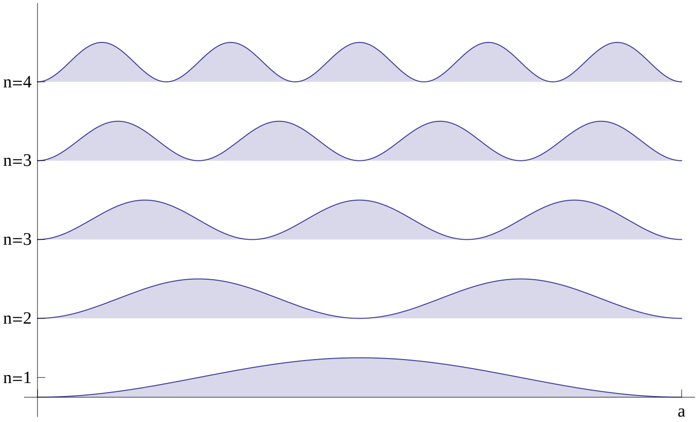
Resultados

Energia Cinética

$$\langle p^2 \rangle = 2mE = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{a^2}$$

$$K = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}$$

Densidades de Probabilidade



Exercício

Resolva a equação de Schrödinger para uma partícula em uma caixa. A partícula está concentrada na metade da caixa em uma região de tamanho δ.

- Represente a função de onda.
- Garanta que a função de onda esteja normalizada.
- Calcule A_n.
- Escreva $\psi(x, t)$
- Calcule $\langle p \rangle$ em t=0.
- Calcule $\langle x \rangle$ em t=0.
- Calcule $\langle E \rangle$.

$\langle H \rangle$

$$
\begin{aligned}
\langle H \rangle &= \int_0^a dx \psi^* \hat{H} \psi \\
&= \int_0^a dx \psi^* \hat{H} \sum_n A_n u_n(x) \\
&= \int_0^a dx \psi^* \sum_n E_n A_n u_n(x) \\
&= \sum_n E_n A_n \int_0^a dx \psi^* u_n \\
&= \sum_n E_n A_n A_n^* = \sum_n E_n |A_n|^2
\end{aligned}
$$

Interpretação

$$\langle H \rangle = \sum_n E_n P_n$$

P_n significa a probabilidade de medir E_n!

Outline

1. Autovalores e autofunções
2. Partícula em uma Caixa
3. Colapso
4. Outros Resultados

Colapso

Se medirmos duas vezes a energia de um sistema (ou qualquer outro observável) os resultados **devem ser iguais**. A única forma de obtermos isso é que a função de onda colapse após a primeira medida.

Comentários

- O colapso ocorre para garantir a objetividade das medidas físicas.
- O colapso é um processo não descrito pela eq. de Schrödinger.
- O colapso ocorre quando existe interação entre o objeto quantico e um objeto macroscópico.

Partícula em um anel

Considere uma partícula em um anel de raio unitário.

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2} = Eu \quad \frac{d^2u}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}u = 0$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad u(0) = u(2\pi) = 0$$

$$u_n = A_n e^{ik\varphi}$$

Aplicando a condição de contorno:

$$2k\pi = 2n\pi \quad k = n$$

Partícula em um anel

Além dissso as funções devem ser normalizadas:

$$\int_0^{2\pi} |A_n|^2 u_n^*(x) u_n(x) dx = 1 \quad A_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

As funções de onda:

$$u_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{in\varphi} \quad n = \ldots, -1, 0, 1, \ldots$$

Partícula em um anel-Exercício

Suponha $\psi(\varphi) = N\cos^2(\varphi)$

- Determne N para que a função esteja normalizada.
- Qual é a probabilidade de medirmos $n = -2$?

Outline

1. Autovalores e autofunções
2. Partícula em uma Caixa
3. Colapso
4. Outros Resultados

Autofunção de momento

Dizemos que um determinado autovalor é degenerado se existirem dois autovetores ou autofunções diferentes com o mesmo autovalor.

Exemplo:

Considere a partícula livre:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

As autofunções:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ikx} \qquad \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ikx}$$

Possuem a mesma energia.

Operador Paridade

$$P\psi(x) = \psi(-x)$$

$$Pu = \lambda u \quad P^2 u = \lambda^2 u = u$$

$$\lambda = \pm 1$$

$$P\psi^+(x) = \psi^+(x) \quad P\psi^-(x) = -\psi^-(x)$$

Qualquer função ψ pode ser escrita como a soma de autofunções do operador paridade.

$$\psi = \frac{1}{2}\left[\psi(x) + \psi(-x)\right] + \frac{1}{2}\left[\psi(x) - \psi(-x)\right]$$

Operador Paridade

Considere:

$$\psi(x,0) = \psi(-x,0) = \psi^{+}(x)$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$$

Vamos assumir que $[\hat{P},\hat{H}] = 0$

$$i\hbar\frac{\partial P\psi}{\partial t} = P\hat{H}\psi$$

$$i\hbar\frac{\partial(P\psi)}{\partial t} = \hat{H}(P\psi)$$

Operador Paridade

Ou seja se P e H comutam se em $t = 0$ a função é par ela seguirá sendo par em todos os instantes de tempo. Isso ocorre se $V(x) = V(-x)$.
Este resultado é mais geral, seja um operaor $\hat{M}$ e $[\hat{M}, \hat{H}] = 0$.
Se o sistema inicialmente está em um dos autoestados de M seguirá sendo uma autofunção de $\hat{M}$. Nestes casos em analogia com a Mecânica Clássica, M é dito uma constante de movimento.