Aula 5

Equações de autovalores

Operadores, autovalores, autofunções

Princípios da mecânica quântica

Operadores e autoestados de spin

Comutadores

Equações de autovalores

operadores
autovalores
autofunções
autoestados

Mecânica Quântica

(versão de Schrödinger)

Mecânica clássica

$$F = m\,a$$

$$F = -\frac{\partial V}{\partial x} \qquad a = \frac{d^2 x}{dt^2}$$

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = -\frac{1}{m}\frac{\partial V}{\partial x}$$

$$\boxed{V \rightarrow x(t)}$$

Mecânica quântica

$$x(t) \rightarrow \Psi(x,t)$$

Equação de Schrödinger

$$i\,\hbar\,\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\,m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\,\Psi$$

$$\boxed{V \rightarrow \Psi(x,t)}$$

$$i\,\hbar\,\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\,\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{\partial^2\,\Psi}{\partial x^2} + V\,\Psi$$

Ansatz : $$\Psi(x,t) \;=\; \psi(x)\,e^{-i\,E\,t/\hbar}$$

$$i\,\cancel{\hbar}\,(\frac{-i\,E}{\cancel{\hbar}})\,\psi(x)\,\cancel{e^{-i\,E\,t/\hbar}} = -\,\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{\partial^2\,\psi(x)}{\partial x^2}\,\cancel{e^{-i\,E\,t/\hbar}} + V\,\psi(x)\,\cancel{e^{-i\,E\,t/\hbar}}$$

$$E\,\psi = -\,\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{\partial^2\,\psi}{\partial x^2} + V\,\psi$$

Definição : $$-\,\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{\partial^2\,\psi}{\partial x^2} + V\,\psi \;=\; \hat{H}\,\psi$$

Equação de Schrödinger
Independente do Tempo
(ESIT)

$$E\,\psi = \hat{H}\,\psi$$

$$\boxed{\hat{H}\,\psi \;=\; E\,\psi}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\,m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V$$

Operador Hamiltoniano

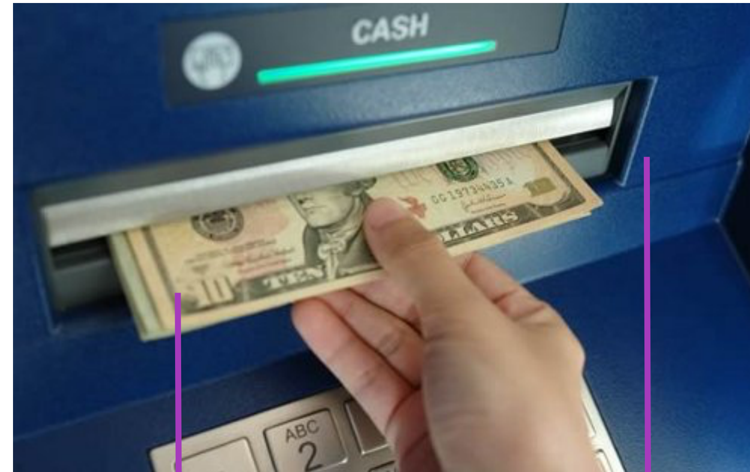
Operador = instrução, prescrição

Precisa agir sobre uma função !

$$\hat{H}\,\psi = E\,\psi$$

operador	função	número	função
	(autofunção)	(autovalor)	(autofunção)
	(autoestado)		(autoestado)

Equação de autovalores !



autoestado operador autovalor autoestado

O autoestado contém informações das propriedades observáveis

O operador as extrai !

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\,m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V$$

Operador Hamiltoniano

Definimos o operador momento:

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

$$\frac{\hat{p}^2}{2\,m} = \frac{1}{2\,m}(-\,i)\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial x}(-\,i)\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial x} = -\,\frac{\hbar^2}{2\,m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

energia cinética !

$\hat{H} =$ energia cinética + energia potencial = energia total do sistema

$\hat{H}\,\psi = E\,\psi$ resolvemos e encontramos a função de onda e a energia !

Momento da partícula livre:

$$\Psi(x,t) \,=\, N\;\, e^{i\,(p\,x - E\,t)/\hbar} \qquad\qquad \hat{p} \,=\, -\,i\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{p}\,\Psi(x,t) \,=\, N\,(-\,i\,\hbar)\,\frac{\partial}{\partial x}\,e^{i\,(p\,x - E\,t)/\hbar} \,=\, N\;\, p\;\, e^{i\,(p\,x - E\,t)/\hbar}$$

$$\boxed{\hat{p}\,\Psi(x,t) \,=\, p\,\Psi(x,t)}$$

Energia da partícula livre:

$$\Psi(x,t) \;=\; N \;\; e^{i\,(p\,x - E\,t)/\hbar}$$

$$\hat{H} \;=\; -\,\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$\boxed{\hat{H}\,\Psi \;=\; \frac{p^2}{2\,m}\,\Psi}$$

$$\hat{H}\,\psi \;=\; E\,\psi$$

$$E \;=\; \frac{p^2}{2\,m}$$

"Átomo de hidrogênio 2.0"

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\,m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V \qquad V = -\frac{Ze^2}{4\,\pi\,\epsilon_0}\,\frac{1}{r}$$

energia potencial

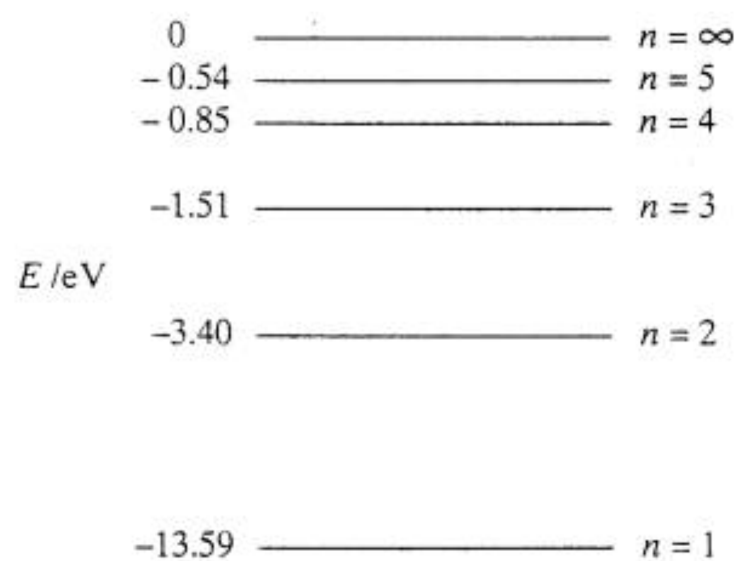
$$\hat{H}\,\psi = E\,\psi$$

Partícula em movimento confinado !

Esperamos quantização !

Quantização emergente !!!

$$\hat{H}\,\psi_n = E_n\,\psi_n$$



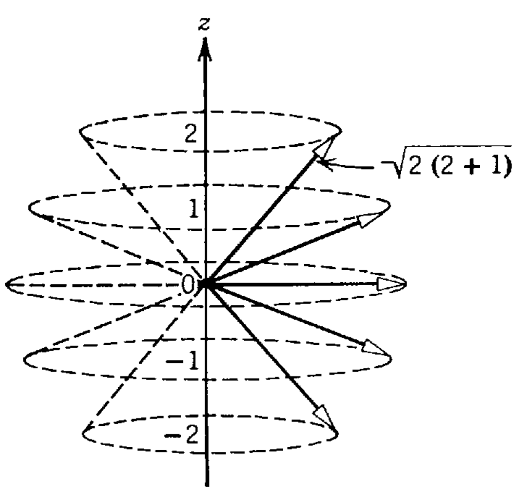
ψ_3

ψ_2

ψ_1

$$\hat{H}\,\psi = E\,\psi$$

$$E = -\frac{m}{2}\left(\frac{Z\,e^2}{4\,\pi\,\epsilon_0\,\hbar}\right)^2\frac{1}{n^2}$$



Princípios da Mecânica Quântica

1) Para as grandezas observáveis existem operadores, autofunções e autovalores.

$$\hat{H}\,\psi = E\,\psi$$

dagger

2) Os operadores são **hermitianos:** $[\hat{O}]^\dagger = \hat{O}$

$$[\hat{O}]^\dagger = [\,[\,\hat{O}\,]^*\,]^T$$

adjunto de O = transposto do complexo conjugado

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \qquad \hat{A}^* = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \hat{A}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}$$

A é hermitiano !

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\,m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V$$

$$\hat{H}^\dagger = \hat{H}$$

H é hermitiano !

3) Os operadores hermitianos possuem autovalores reais

$$\hat{H}\,\psi_n = E_n\,\psi_n$$

4) O resultado de uma medida é sempre um dos autovalores do operador do observável

$$\hat{H}\,\psi_n = E_n\,\psi_n$$

5) Operadores compatíveis admitem conjuntos de autofunções simultâneas

Dois operadores são compatíveis se eles comutam

Dois operadores A e B comutam se o comutador entre eles for zero:

Comutador : $$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Operadores compatíveis : $$[\hat{A}, \hat{B}] = 0$$

Equação de autovalores do spin

Operadores de spin

Autoestados de spin

Autovalores de spin

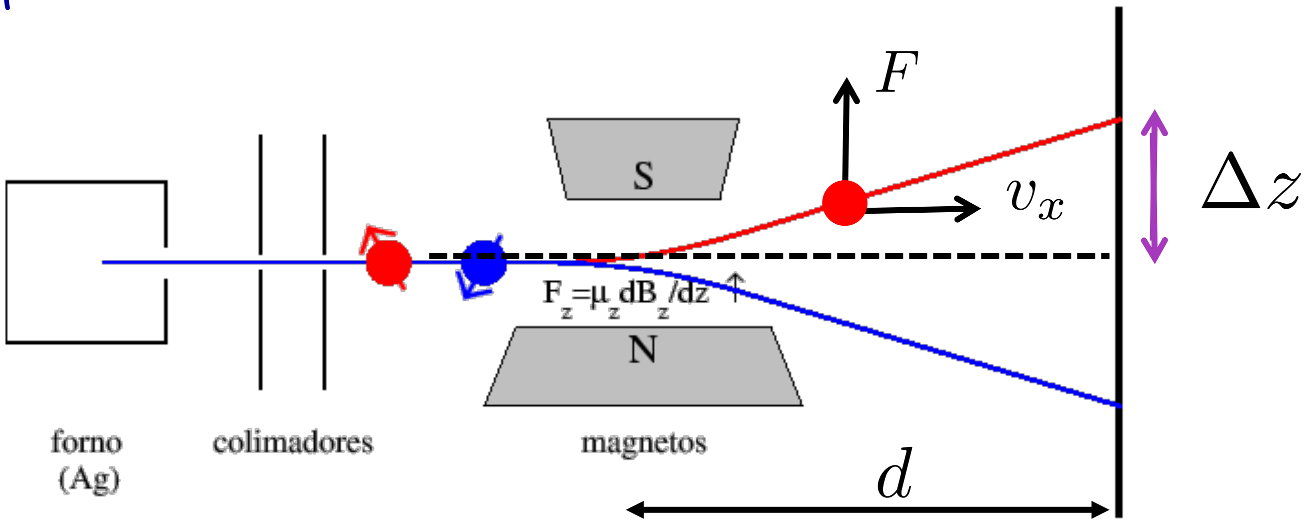
Estes nós medimos !

Stern

Gerlach

Medida do autovalor do spin

Stern - Gerlach
Phipps -Taylor



$$F = g_s \, \mu_b \, m_s \, \frac{\partial B}{\partial z}$$

$$F = m \, a$$

$$a = \frac{g_s \, \mu_b \, m_s}{m} \, \frac{\partial B}{\partial z}$$

$$\Delta z = \frac{1}{2} \, \frac{g_s \, \mu_b \, m_s}{m} \, \frac{\partial B}{\partial z} \, (\frac{d}{v_x})^2$$

$$\Delta z = \frac{1}{2} \, a \, (\Delta t)^2$$

$$d = v_x \, \Delta t$$

$$\Delta z = \frac{1}{2} \, a \, (\frac{d}{v_x})^2$$

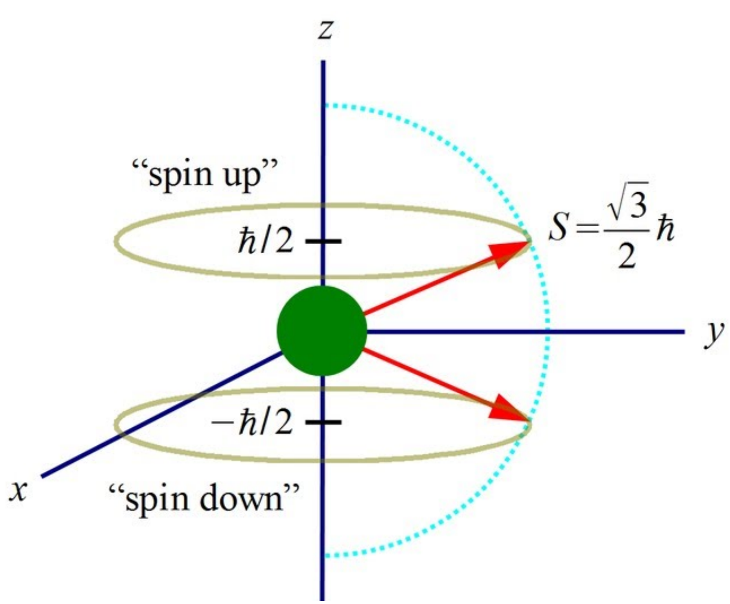
$$\Delta z = \frac{1}{2}\,\frac{g_s\,\mu_b\,m_s}{m}\,\frac{\partial B}{\partial z}\,\left(\frac{d}{v_x}\right)^2$$

Se $g_s = 2$, tudo é conhecido e obtemos m_s !

$$m_s = -\frac{1}{2}\,,\ +\frac{1}{2} \longrightarrow -s \le m_s \le +s \longrightarrow s = \frac{1}{2}$$

m_s observável, real e discreto

s observável, real e discreto



$$S^2 = s\,(s + 1)\,\hbar^2$$

$$S_z = m_s\,\hbar$$

Equação de autovalores para o spin

$$\begin{cases} \hat{S}^2\,\psi = s\,(s+1)\,\hbar^2\,\psi \\ \hat{S}_z\,\psi = m_s\,\hbar\,\psi \end{cases}$$

?

Autofunção $\longrightarrow$ Autoestado

$$\psi \rightarrow |\,\psi\,\rangle \qquad |\quad\rangle = \text{ket}$$

Dois autovalores e dois autoestados

$$\begin{cases} m_s\,\hbar = \dfrac{1}{2}\,\hbar \longrightarrow \psi_1 \\ m_s\,\hbar = -\dfrac{1}{2}\,\hbar \longrightarrow \psi_2 \end{cases}$$

Equação de autovalores para o spin

$$\psi_s = |\, s\,,\, m_s \,\rangle \quad \begin{cases} \psi_1 = |\, \frac{1}{2}\,,\, +\frac{1}{2} \,\rangle & \text{ou} \quad |\uparrow\rangle \\ \psi_2 = |\, \frac{1}{2}\,,\, -\frac{1}{2} \,\rangle & \text{ou} \quad |\downarrow\rangle \end{cases}$$

$$\hat{S}_z \,|\, \frac{1}{2}\,,\, +\frac{1}{2} \,\rangle = \frac{1}{2}\hbar \,|\, \frac{1}{2}\,,\, +\frac{1}{2} \,\rangle \quad \text{ou} \quad \hat{S}_z \,|\uparrow\rangle = +\frac{1}{2}\hbar\,|\uparrow\rangle$$

$$\hat{S}_z \,|\, \frac{1}{2}\,,\, -\frac{1}{2} \,\rangle = -\frac{1}{2}\hbar \,|\, \frac{1}{2}\,,\, -\frac{1}{2} \,\rangle \quad \text{ou} \quad \hat{S}_z \,|\downarrow\rangle = -\frac{1}{2}\hbar\,|\downarrow\rangle$$

Função de onda da partícula livre com spin

$$\Psi(x,t) = N\ e^{i\,(p\,x - E\,t)/\hbar}\ \psi_s$$

Autofunções de spin não dependem das coordenadas !
(o spin é o mesmo em qualquer ponto do espaço)

$\left.\begin{array}{l}\hat{S}_z \\ \psi_s\end{array}\right\}$ são matrizes !!!

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\psi_s \begin{cases} |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{cases}$$

é hermitiano !

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Funciona ?

$$\hat{S}_z\,|\uparrow\rangle = +\frac{1}{2}\hbar\,|\uparrow\rangle$$

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_z\,|\downarrow\rangle = -\frac{1}{2}\hbar\,|\downarrow\rangle$$

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Equação de autovalores para o spin

$$\left\{ \begin{aligned} \hat{S}_z \, \psi &= m_s \, \hbar \, \psi \\ \hat{S}^2 \, \psi &= s \, (s+1) \, \hbar^2 \, \psi \end{aligned} \right.$$

?

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$$

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Matrizes de Pauli

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$$

$$\hat{S}^2 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} +$$

$$+ \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} +$$

$$+ \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}^2 = \frac{3\,\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}^2\,\psi = s\,(s+1)\,\hbar^2\,\psi = \frac{3\,\hbar^2}{4}\,\psi$$

$$\hat{S}^2 = \frac{3\,\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad \psi = \psi_1 = |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}^2\,|\uparrow\rangle = \frac{3\,\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{3\,\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\boxed{\hat{S}^2\,|\uparrow\rangle = \frac{3\,\hbar^2}{4}\,|\uparrow\rangle}$$

Operadores compatíveis têm autofunções simultâneas

Dois operadores são compatíveis se eles comutam

Operadores A e B comutam se o comutador deles for zero

Comutador : $$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Operadores compatíveis : $$[\hat{A}, \hat{B}] = 0$$

Comutadores e operadores compatíveis

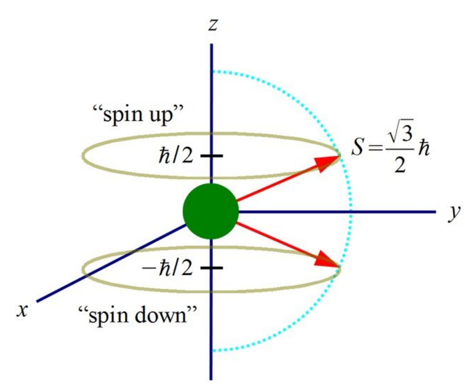
$$[\,S_x\,,\,S_y\,] = i\hbar\,S_z \qquad\qquad [\,S^2\,,\,S_x\,] = 0$$

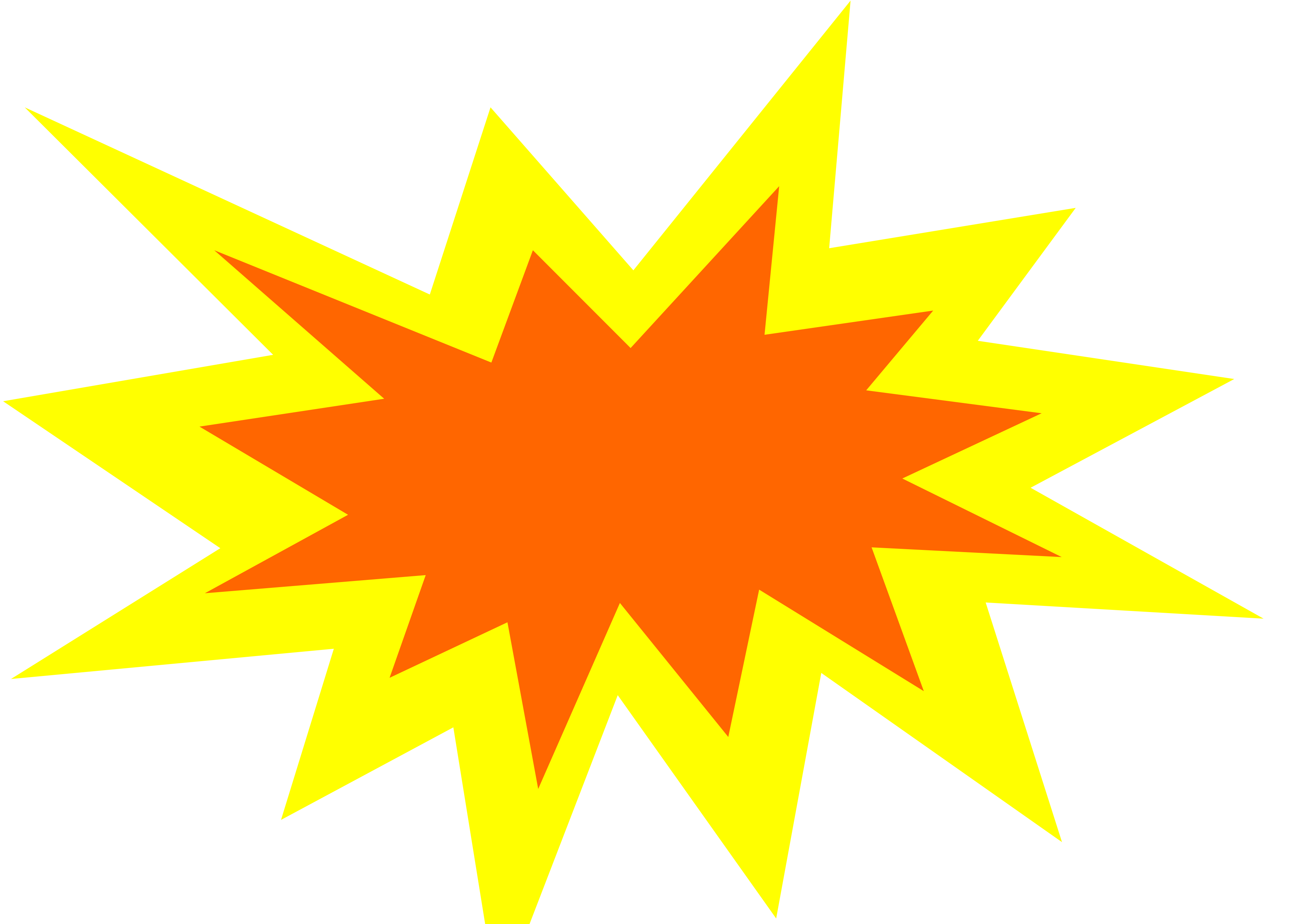
$$[\,S_y\,,\,S_z\,] = i\hbar\,S_x \qquad\qquad [\,S^2\,,\,S_y\,] = 0$$

$$[\,S_z\,,\,S_x\,] = i\hbar\,S_y \qquad\qquad [\,S^2\,,\,S_z\,] = 0$$

Não têm autoestados comuns !

Não podem ser conhecidos
ao mesmo tempo !





?

Eu inventei essas matrizes !

Pauli