AULA 14

Mecânica Quântica I

AULA 14

Problema de 2 corpos

Consideremos o problema de 2 corpos onde $\hat{\vec{p}}_a$, $\hat{\vec{x}}_a$ e $\hat{\vec{p}}_b$, $\hat{\vec{x}}_b$ são, respectivamente, os operadores do momento e coordenado das partículas A e B que possuem massas m_a e m_b e que estão submetidas a uma interação descrita pelo potencial $V = V(|\hat{\vec{x}}_a - \hat{\vec{x}}_b|)$.

O Hamiltoniano do sistema é

$$H = \frac{\hat{\vec{p}}_a^{\,2}}{2m_a} + \frac{\hat{\vec{p}}_b^{\,2}}{2m_b} + V(|\hat{\vec{x}}_a - \hat{\vec{x}}_b|) \quad (1)$$

Vamos introduzir os operadores das <u>coordenadas relativas</u> e <u>do centro de massa</u> (CM):

$$\hat{\vec{x}} = \hat{\vec{x}}_a - \hat{\vec{x}}_b \quad (2)$$

$$\hat{\vec{X}} = \frac{m_a \hat{\vec{x}}_a + m_b \hat{\vec{x}}_b}{m_a + m_b} \quad (3)$$

$$\Longrightarrow \quad \hat{\vec{x}}_a = \hat{\vec{X}} + \frac{m_b}{M}\hat{\vec{x}}, \qquad \hat{\vec{x}}_b = \hat{\vec{X}} - \frac{m_a}{M}\hat{\vec{x}}$$

e os operadores do <u>momento relativo</u> e <u>total</u>

$$\hat{\vec{p}} \equiv \frac{m_b \hat{\vec{p}}_a - m_a \hat{\vec{p}}_b}{m_a + m_b} \equiv \mu \left(\frac{\hat{\vec{p}}_a}{m_a} - \frac{\hat{\vec{p}}_b}{m_b} \right) \quad (4)$$

onde $\mu \equiv \dfrac{m_a m_b}{m_a + m_b} = \dfrac{m_a m_b}{M}$ (massa reduzida do sistema)

(1)

$$\hat{\vec{P}} = \hat{\vec{p}}_a + \hat{\vec{p}}_b \quad (5)$$

$$\hat{\vec{p}}_a = \frac{m_a}{M}\hat{\vec{P}} + \hat{\vec{p}} \; ; \; \hat{\vec{p}}_b = \frac{m_b}{M}\hat{\vec{P}} - \hat{\vec{p}}$$

Vemos que como $[\hat{\vec{p}}_a, \hat{\vec{p}}_b] = 0$

$$\frac{\hat{\vec{P}}^2}{2M} = \frac{(\hat{\vec{p}}_a + \hat{\vec{p}}_b)^2}{2M} = \frac{\hat{\vec{p}}_a^{\,2}}{2M} + \frac{\hat{\vec{p}}_b^{\,2}}{2M} + \frac{\hat{\vec{p}}_a \cdot \hat{\vec{p}}_b}{M}$$

$$\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2\mu} = \left(\frac{\hat{\vec{p}}_a}{m_a} - \frac{\hat{\vec{p}}_b}{m_b}\right)^2 \frac{\mu^2}{2\mu} = \frac{\mu}{2}\left(\frac{\hat{\vec{p}}_a^{\,2}}{m_a^2} + \frac{\hat{\vec{p}}_b^{\,2}}{m_b^2} - 2\frac{\hat{\vec{p}}_a \cdot \hat{\vec{p}}_b}{m_a m_b}\right)$$

$$= \frac{m_b}{M}\left(\frac{\hat{\vec{p}}_a^{\,2}}{2m_a}\right) + \frac{m_a}{M}\left(\frac{\hat{\vec{p}}_b^{\,2}}{m_b}\right) - \frac{\hat{\vec{p}}_a \cdot \hat{\vec{p}}_b}{M}$$

$$\frac{\hat{\vec{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2\mu} = \frac{\hat{\vec{p}}_a^{\,2}}{2M}\left(1 + \frac{m_b}{m_a}\right) + \frac{\hat{\vec{p}}_b^{\,2}}{2M}\left(1 + \frac{m_a}{m_b}\right) = \frac{\hat{\vec{p}}_a^{\,2}}{2m_a} + \frac{\hat{\vec{p}}_b^{\,2}}{2m_b}$$

logo (1) pode ser escrito como

livre   central

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2M} + \underbrace{\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2\mu} + V(|\hat{\vec{x}}|)}_{\hat{H}_{rel.}} \quad (6)$$

além disso

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = [\hat{X}_i, \hat{P}_j] = i\hbar\,\delta_{ij} \quad (7a)$$

$$[\hat{x}_{ai} - \hat{x}_{bi}, \frac{\mu}{m_a}\hat{p}_{aj} - \frac{\mu}{m_b}\hat{p}_{bj}] = \frac{\mu}{m_a}[\hat{x}_{ai}, \hat{p}_{aj}] + \frac{\mu}{m_b}[\hat{x}_{bi}, \hat{p}_{bj}]$$

$$= \left(\frac{\mu}{m_a} + \frac{\mu}{m_b}\right) i\hbar\,\delta_{ij} = i\hbar\,\delta_{ij}$$

$$[\hat{x}_i, \hat{P}_j] = [\hat{X}_i, \hat{p}_j] = 0 \quad (7b) \qquad (\text{Mostre!})$$

$$\Rightarrow [\hat{H}, \hat{P}_j] = 0 \ , \ [\hat{P}_i, \hat{P}_j] = 0 \ , \ [\hat{p}_i, \hat{P}_j] = 0$$

o momento total do sistema é uma constante de movimento.

O momento angular total do sistema também se divide em um operador do centro de massa e um operador para o movimento relativo:

$$\hbar \hat{\vec{J}} = \hat{\vec{x}}_a \times \hat{\vec{p}}_a + \hat{\vec{x}}_b \times \hat{\vec{p}}_b = \left(\hat{\vec{X}} + \frac{m_b}{M}\hat{\vec{x}}\right) \times \left(\frac{m_a}{M}\hat{\vec{P}} + \hat{\vec{p}}\right)$$

$$+ \left(\hat{\vec{X}} - \frac{m_a}{M}\hat{\vec{x}}\right) \times \left(\frac{m_b}{M}\hat{\vec{P}} - \hat{\vec{p}}\right) = \hat{\vec{X}} \times \hat{\vec{P}}\frac{m_a}{M} + \cancel{\hat{\vec{X}} \times \hat{\vec{p}}} + \cancel{\frac{m_a m_b}{M}\hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{P}}}$$

$$+ \left(\hat{\vec{X}} \times \hat{\vec{P}}\right)\left(\frac{m_b}{M}\right) - \cancel{\hat{\vec{X}} \times \hat{\vec{p}}} - \cancel{\frac{m_a m_b}{M}\hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{P}}} + \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{p}}\left(\frac{m_a}{M}\right) = \hat{\vec{X}} \times \hat{\vec{P}} + \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{p}}$$

$$= \hbar \hat{\vec{L}}_{CM} + \hbar \hat{\vec{L}} \quad (8) \qquad [\vec{L}_{CM}, \vec{L}] = 0 \quad (\text{Verifique!})$$

gera rotações no espaço do movimento do CM

$[\hat{p}_i, \hat{L}_j] = i\,\varepsilon_{ijk}\,\hat{p}_k$ (9a) $\Rightarrow$ momento relativo é um operador vetorial com relação ao mom. angular relativo que gera rotações no espaço do movimento relativo

(Mostre!)

$[\hat{x}_i, \hat{L}_j] = i\,\varepsilon_{ijk}\,\hat{x}_k$ (9b) $\Rightarrow$ coord. relativa é um operador vetorial com relação ao mom. angular relativo

(Mostre!)

mas $[\hat{X}_i, \hat{L}_j] = [\hat{P}_i, \hat{L}_j] = 0$ (9c)

Assim as constantes de movimento são:

$$\hat{H}_{rel}, \hat{P}^2, \vec{\hat{P}}, \vec{\hat{L}}, \vec{\hat{L}}_{CM}$$

mas esses operadores não são todos compatíveis uns com os outros.

$\boxed{\text{Movimento do CM}}$: escolhe-se os observáveis compatíveis com o movimento de uma partícula livre $(\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3)$ ou $(\hat{H}_{CM}, \hat{L}^2_{CM}, \hat{L}_{CMz})$
$\hat{P}^2$

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2\psi_E(\vec{r}) = E\,\psi_E(\vec{r}) \qquad \vec{P} \to \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$$

• $\underset{\langle \vec{r}\,|\,k_1 k_2 k_3\rangle}{\psi_{\vec{k}}(\vec{r})} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \qquad E_{CM} = \frac{\hbar^2 k^2}{2M} = \frac{\vec{P}^2}{2M}$ é solução

autofunções simultâneas de P_1, P_2, P_3

mas
$$\nabla^2 \equiv \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2_{CM}}{r^2} \qquad E_{CM} = \frac{\vec{P}^2}{2M}$$

• $\langle \vec{r}\,|\,E\ell m\rangle = R_{E\ell}(\vec{r})\, Y_{\ell m}(\theta\phi)$ autofunções simultâneas de E, L^2 e L_z

$\boxed{\text{Movimento Relativo}}$: H_{rel}, L^2, L_z são observáveis compatíveis

Se uma ou ambas as partículas possuirem spin, haverá operadores de spin $\vec{S}^{(a)}$ e/ou $\vec{S}^{(b)}$ também como observáveis que devem ser acrescentados à lista de constantes de movimento. Quando a interação é central como em (6) ambos os spins são constantes de movimento. Se a força depender do spin, os spins individuais não serão mais constantes de movimento.

Digressão sobre Partícula Livre

As funções de onda de partícula livre são necessárias em vários contextos em M.Q.

— para descrever partículas livres

— como base completa do espaço $\mathcal{H}$ útil em várias situações de interesse físico

— em problemas de espalhamento, para representar os estados iniciais e finais assintóticos (in/out) das colisões

Considere uma partícula de massa m e spin 0 descrita pelo Hamiltoniano

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

Os estados estacionários desse sistema, como já vimos, satisfazem

$$\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \qquad \text{com } E = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{\hbar \vec{k}^2}{2m}$$

uma base de autoestados para $|\psi\rangle$ é $\{|\vec{p}\rangle = |p_x\, p_y\, p_z\rangle\}$ autoestados simultâneos das três componentes do operador $\hat{\vec{p}}$, $[p_i, p_j] = 0$

$$\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}|\vec{p}\rangle = E\,|\vec{p}\rangle$$

que na base das coordenadas tem autofunções

$$\langle \vec{r}|\vec{p}\rangle = \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

ortogonais

$$\int d^3r\, \varphi^*_{\vec{k}}(\vec{r})\, \varphi_{\vec{k}'}(\vec{r}) = \delta(\vec{k}-\vec{k}')$$

e formam um conjunto completo

$$\int d^3k\, \varphi_{\vec{k}}(\vec{r})\, \varphi^*_{\vec{k}}(\vec{r}\,') = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,')$$

mas $\hat{p}^2$ não só é invariante por translação como também é invariante por rotação $\Rightarrow$ $\hat{p}^2, \hat{L}^2, \hat{L}_z$ são também um conj. completo de operadores compatíveis : $|E\ell m\rangle$ é também uma base possível

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

$$\frac{\hat{p}^2}{2m}|E\ell m\rangle = E\,|E\ell m\rangle$$

$$\langle\vec{r}|E\ell m\rangle \equiv \psi^0_{E\ell m}(\vec{r}) = R_{E\ell}(r)\, Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right) - E\right] R_{E\ell}(r) = 0$$

definindo $\rho = kr$

$$\left[\frac{1}{\rho^2}\frac{d}{d\rho}\rho^2\frac{d}{d\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + 1\right] R_\ell(\rho) = 0$$

essa equação tem 2 soluções L.I

$$j_\ell(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}}\; J_{\ell+1/2}(\rho)$$ que é regular em $\rho=0$ (analítica)

$$\eta_\ell(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}}\; N_{\ell+1/2}(\rho)$$ que não é regular em $\rho=0$

(6)

de fato

$$j_\ell(\rho) \longrightarrow \frac{\rho^\ell}{(2\ell+1)!!} \quad , \quad \rho \to 0$$

$$(2\ell+1)!! = (2\ell+1)\,(2\ell-1)\ldots 1$$

$$\eta_\ell(\rho) \longrightarrow -\frac{(2\ell-1)!!}{\rho^{\ell+1}} \quad , \quad \rho \to 0$$

$$\int_0^\infty r^2 dr\, j_\ell(kr)\, j_\ell(k'r) = \frac{\pi}{2k^2}\,\delta(k-k')$$

além disso

$$j_\ell(\rho) \longrightarrow \frac{1}{\rho}\sin\left(\rho - \tfrac{1}{2}\ell\pi\right) \quad \rho \to \infty$$

$$\eta_\ell(\rho) \longrightarrow \frac{1}{\rho}\cos\left(\rho - \tfrac{1}{2}\ell\pi\right) \quad \rho \to \infty$$

As funções de onda de partícula livre nesse base são

$$\psi^0_{E\ell m}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{2}{\pi}\,\frac{k^2 dk}{dE}}\; j_\ell(kr)\; Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

de forma que

$$\int d^3r \left[\psi^0_{E\ell m}(\vec{r})\right]^* \psi^0_{E'\ell' m'}(\vec{r}) = \delta_{\ell\ell'}\,\delta_{mm'}\,\delta(E-E')$$

A função de onda que corresponde ao problema poderá ser escrita como

sistema relativo

$$\psi(\vec{x},\vec{X}) = e^{i\vec{P}\cdot\vec{X}/\hbar}\,\psi(\vec{x})$$

autovalores

auto-valores.

energia interna do sistema

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_x^2\psi(\vec{x})+V(|\vec{x}|)\,\psi(\vec{x})=\mathcal{E}\,\psi(\vec{x}) \qquad (10)$$

a energia total.

$$E=\mathcal{E}+\frac{\vec{P}^2}{2M} \qquad (11)$$

Note: a energia interna $\mathcal{E}$ depende ligeiramente na massa do núcleo em 2 isótopos estáveis do núcleo de hidrogênio

$m_p = 1836\ m_e \qquad m_{deuteron} = 3670\ m_e$

$\mu_{pe} = 0.99945\ m_e$ enquanto $m_{de} = 0.99973\ m_e$

essa diferença ínfima é suficiente para produzir deslocamentos de freqüência de luz emitida de uma mistura de hidrogênio e deutério. A intensidade relativa das linhas espectrais observadas do hidrogênio e deutério é usada pelos astrônomos para medir a abundância relativa do hidrogênio e deutério no meio interestelar.

Vamos agora estudar o movimento relativo, ou seja

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2\mu}+\hat{V}(\hat{x})\right]|E\ell m\rangle = E_\ell\,|\ell m\rangle \qquad (12)$$

$$|\hat{\vec{x}}| \equiv \hat{x}$$

$$\langle \vec{r}|E\ell m\rangle = \psi_{E\ell m}(\vec{r}) = R_{E\ell}(r)\, Y_{\ell m}(\theta,\phi) \quad (13)$$

onde

$$\left[\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(-\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right) + V(r) - E_\ell\right] R_{E\ell}(r) = 0 \quad (14)$$

definindo:

$$U(r) \equiv \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r) \quad (15a)$$

$$E_\ell = \frac{-\hbar^2 \beta^2}{2\mu} \quad (15b)$$

pode re-escrever (14) como

$$\left(\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - U(r) - \beta^2\right) R_\ell(\beta;r) = 0 \quad (16)$$

esa é a equação radial, apropriado para encontrar os estados ligados. i.e. $\beta^2 > 0$

Note que $[H, L_\pm] = 0$, $E = E_\ell$, não depende do valor m
$\Rightarrow$ cada valor de energia tem ao menos uma degenerescência

$2\ell+1$

Vamos introduzir a função

$$u_\ell(\beta;r) = r\, R_\ell(\beta;r) \quad (17)$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr} r^2 \frac{dR}{dr} = R'' + \frac{2}{r} R' = \frac{1}{r} u''$$

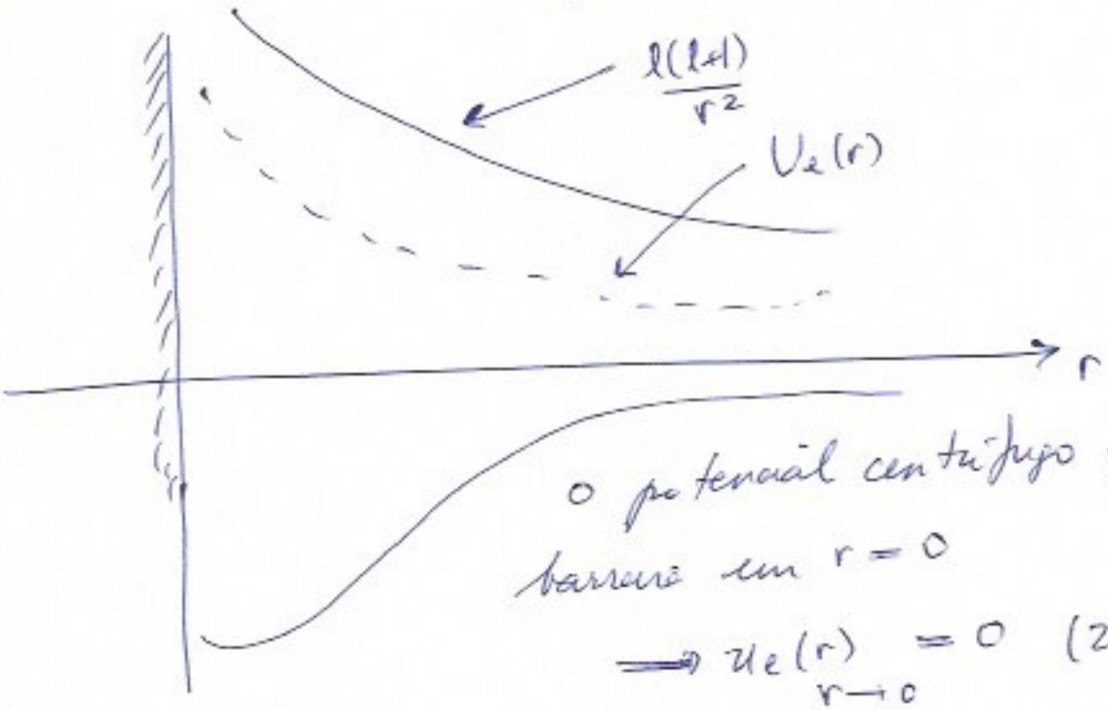
assim (16) pode ser escrita como

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - U_\ell(r) - \beta^2\right] u_\ell(\beta; r) = 0 \quad (18)$$

i.e. se reduz a equação de Schrödinger 1D com potencial $U_\ell(r)$, mas $r > 0$!

potenciál centrífugo

$$\text{onde } U_\ell(r) = U(r) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \quad (19)$$



o potenciál centrífugo produz uma barreira em $r = 0$

$$\Longrightarrow u_\ell(r) \underset{r\to 0}{=} 0 \quad (20)$$

Quando (20) é válida?

Consideremos um potenciál que satisfaça

$$\lim_{r\to 0} r^2 V(r) = 0$$

$$r^2 u_\ell'' - \ell(\ell+1) u_\ell = 0 \qquad r \simeq 0$$

$$u_\ell \sim j_\ell(r) r \sim \frac{r^{\ell+1}}{(2\ell+1)!!}, \; r \to 0$$

$$\Rightarrow u_\ell(r) \sim r^{\ell+1} \qquad r \longrightarrow 0$$

que é o mesmo comportamento de uma partícula livre.

O comportamento de $U(r)$ para $r \to \infty$ tem também implicação. A primeira vista poderíamos pensar que para qualquer potencial $U(r) \xrightarrow[r\to\infty]{} 0$ deveríamos ter solução para (18) que se aproximam assintoticamente das de equação de Schrödinger livre. Não é o caso!

Estamos interessados na forma assintótica das funções de onda de estados ligados para potenciais que tem forma

$$U(r) \sim \frac{\lambda}{r^s}, \quad r \to \infty$$

* se $l \neq 0$ e $s > 2$ o termo centrífugo domina para $r \to \infty$
$\Rightarrow$ a função de onda tende a ser combinação linear das solução de partícula livre

$$j_l(\rho) \sim \frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right) \quad \rho \to \infty$$

Bessel esféricas
$\rho = i\beta r$

$$\eta_l(\rho) \sim \frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right) \quad \rho \to \infty$$

$$R_l(r) \sim \frac{e^{-\beta r}}{r}$$

* se $l = 0$, $\forall s$ ou $l \neq 0$, $s < 2$ precisamos de solução assintótica para

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\lambda}{r^s} - \beta^2\right) u_l(\beta; r) = 0$$

consideremos um estado do contínuo para o qual esperamos

$$u \sim e^{ikr} e^{i\chi(r)}$$ ← desvio de fase da partícula livre.

com $\chi(r)$ variando lentamente com r

para um estado ligado $ik \to -\beta$

$$u_\ell \sim e^{-\beta r} e^{\chi(r)}$$

$$\frac{d^2u_\ell}{dr^2} = \frac{d}{dr}\left(-\beta u_\ell + \chi'(r)\, u_\ell\right) = \underline{-\beta\left(-\beta u_\ell\right.} + \left.\chi'(r)\, u_\ell\right)$$

$$+ \chi'(r)\left(-\beta u_\ell + \cancel{\chi'(r)\, u_\ell}^{\,0}\right) + \cancel{\chi''(r)}^{\,0}\, u_\ell = \left(+\frac{\lambda}{r^s} + \underline{\beta^2}\right) u_\ell$$

χ'' e $(\chi')^2$ serão ignorados pois χ varia devagar com r

$$-2\beta\, \chi'(r)\, u_\ell = \frac{\lambda}{r^s} u_\ell \qquad \frac{d\chi}{dr} = -\frac{\lambda}{2\beta r^s}$$

que é consistente com o fato que $\chi(r)$ varia lentamente com r

a forma assintótica de $u(\beta; r)$ é

$$u(r) \sim \underline{\underline{e^{-\beta r}}} \exp\left(\frac{\lambda}{2\beta(s-1)} r^{1-s}\right) \qquad s > 1$$

ou se $s = 1$, potencial Coulombiano

$$\chi \sim -\left(\frac{\lambda}{2\beta}\right) \ln r$$

nesse caso

$$R_\ell(\beta; r) \sim \frac{e^{-\beta r}}{r}\, r^{-\lambda/2\beta}$$

$$r \to \infty$$

$\lambda < 0$ se o potencial for atrativo, isso mostra que os estados ligados caem mais lentamente que aqueles que pertencem a potenciais mais atrativos que $1/r$ à grandes distâncias.