UNIDADE 2

Mecânica Quântica 1

Sylvio Canuto
IF - USP

PlayStation S T Q Q S S D

Operadores em Mecânica Quântica

A eq. Schrödinger para estados estacionários

$H\psi = E\psi$ admite um conjunto de soluções ψ_n e E_n que são os correspondentes autofunções e autovalores.

$\{\psi_n\}$ autofunções e seus correspondentes

$\{E_n\}$ autovalores

Para estados ligados $\psi_n \in \mathcal{L}^2$ ou seja as autofunções são de quadrado integrável.
Ou seja

$\int \psi_n^* \psi_n \, d\vec{r}$ é finito e não negativo e, portanto,

podem ser normalizados $\int \psi_n^* \psi_n \, d\vec{r} = 1$.

Vamos considerar o espaço vetorial formado pelas autofunções $\{\psi_n\}$ e definimos um produto escalar

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle \equiv \int \psi_n^* \psi_m \, d\vec{r} \geq 0$$

que, note, é não comutativo:

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \langle \psi_m | \psi_n \rangle^*$$

Nesse espaço (de Hilbert) definimos um operador linear A tal que

PlayStation

S T Q Q S S D

$$\begin{cases} A\psi_n = \varphi_n & \text{onde } \varphi_n \text{ tb pertence ao espaço} \\ A\alpha\psi_n = \alpha A\psi_n, & \alpha \text{ nº complexo qualquer} \\ A(\alpha\psi_n + \beta\psi_m) = \alpha A\psi_n + \beta A\psi_m \end{cases}$$

Considere $H\psi_n = E_n\psi_n$, então

$$\langle\psi_n|H\psi_n\rangle = E_n\langle\psi_n|\psi_n\rangle = E_n$$

Daí $\quad E_n = \langle\psi_n|H|\psi_n\rangle = \langle H\rangle_n$

No caso geral, se $A\psi_n = a_n\psi_n$

então $\quad a_n = \langle\psi_n|A|\psi_n\rangle$. O valor médio do operador A é seu autovalor a_n.

<u>Operador hermiteano</u> de A é A^+, definido como

$$\langle A\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|A^+|\psi\rangle$$

Se $A = A^+$ o operador é dito hermiteano e tem autovalores reais:

$$\underbrace{\langle\psi_n|A|\psi_n\rangle}_{a_n} = \langle A\psi_n|\psi_n\rangle^* = \langle\psi_n|A^+|\psi_n\rangle^* = \underbrace{\langle\psi_n|A|\psi_n\rangle^*}_{a_n^*}$$

então $a_n^* = a_n$ e a_n é real.

Observáveis físicas estão associadas com operadores hermiteanos.

PlayStation S T Q Q S S D

H é hermiteano

x é hermiteano, claramente. E daí $V(x)$ é hermiteano.

Vamos mostrar que o operador de momentum é hermiteano.

De fato:

$$\langle \psi_n | p_x | \psi_m \rangle = \int \psi_n^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_m \right) dx = -i\hbar \int \psi_n^* \frac{\partial \psi_m}{\partial x} dx$$

$$= \underbrace{\cancel{-i\hbar \int \frac{\partial}{\partial x} (\psi_n^* \psi_m) dx}}_{\text{nulo}} + i\hbar \int \frac{\partial \psi_n^*}{\partial x} \cdot \psi_m \, dx$$

$$= i\hbar \int \left(\frac{\partial \psi_n}{\partial x} \right)^* \psi_m \, dx = \int \left(-i\hbar \frac{\partial \psi_n}{\partial x} \right)^* \psi_m \, dx$$

$$= \langle p\psi_n | \psi_m \rangle$$

Então: $\langle p\psi_n | \psi_m \rangle = \langle \psi_n | p | \psi_m \rangle$ e $\underline{p = p^\dagger}$

Note que usamos

$$\underbrace{\frac{d}{dx} \int \psi_n^* \psi_m \, dx}_{\text{nulo}} = \int \frac{\partial \psi_n^*}{\partial x} \cdot \psi_m \, dx + \int \psi_n^* \frac{\partial}{\partial x} \psi_m \, dx$$

$$\Rightarrow \int \frac{\partial \psi_n^*}{\partial x} \cdot \psi_m \, dx = -\int \psi_n^* \frac{\partial \psi_m}{\partial x} dx$$

ou

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial x} \psi_n \middle| \psi_m \right\rangle = -\left\langle \psi_n \middle| \frac{\partial}{\partial x} \middle| \psi_m \right\rangle,$$ e o

spiral operador $\frac{\partial}{\partial x}$ é antihermiteano.

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^\dagger = -\left(\frac{\partial}{\partial x} \right).$$

Teorema de ortogonalidade:

Autofunções (de um operador hermiteano) pertencentes a diferentes autovalores são ortogonais.

$H\psi_n = E_n \psi_n$

$H\psi_m = E_m \psi_m$, então

1) $\langle \psi_n | H | \psi_m \rangle = \langle \psi_n | H\psi_m \rangle = E_m \langle \psi_n | \psi_m \rangle$

2) $\langle \psi_n | H | \psi_m \rangle = \langle H\psi_n | \psi_m \rangle = E_n \langle \psi_n | \psi_m \rangle$

Subtraindo: $(E_m - E_n) \langle \psi_n | \psi_m \rangle = 0$

então se $E_n \neq E_m$ temos que $\underline{\langle \psi_n | \psi_m \rangle = 0}$

segue também que estados distintos não interagem via operador hamiltoniano, ou seja

$$\langle \psi_n | H | \psi_m \rangle = 0$$

Estados degenerados:

Considere duas autofunções distintas com o mesmo autovalor: $E_n = E_m \equiv \epsilon$. Então

$H\psi_n = \epsilon \psi_n$

$H\psi_m = \epsilon \psi_m$ $\Rightarrow$ Portanto, seja $\varphi = a\psi_n + b\psi_m$ $\forall a, b$ segue que

$$H\varphi = aH\psi_n + bH\psi_m = \epsilon(a\psi_n + b\psi_m) = \epsilon\varphi$$

$$\underline{H\varphi = \epsilon\varphi}$$

Portanto se ψ_n e ψ_m são autofunções de H com o mesmo autovalor (estado degerado) qualquer combinação linear $\varphi = a\psi_n + b\psi_m$ também é autofunção com o mesmo autovalor.

Note que no teorema de ortogonalidade acima se $E_n = E_m$ não implica $\langle \psi_n | \psi_m \rangle$ mas é possível escolher as constantes a e b que garantam a ortogonalidade

Relação de comutação entre os operadores A e B:

$[A,B] = AB - BA$. Se $[A,B] = 0$ então A e B comutam.

Se dois operadores comutam eles podem ter autofunção simultânea. Vimos isso anteriormente no caso do operador de paridade. Mas agora considere, em geral:

$[H,A] = 0$, ou seja $HA = AH$

Então se $H\psi = E\psi$ segue que

$HA\psi = AH\psi = EA\psi$, ou seja $H(A\psi) = E(A\psi)$

então $A\psi$ é autofunção de H com mesmo autovalor e $A\psi$ é proporcional a ψ:

$A\psi = a\psi$ e ψ é autofunção simultânea de H e A.

PlayStation S T Q Q S S D

Considere agora coordenada e momentum: x e p_x

$$[x, p_x]\varphi = x p_x \varphi - p_x x \varphi$$

$$= x\left(-i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial x}\right) + i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(x\varphi)$$

$$= \cancel{-i\hbar x \frac{\partial \varphi}{\partial x}} + i\hbar\varphi + \cancel{i\hbar x \frac{\partial \varphi}{\partial x}} = i\hbar\varphi$$

Como φ é arbitrária:

$$[x, p_x] = i\hbar$$

Coordenada e momentum não comutam e não podem ter autofunção simultânea.

Constantes de movimento:

Vamos agora considerar a possível evolução temporal e para isso temos

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$$

Então se $\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle$ temos que

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{d}{dt}\langle \Psi | A | \Psi \rangle = \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial t} \middle| A \middle| \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \middle| A \middle| \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\rangle + \left\langle \Psi \middle| \frac{\partial A}{\partial t} \middle| \Psi \right\rangle$$

$* i\hbar$

$$= -\langle H\Psi | A\Psi \rangle + \langle \Psi | A | H\Psi \rangle + i\hbar \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle$$

Então

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

Se A não depende do tempo $\langle \frac{\partial A}{\partial t} \rangle = 0$ e

$$i\hbar \frac{d\langle A\rangle}{dt} = \langle [A, H] \rangle$$ (análogo clássico ao parênteses de Poisson)

Se um operador A comuta com o hamiltoniano $\langle A \rangle$ é constante. Consequentemente pode ser usado para caracterizar o estado.

<u>Produto de operadores (hermiteanos)</u>

Se $A = A^+$ e $B = B^+$ considere o produto AB

$$\langle \psi_n | (AB)^+ | \psi_m \rangle = \langle (AB)\psi_n | \psi_m \rangle = \langle AB\psi_n | \psi_m \rangle$$

$$= \langle B\psi_n | A^+ | \psi_m \rangle = \langle \psi_n | B^+ A^+ | \psi_m \rangle$$

Portanto

$$(AB)^+ = B^+ A^+ = BA$$

Então se A e B são hermiteanos o produto AB, em geral não é hermiteano. Só será hermiteano se A e B comutam.

Então: 1) p^2 é hermiteano

2) $x p_x$ não é hermiteano.

3) $\frac{1}{2}(x p_x + p_x x)$ é hermiteano.

Duas identidades úteis

1) $[A,BC] = ABC - BCA$

$$= ABC - BAC + BAC - BCA$$

$$\boxed{[A,BC] = [A,B]C + B[A,C]}$$

2) $[AB,C] = ABC - CAB$

$$= ABC - ACB + ACB - CAB$$

$$\boxed{[AB,C] = A[B,C] + [A,C]B}$$

Relações de Ehrenfest

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

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

$$[x,H] = \frac{1}{2m}[x,p^2] + \cancel{[x,V(x)]} = \frac{1}{2m}[x,p^2]$$

Mas usando a identidade acima:

$$[x,p^2] = [x,p]p + p[x,p] = 2i\hbar p$$

Juntando vem $i\hbar \frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{2i\hbar}{2m}\langle p\rangle$

ou

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

A segunda: Considere $i\hbar \frac{d}{dt}\langle p \rangle = \langle [p, H] \rangle$

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

$$[p, H] = \cancel{\frac{1}{2m}[p, p^2]} + [p, V(x)] = [p, V(x)]$$

$$= -i\hbar \left[\frac{\partial}{\partial x}, V(x)\right] = -i\hbar \frac{\partial V}{\partial x}$$

onde usamos

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}, V\right]\varphi = \frac{\partial}{\partial x} V\varphi - V\frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{\partial V}{\partial x}\cdot\varphi + \cancel{V\frac{\partial \varphi}{\partial x}} - \cancel{V\frac{\partial \varphi}{\partial x}}$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}, V\right] = \frac{\partial V}{\partial x}.$$

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

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

Note o seguinte corolário: o valor médio do momentum é nulo um estado estacionário ligado.

$\langle \psi_n | p | \psi_n \rangle \equiv \langle p \rangle_n = 0$

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

e $\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{1}{m}\langle p \rangle \Rightarrow$

PlayStation S T Q Q S S D

então $\langle p \rangle = \frac{m}{i\hbar} \langle [x, H] \rangle$

$$\langle p \rangle_n = \frac{m}{i\hbar}\left[\langle \psi_n | [x, H] | \psi_n \rangle\right] = \frac{m}{i\hbar} \langle \psi_n | xH - Hx | \psi_n \rangle$$

$$= \frac{m}{i\hbar}\left[\langle \psi_n | x H \psi_n \rangle - \langle \psi_n | Hx | \psi_n \rangle\right]$$

como $H = H^+$ e $H\psi_n = E_n \psi_n$, vem

$$\langle p \rangle_n = \frac{m}{i\hbar}\left[E_n \langle \psi_n | x | \psi_n \rangle - E_n \langle \psi_n | x | \psi_n \rangle\right] = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle p \rangle_n = 0}$$

Teorema do Virial

Por simplicidade vamos considerar de novo o hamiltoniano unidimensional:

$H = \frac{p_x^2}{2m} + V(x)$. Considere agora o operador não hermiteano xp

Então $i\hbar \frac{d}{dt} \langle xp \rangle_n = 0$ pois $\langle xp \rangle_n$ não depende do tempo.

Por outro lado $i\hbar \frac{d}{dt} \langle xp \rangle_n = \langle \psi_n | [xp, H] | \psi_n \rangle$

Então $\langle \psi_n | [xp, H] | \psi_n \rangle = 0$

Vamos desenvolver o comutador

$$[xp, H] = x[p, H] + [x, H]\,p$$

Mas $[x, H] = \frac{1}{2m}[x, p^2] = \frac{i\hbar}{m}\,p$

e

$$[p, H] = [p, V(x)] = -i\hbar\,\frac{\partial V}{\partial x}$$

Juntando vem:

$$\langle \psi_n | [xp, H] | \psi_n \rangle = -i\hbar \langle \psi_n | x \frac{\partial V}{\partial x} | \psi_n \rangle + \frac{i\hbar}{m} \langle \psi_n | p^2 | \psi_n \rangle$$

$$\underbrace{\frac{1}{m}\langle p^2 \rangle_n}_{} = \left\langle x \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle_n \Rightarrow \boxed{2\langle T \rangle_n = \left\langle x \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle_n}$$

$T = \frac{p^2}{2m}$ que é o teorema do virial, relacionando o valor médio da energia cinética com o valor médio da energia potencial

Exemplo 1: osc. harm. 1-dimensional $V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$

$$x \frac{\partial V}{\partial x} = x \cdot m\omega^2 x = m\omega^2 x^2 = 2V(x)$$

Então $\boxed{\langle T \rangle_n = \langle V \rangle_n}$

Exemplo 2: Átomo de hidrogénio $V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$

$$\vec{\nabla} V = \frac{Ze^2}{r^2} \quad \text{e} \quad \vec{r} \cdot \vec{\nabla} V = \frac{Ze^2}{r} = -V(r)$$

Então

$$\boxed{2\langle T \rangle_n = -\langle V \rangle_n}$$

Sistemas bidimensionais

Até o momento nos preocupamos em resolver a eq. de Schrödinger para sistemas unidimensionais. Vamos agora prosseguir e considerar sistemas em duas dimensões. É interessante perceber as novas considerações. Uma delas, particularmente interessante, é o surgimento de <u>degenerescências</u>.

Considere uma situação onde o hamiltoniano pode ser decomposto em duas partes unidimensionais cuja solução já conhecemos.

Se $H(1,2) = H(1) + H(2)$ onde

$H(i)\,\psi(i) = E_i\,\psi(i)$ é conhecida, então a

solução de $H(1,2)\,\psi(1,2) = E\,\psi(1,2)$ é trivial.

A solução para $\psi(1,2) = \psi(1).\psi(2)$ e podemos verificar isso

$$H(1,2)\,\psi(1,2) = \left[H(1) + H(2)\right]\psi(1).\psi(2) = \left[H(1)\,\psi(1)\right)\psi(2)$$
$$+\,\psi(1)\,H(2)\,\psi(2)\Big]$$

usando a solução conhecida da eq. Schrödinger para uma partícula temos

$$H(1,2)\,\psi(1,2) = E_1\,\psi(1)\,\psi(2) + E_2\,\psi(1)\,\psi(2)$$

$$= (E_1 + E_2)\,\psi(1)\,\psi(2)$$

$$= E.\,\psi(1,2) \quad , \quad \boxed{E = E_1 + E_2}$$

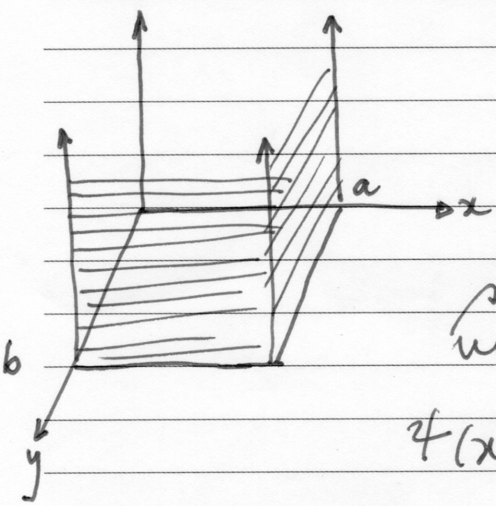
Portanto nesse caso $H(1,2) = H(1) + H(2)$,

$\psi(1,2) = \psi(1).\psi(2)$ e $E = E_1 + E_2$.

Vamos exemplificar isso no caso mais simples; o poço infinito em duas dimensões

Seja então

$$V(x,y) = \begin{cases} 0, & \text{se } x \geq 0 \text{ ou } x < a \\ \infty, & \text{se } x \leq 0 \text{ ou } x > a \\ 0, & \text{se } y \geq 0 \text{ ou } y < b \\ \infty, & \text{se } y \leq 0 \text{ ou } y \geq b \end{cases}$$



Claramente temos a situação descrita anteriormente e, portanto, lembrando que

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\, sen\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \quad E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

a solução do problema bidimensional é

$$\psi(x,y) = \sqrt{\frac{2}{ab}}\, sen\left(\frac{n_x\pi x}{a}\right) sen\left(\frac{n_y\pi x}{b}\right)$$

e

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2}\right)$$

A possível existência de estados degenerados depende da relação entre a e b! Por exemplo, se b = 4a temos que os estados caracterizados por n_x e n_y

são: $n_x = 1$ e $n_y = 1$, estado fundamental

Se $n_x = 1$ e $n_y = \cancel{4}\,2$, a energia é $\frac{2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ e é

única. Mas, por exemplo, se

$n_x = 2$, $n_y = 2$ a energia é $\frac{5\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ que é

a mesma se

$n_x = 1$, $n_y = 4$. Portanto, $(n_x = 2, n_y = 2)$ é

degenerado com $(n_x = 1, n_y = 4)$. A degenerescência pode existir mas depende da relação específica entre a e b.

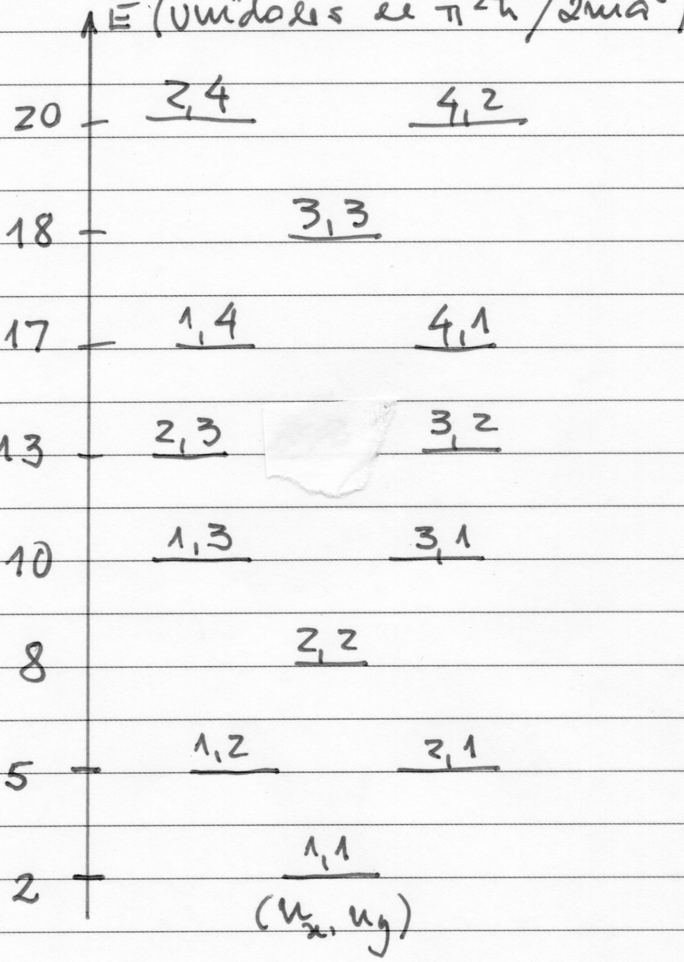
Considere agora o caso simétrico onde $\underline{a = b}$
Nesse caso,

$$E = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, \text{ onde } n^2 = n_x^2 + n_y^2$$ e a

degenerescência é mais clara: são degenerados os estados com troca de n_x e n_y, por exemplo $n_x = 1$, $n_y = 2$ é degenerado com $n_x = 2$ e $n_y = 1$.

Isso reflete a simetria existente no hamiltoniano que é invariante pela troca de x em y e vice-versa.

A degenerescência é ilustrada a seguir



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

$$n^2 = n_x^2 + n_y^2$$

(Desenho não está em escala, ilustrativo apenas)

Note que degenerescências de mais altas ordens aparecem para estados mais altos energeticamente. Por exemplo, note a degenerescência quádrupla:

(1,8), (8,1), (4,7) e (7,4) todos com a mesma energia $\dfrac{65\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$.

Note que o estado fundamental não é degenerado.

O oscilador harmônico bidimensional

Considere agora o caso mais interessante

$$H(x,y) = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_x^2 x^2 + \frac{1}{2} m\omega_y^2 y^2$$

que satisfaz a mesma condição $H(x,y) = H(x) + H(y)$
Nesse momento estamos considerando o caso anisotrópico $\omega_x \neq \omega_y$.

A solução da energia é

$$E = \cancel{\tfrac{1}{2}} \left(n_x + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_x + \left(n_y + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_y$$

e a possível existência de degenerescência depende da relação entre ω_x e ω_y. Considere então o caso mais simétrico do oscilador isotrópico

$$\omega_x = \omega_y \equiv \omega. \quad \text{Nesse caso temos}$$

$$E = (n+1)\hbar\omega \,, \quad \text{onde } n = n_x + n_y .$$

São degenerados os estados (

$n=0$, $n_x=0$, $n_y=0$ $\Rightarrow$ $g=1$ (não degenerado)

$$n=1, \left.\begin{array}{l} n_x=1,\ n_y=0 \\ n_x=0,\ n_y=0 \end{array}\right\} \Rightarrow g=2$$

$$n=2, \left.\begin{array}{l} n_x=0,\ n_y=2 \\ n_x=1,\ n_y=1 \\ n_x=2,\ n_y=0 \end{array}\right\} g=3$$

Temos degenerescência de grau $g = n+1$.

Note mais uma vez que o estado fundamental é não degenerado.

$$\psi_{n_x, n_y}(x,y) = N_{n_x} \cdot N_{n_y} \cdot H_{n_x}(\xi_x) \, H_{n_y}(\xi_y) \, e^{-\frac{1}{2}(\xi_x^2 + \xi_y^2)}$$

Onde, recordando, H_n são os polinômios de Hermite e $\xi_x^2 = \frac{m\omega}{\hbar} \cdot x^2$; $\xi_y^2 = \frac{m\omega}{\hbar} y^2$

Mais uma vez note ~~a ca~~ degenerescência como resultado da simetria. Vamos explicar isso melhor posteriormente.

A função de onda do estado fundamental é ($n_x = n_y = 0$) onde N é a correspondente constante de normalização.

$$\psi_{00} = N e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2+y^2)}.$$

Já o estado excitado é duplamente degenerado.

$$\psi_{10}(x,y) = N x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2+y^2)}$$

e

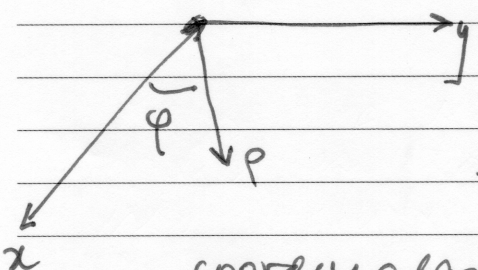
$$\psi_{01}(x,y) = N y e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2+y^2)}$$

Um aspecto interessante (e importante!) do oscilador harmônico bidimensional isotrópico

$$H(x,y) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2)$$

é que ele pode ser escrito em coordenadas polares.

Em coordenadas polares (ρ, φ)



$$x = \rho\cos\varphi$$
$$y = \rho\,\text{sen}\,\varphi$$

então $x^2 + y^2 = \rho^2$ e em coordenadas polares temos

$$H(x,y) \longrightarrow H(\rho,\varphi) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\rho^2$$

onde ∇^2 é o laplaciano em coordenadas polares

$$\nabla^2 = \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right) + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

É possível resolver a eq. Schrödinger em coordenadas polares e assim obteremos $\psi(\rho,\varphi)$ em vez de $\psi(x,y)$. Vamos então nos preocupar agora em obter como se relacionam $\psi(x,y)$ e $\psi(\rho,\varphi)$.

Considere o estado fundamental (que não é degenerado e só existe uma função)

$\psi_{00}(x,y) \rightarrow \psi_{00}(\rho,\varphi) = N e^{-\alpha\rho^2}$ e não depende de φ.

$\alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}$, $\rho^2 = x^2+y^2$ e a constante de normalização não é relevante agora.

Vamos mostrar que $\psi(\rho,\varphi)$ é autofunção de $H(\rho,\varphi)$ com mesmo autovalor $\hbar\omega$.

$$H(\rho,\varphi) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\rho^2$$

Aplicando $\nabla^2 = \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right) + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$

~~$\psi(\rho,\varphi)$~~ nulo pois esse $\psi(\rho,\varphi)$ ñ depende de φ.

Então aplicando em $\psi_{00} = e^{-\alpha\rho^2}$

$$\frac{\partial\psi_{00}}{\partial\rho} = -2\alpha\rho e^{-\alpha\rho^2}$$

$$\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial\psi_{00}}{\partial\rho}\right) = \left[-4\alpha\rho + 4\alpha^2\rho^3\right]e^{-\alpha\rho^2}$$

e

$$\nabla^2\psi_{00} = (4\alpha^2\rho^2 - 4\alpha)e^{-\alpha\rho^2}$$

Substituindo na eq. Schrödinger

$$H\psi_{00} = \underbrace{\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\left[4\alpha^2\rho^2 - 4\alpha\right] + \frac{1}{2}m\omega^2\rho^2 \right\}}\ \underbrace{e^{-\alpha\rho^2}}_{\psi_{00}}$$

substituindo $\alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}$ vem

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot 4\frac{m^2\omega^2}{4\hbar^2}\rho^2 + \frac{\hbar^2}{2m}\cdot 4\cdot\frac{m\omega}{2\hbar} + \frac{1}{2}m\omega^2\rho^2$$

$$\cancel{-\frac{1}{2}m\omega^2\rho^2} + \hbar\omega + \cancel{\frac{1}{2}m\omega^2\rho^2}$$

$$= \{\hbar\omega\}\psi_{00}$$

Portanto, realmente $\psi_{00} = N e^{-\alpha\rho^2}$ é auto função de $H(\rho,\varphi)$ com autovalor $\hbar\omega$ (estado fundamental)

Vamos agora considerar o <u>1º estado excitado</u>. Temos duas funções

$$\psi_{10}(x,y) = x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2+y^2)} \longrightarrow \psi(\rho,\varphi) = \rho\cos\varphi\, e^{-\alpha\rho^2}$$

$$\psi_{01}(x,y) = y e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2+y^2)} \longrightarrow \psi(\rho,\varphi) = \rho\,\text{sen}\varphi\, e^{-\alpha\rho^2}$$

Considere, ao invés de $\psi_{10}(x,y)$ e $\psi_{01}(x,y)$ separadamente, a combinação do tipo

$$x \pm iy = \rho\cos\varphi \pm i\rho\,\text{sen}\varphi$$

$$= \rho(\cos\varphi \pm i\,\text{sen}\varphi) = \rho e^{\pm i\varphi}$$

Ou seja considere

$$\psi(\rho,\varphi) = \rho\, e^{-\alpha\rho^2} e^{\pm i\varphi}$$ e verifique que

ela(s) tanto + com - satisfazem a condição de ser autofunções de $H(\rho,\varphi)$ com autovalor $2\hbar\omega$ (1º estado excitado).

Substituindo vem que

$$\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\psi(\rho,\varphi) = (-1)\frac{1}{\rho^2}\left[\rho\, e^{-\alpha\rho^2} e^{\pm i\varphi}\right]$$

Tomando as derivadas em ρ do laplaciano

$$\frac{\partial\psi}{\partial\rho} = (1-2\alpha\rho^2)\, e^{-\alpha\rho^2} e^{\pm i\varphi}$$

$$\frac{\partial}{\partial\rho}\left[\rho\frac{\partial\psi}{\partial\rho}\right] = (1-8\alpha\rho^2+4\alpha^2\rho^4)\, e^{-\alpha\rho^2} e^{\pm i\varphi}$$

$$\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left[\rho\frac{\partial\psi}{\partial\rho}\right] = \left[\frac{1}{\rho^2} - 8\alpha + 4\alpha^2\rho^2\right]\underbrace{\rho\, e^{-\alpha\rho^2} e^{\pm i\varphi}}_{\psi(\rho,\varphi)}$$

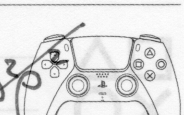
substituindo para obter $H(\rho,\varphi)$ vem

$$\cancel{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\rho^2}} + \frac{\hbar^2}{2m}8\alpha - \frac{\hbar^2}{2m}4\alpha^2\rho^2 + \cancel{\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\rho^2}} + \frac{1}{2}m\omega^2\rho^2$$

$$H(\rho,\varphi)\psi(\rho,\varphi) = \Big[\underbrace{\frac{\hbar^2}{2m}8\alpha - \frac{\hbar^2}{2m}4\alpha^2\rho^2} + \frac{1}{2}m\omega^2\rho^2\Big]\psi(\rho,\varphi)$$

substituindo α

nos dá $\underbrace{2\hbar\omega \cancel{- \frac{1}{2}m\omega^2\rho^2} + \cancel{\frac{1}{2}m\omega^2\rho^2}}_{2\hbar\omega}$



e finalmente

$$H(\rho,\varphi)\,\psi(\rho,\varphi) = 2\hbar\omega\,\psi(\rho,\varphi)$$

portanto

$$\psi(\rho,\varphi) = \rho\, e^{-\alpha\rho^2}\, e^{\pm i\varphi}$$

é autofunção de $H(\rho,\varphi)$ com autovalor $2\hbar\omega$ (1º estado excitado).

Temos então

coordenadas cartesianas		coordenadas polares
$\{\psi(x,y)\}$	$\xrightarrow{\text{combinação}}$ $\xleftarrow{\text{linear}}$	$\{\psi(\rho,\varphi)\}$

Solução em Coordenadas polares

É possível se obter a solução da equação de Schrödinger diretamente em coordenadas polares assumindo que

$$\psi(\rho,\varphi) = R(\rho)\,\Phi(\varphi)$$

substituindo em $H(\rho,\varphi)\psi(\rho,\varphi)$ se obtem uma equação para $\Phi(\varphi)$ cuja solução é do tipo

$$\Phi(\varphi) = e^{\pm i m\varphi}$$

e uma equação para $R(\rho)$ que é mais difícil de resolver e se relaciona com polinômio generalizado de Laguerre do tipo

$$L_{n_\rho}^{|m|+1}\left(\frac{m\omega\rho^2}{\hbar}\right)$$ que não vamos considerar aqui.

A energia é ~~do tipo~~

$$E = (2n_\rho + |m| + 1)\hbar\omega \,,\quad n_\rho = 0, 1, 2, \ldots$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2$$

Nesse momento é importante enfatizar que a função
$$\Phi(\varphi) = e^{\pm i m \varphi}$$ está

associado com a componente z do momento angular L_z:

$$L_z \Phi(\varphi) = \hbar m \Phi(\varphi) \,;$$

Ou seja $\Phi(\varphi)$ é autofunção de L_z que comuta com $H(\rho, \varphi)$. Mais adiante nesse curso veremos momento angular em mecânica quântica.

Por ora, é interessante mencionar que a solução do oscilador harmônico bidimensional isotrópico nos dá autofunções do hamiltoniano que também são autofunções da componente z do momento angular e $\underline{m}$ é o número quântico associado.

Degenerescência e operadores comutantes

Já vimos que se $[H, A] = 0$ então H e A podem ter autofunções simultâneas. Ou seja, se ψ_n é autofunção de H

$$H\psi_n = E_n \psi_n \, , \text{ então } A\psi_n = a_n \psi_n . \qquad (A = A^\dagger)$$

Considere agora dois operadores A e B.

$[H, A] = 0 \Rightarrow$ tem um conjunto $\{\psi_n\}$ que é autofunção simultânea de H e A

e

$[H, B] = 0 \Rightarrow$ tem um conjunto $\{\psi'_n\}$ que é autofunção simultânea de H e B.

Agora, se $[A, B] = 0$ então

$\{\psi_n\}$ e $\{\psi'_n\}$ podem ser iguais e

são autofunções simultâneas de H, A e B.

Mas se $[A, B] \neq 0$ então $\{\psi_n\}$ e $\{\psi'_n\}$

são diferentes. Temos então degenerescência

e os conjuntos $\{\psi_n\}$ e $\{\psi'_n\}$ se

relacionam sendo obtidos por uma transformação (combinação linear).

No caso anterior:

$[H, A] = 0 \Rightarrow$ coords cartesianas

$[H, B] = 0 \Rightarrow$ coords polares

Relação de Dirac (closure relation)

Antes de concluir vamos agora considerar uma relação muito útil.

Seja $\{\varphi_n\}$ um conjunto completo (por ex. as autofunções de um operador hermiteano, por exemplo H) e ortonormal.

Então uma função qualquer do espaço pode ser expandida como

$$\psi = \sum_n c_n \varphi_n \quad ,$$ em notação de Dirac:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle$$

Para obter os coeficientes multiplicamos por $\langle\varphi_m|$

$$\langle\varphi_m|\psi\rangle = \sum_n c_n \underbrace{\langle\varphi_m|\varphi_n\rangle}_{\delta_{mn}} = c_m$$

então $c_m = \langle\varphi_m|\psi\rangle$ substituindo acima

$$|\psi\rangle = \sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\psi\rangle = \underbrace{\left(\sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\right)}_{\text{só para visualizar melhor.}}|\psi\rangle$$

Daí concluimos que

$$\boxed{\hat{1} = \sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|}$$ que é a relação de Dirac.

A desigualdade de Schwarz

Considere a norma $|\langle\psi_1|\psi_1\rangle|^{1/2} \equiv \|\psi_1\|$ (≥ 0)

a desigualdade de Schwarz nos diz que

$$\|\psi_1\|.\|\psi_2\| \geq |\langle\psi_1|\psi_2\rangle|$$

$\langle v|v\rangle^2 \leq \langle u|u\rangle.\langle v|v\rangle$

$\langle u|v\rangle \leq \langle u|u\rangle^{1/2}.\langle v|v\rangle^{1/2}$

A relação de incerteza

Seja $A = A^+$ e $B = B^+$ e considerando

$$\langle A\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle \equiv \bar{A}$$

$$\langle B\rangle = \langle\psi|B|\psi\rangle \equiv \bar{B}$$

A incerteza é $\Delta A^2 = \cancel{\langle A - \bar{A}\rangle} = \|(A-\bar{A})\psi\|^2$

De fato:

$$\Delta A^2 = \|(A-\bar{A})\psi\|^2 = \langle(A-\bar{A})\psi|(A-\bar{A})\psi\rangle$$

$$= \langle A\psi|A\psi\rangle - \bar{A}\langle\psi|A\psi\rangle - \langle A\psi|\psi\rangle\bar{A} + \bar{A}^2\langle\psi|\psi\rangle$$

$$= \langle\psi|A^2|\psi\rangle - \bar{A}.\bar{A} - \bar{A}.\bar{A} + \bar{A}^2 = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle.\langle A\rangle - \langle A\rangle\langle A\rangle + \langle A\rangle.\langle A\rangle$$

$$\boxed{\Delta A^2 = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2}$$

Considere agora a desigualdade de Schwarz:

$$\Delta A . \Delta B = \|(A-\bar{A})\psi\| . \|(B-\bar{B})\psi\| \geq |\langle (A-\bar{A})\psi | (B-\bar{B})\psi\rangle|$$

como o módulo é maior que só a parte imaginária

$$\Delta A . \Delta B \geq |\mathrm{Im}\langle A-\bar{A})\psi | (B-\bar{B}\psi)\rangle|$$

$$= \frac{1}{2}\left|\{\langle (A-\bar{A})\psi | (B-\bar{B})\psi\rangle - \langle (B-\bar{B})\psi | (A-\bar{A})\psi\rangle\}\right|$$

lembrando que $A = A^{+}$ e $B = B^{+}$

$$\Delta A . \Delta B \geq \frac{1}{2}\Big| \langle\psi|AB|\psi\rangle - \bar{A}\langle\cancel{\psi|}B|\psi\rangle - \bar{B}\cancel{\langle\psi|}A|\psi\rangle + \bar{A}\bar{B}\cancel{\langle\psi|\psi\rangle}$$

$$- \langle\psi|BA|\psi\rangle + \bar{B}\langle\cancel{\psi|A}|\psi\rangle + \bar{A}\langle\cancel{\psi|}B|\psi\rangle - \bar{B}\bar{A}\cancel{\langle\psi|\psi\rangle}\Big|$$

$$\Delta A . \Delta B \geq \frac{1}{2}\left|\langle\psi|AB\psi\rangle - \langle\psi|BA|\psi\rangle\right|$$

$$\boxed{\Delta A . \Delta B \geq \frac{1}{2}\left|\langle [A, B] \rangle\right|}$$

Exemplo: $[x, p_x] = i\hbar \Rightarrow \boxed{\Delta x . \Delta p_x \geq \frac{1}{2}\hbar}$