



4300315

Introdução à Física Atômica e Molecular

Mecânica Quântica – Revisão

Prof. Marcio Varella

mvarella@if.usp.br

<http://fig.if.usp.br/~mvarella/>

Edifício Principal, Ala I, Sala 330



Cadastrem-se no Moodle Stoa USP

- Repositório de informações da disciplina
- É imprescindível se cadastrear no Stoa e visitar frequentemente a página da disciplina:

<http://disciplinas.stoa.usp.br>

- Informações gerais
- Leitura
- Notas
- Listas
- ...



Avaliação

- Três Provas (P1, P2 e P3), valendo 10,0 pontos cada.
- Média final (MF) :

$$MF = (P1 + P2 + P3)/3$$

Calendário

Prova1: 05/04

Prova2: 15/05

Prova3: 21/06

SUB (se necessário): 03/07

Recuperação: 19/07

Notação de Dirac: Revisão

1. Vetores de Estado (*ket*): O estado de um sistema físico se denota pelo *ket*, $|\ \rangle$. Em geral, explicitamos dependência temporal, números quânticos, etc.

$$|\Psi(t)\rangle , |\psi_\alpha\rangle , \text{ etc.}$$

2. Conjugado Hermiteano (*bra*): O conjugado hermiteano de um estado qualquer é indicado pelo bra, $\langle \ |$.

$$\langle\Psi(t)| \equiv |\Psi(t)\rangle^\dagger , \langle\psi_\alpha| \equiv |\psi_\alpha\rangle^\dagger , \text{ etc.}$$

3. Produto Escalar: $\langle\psi_\alpha|\psi_\beta\rangle \equiv \int d\mathbf{r} \psi_\alpha^*(\mathbf{r}) \psi_\beta(\mathbf{r})$

$$\langle\psi_\beta|\psi_\alpha\rangle \equiv \int d\mathbf{r} \psi_\beta^*(\mathbf{r}) \psi_\alpha(\mathbf{r}) = \left[\int d\mathbf{r} \psi_\alpha^*(\mathbf{r}) \psi_\beta(\mathbf{r}) \right]^* \equiv \langle\psi_\alpha|\psi_\beta\rangle^*$$

4. Elementos de Matriz:

$$\langle \psi_\alpha | \hat{O} | \psi_\beta \rangle \equiv \int d\mathbf{r} \psi_\alpha^*(\mathbf{r}) \hat{O}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \psi_\beta(\mathbf{r})$$

$$\mathbf{p} = -i\hbar \nabla_{\mathbf{r}}$$

5. Relação de Completeza e Operador Identidade: os auto-estados de um observável constituem bases completas para representação de estados e observáveis físicos, pois definem representações para o operador identidade:

$$\hat{O}|\psi_\alpha\rangle = o_\alpha|\psi_\alpha\rangle$$

$$\langle \psi_\alpha | \psi_\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta} \qquad \hat{1} = \sum_{\alpha} |\psi_\alpha\rangle \langle \psi_\alpha|$$

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{1} |\Psi(t)\rangle = \sum_{\alpha} |\psi_\alpha\rangle \langle \psi_\alpha | \Psi(t) \rangle \equiv \sum_{\alpha} c_\alpha(t) |\psi_\alpha\rangle$$

6. Representação de observáveis:

$$\hat{A} = \hat{1} \hat{A} \hat{1} = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} |\psi_{\alpha}\rangle \langle \psi_{\alpha}| \hat{A} |\psi_{\beta}\rangle \langle \psi_{\beta}| \equiv |\psi_{\alpha}\rangle a_{\alpha\beta} \langle \psi_{\beta}|$$

7. Operador de posição e auto-estados de posição: O operador de posição (também o de momento linear) apresenta espectro contínuo de autovalores:

$$\hat{x} |x'\rangle = x' |x'\rangle$$

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$$

$$\langle x|\hat{x}|x'\rangle = x' \delta(x - x')$$

$$\hat{1} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \langle x|$$

8. Operadores de energia potencial e momento linear na representação de posição:

$$\langle x | \hat{V}(\hat{x}) | x' \rangle = \delta(x - x') V(x')$$

$$\langle x | \hat{p} | x' \rangle = \delta(x - x') \left[-i\hbar \frac{d}{dx'} \right]$$

$$\langle x | \hat{p}^2 | x' \rangle = \delta(x - x') \left[-\hbar^2 \frac{d^2}{dx'^2} \right]$$

9. Função de onda: O produto escalar de um estado (*ket*) por um autoestado de posição, $\langle x | \psi \rangle$, é a projeção de $|\psi\rangle$ sobre o ponto x no espaço de posição. Definimos assim a *amplitude de probabilidade* de $|\psi\rangle$ na posição x , correspondendo assim a uma *função de onda*:

$$\langle x | \psi_\alpha \rangle \equiv \psi_\alpha(x)$$

$$\langle x | \Psi(t) \rangle \equiv \Psi(x, t)$$

Exercício: Utilizando a representação do operador identidade na base dos auto-estados de posição, $|x\rangle$, mostre que

$$\langle \psi_\alpha | \psi_\beta \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_\alpha^*(x) \psi_\beta(x)$$

Explorando

$$\hat{1} = \int dx |x\rangle\langle x|$$

teremos:

$$\begin{aligned}\langle\psi_\alpha|\psi_\beta\rangle &= \langle\psi_\alpha|\hat{1}|\psi_\beta\rangle = \int dx \langle\psi_\alpha|x\rangle\langle x|\psi_\beta\rangle = \\ &= \int dx \psi_\alpha^*(x) \psi_\beta(x)\end{aligned}$$

OBS: os limites de integração estão subentendidos na definição do operador identidade, isto é, por economia de notação:

$$\hat{1} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle\langle x| \equiv \int dx |x\rangle\langle x|$$

Exercício: No espaço dos vetores de estado (*kets*) a Equação de Schrödinger é postulada na forma:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle &= [\hat{T} + \hat{V}] |\Psi(t)\rangle \\ &= \hat{H} |\Psi(t)\rangle \end{aligned}$$

Mostre que a forma “usual” da Equação de Schrödinger (funções de onda) pode ser obtida da expressão acima por projeção sobre o espaço de posição. Dica: utilize as expressões dos slides anteriores.

Projetando sobre o autoestado $|x\rangle$ (independente do tempo):

$$\begin{aligned} \langle x | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \Psi(t) \rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x | \Psi(t) \rangle = i\hbar \Psi(x, t) = \\ &= \langle x | [\hat{T} + \hat{V}] | \Psi(t) \rangle = \int dx' \left[\langle x | \hat{T} | x' \rangle \langle x' | \Psi(t) \rangle + \langle x | \hat{V} | x' \rangle \langle x' | \Psi(t) \rangle \right] = \\ &= \int dx' \delta(x - x') \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx'^2} \right) \Psi(x', t) + V(x') \Psi(x', t) \right] = \\ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x, t) + V(x) \Psi(x, t) \right] \end{aligned}$$

Portanto:

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

Momento Angular: Revisão

Construção do Operador de Momento Angular (representação de posição):

$$\mathbf{L} = (yp_z - zp_y)\hat{\mathbf{i}} + (zp_x - xp_z)\hat{\mathbf{j}} + (xp_y - yp_x)\hat{\mathbf{k}}$$

$$\mathbf{L} = -i\hbar \left[\left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \hat{\mathbf{i}} + \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \hat{\mathbf{j}} + \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \hat{\mathbf{k}} \right]$$

$$L^2 = \mathbf{L} \cdot \mathbf{L} = -\hbar^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\text{tg}\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\text{sen}^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]$$

Utilizando as relações fundamentais de comutação, $[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$, é imediato verificar que as componentes do operador momento angular satisfazem:

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z \quad [L_y, L_z] = i\hbar L_x \quad [L_z, L_x] = i\hbar L_y$$

$$[L^2, L_x] = [L^2, L_y] = [L^2, L_z] = 0$$

Momento Angular: Revisão

As relações de comutação do slide anterior indicam ser possível buscar auto-estados *simultâneos* do operador \mathbf{L}^2 e de uma das componentes cartesianas do momento angular. Essa componente define o *eixo de quantização* do momento angular, sendo prática comum convencioná-lo como o eixo Oz . Demonstra-se que:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle$$

$$\hat{L}_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle$$

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$m = -l, -(l-1), \dots, -1, 0, 1, \dots, (l-1), l$$

Os auto-estados de momento angular satisfazem a relação usual de ortogonalidade:

$$\langle l', m' | l, m \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

Funções de Onda: Harmônicos Esféricos

A projeção dos kets $|l, m\rangle$ sobre as posições angulares (θ, ϕ) resulta em funções de onda bem conhecidas, denominadas Harmônicos Esféricos:

$$\langle \hat{\mathbf{r}} | l, m \rangle = Y_{lm}(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_{lm}(\cos\theta) e^{im\phi} \quad m \geq 0$$

$$Y_{l-m}(\theta, \phi) = (-1)^m Y_{lm}^*(\theta, \phi) \quad m \geq 0$$

onde P_{lm} são Polinômios Associados de Legendre. Explicitamente:

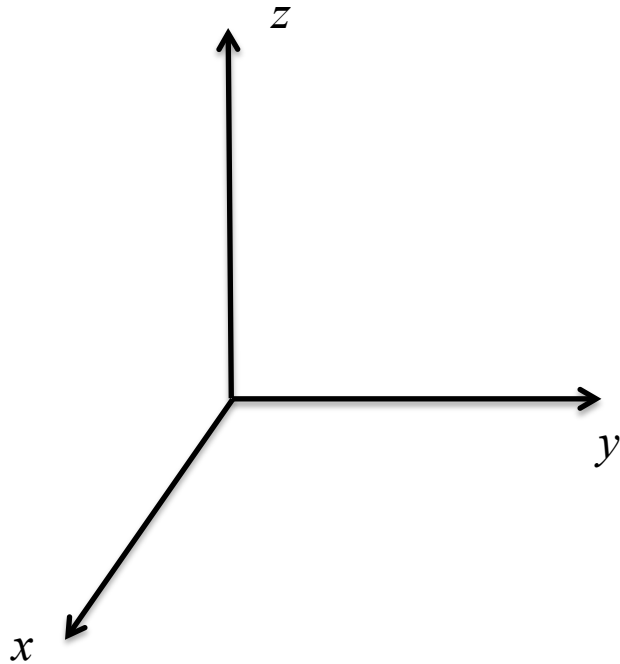
$$Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

$$Y_{1\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin\theta e^{\pm im\phi} \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$$

$$Y_{2\pm 2} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2\theta e^{\pm 2im\phi} \quad Y_{2\pm 1} = \mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin\theta \cos\theta e^{\pm im\phi} \quad Y_{20} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (3 \cos^2\theta - 1)$$

Funções de Onda: Harmônicos Esféricos

Exemplos de densidades de probabilidade associadas aos harmônicos esféricos:



$$|Y_0^0(\theta, \phi)|^2$$



$$|Y_1^0(\theta, \phi)|^2$$



$$|Y_1^1(\theta, \phi)|^2$$



$$|Y_2^0(\theta, \phi)|^2$$



$$|Y_2^1(\theta, \phi)|^2$$



$$|Y_2^2(\theta, \phi)|^2$$



$$|Y_3^0(\theta, \phi)|^2$$



$$|Y_3^1(\theta, \phi)|^2$$



$$|Y_3^2(\theta, \phi)|^2$$



$$|Y_3^3(\theta, \phi)|^2$$

