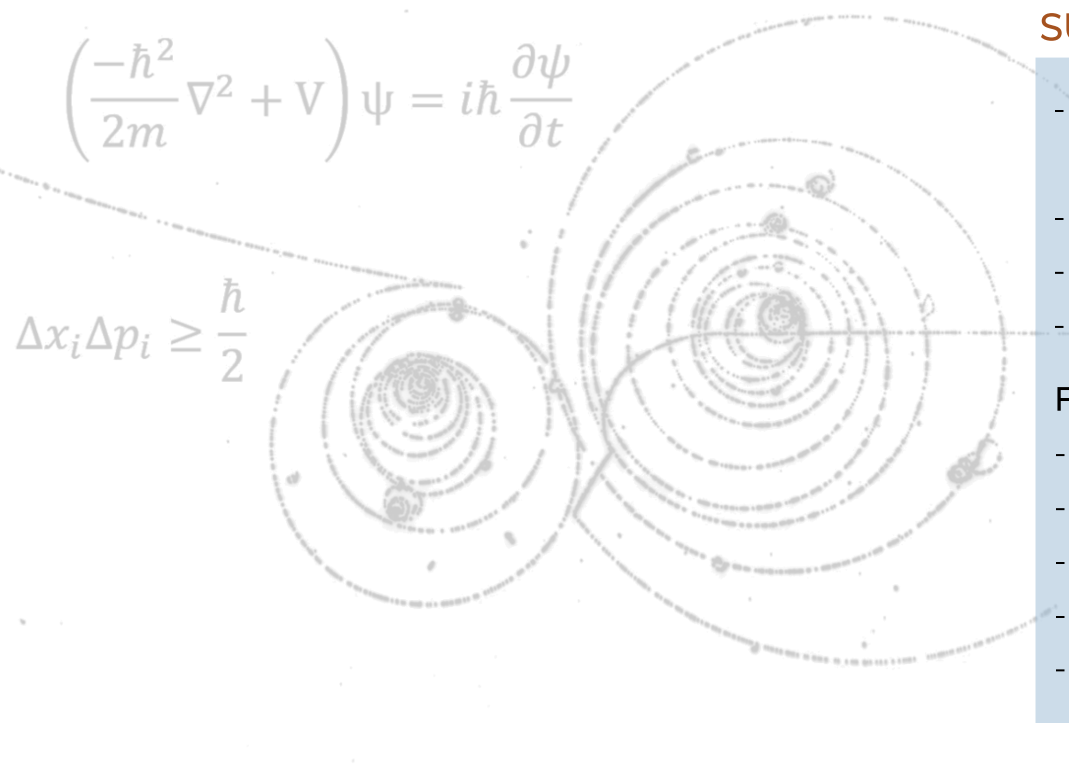
MECÂNICA QUÂNTICA I

LEFT – 3º ANO, 1º Sem (P1). (2021/2022)



SUMÁRIO:

- **PROBLEMAS A UMA DIMENSÃO (Continuação)** (Griff. 2.2-2.6, Gas. 3-3, 3-5, 4)
- Barreiras de potencial (tunelamento)
- Potenciais delta
- Oscilador Harmónico

Formalismo da MQ (Griff. 3, Gas. 6-7)
- Espaços de Hilbert
- Notação de Dirac
- Operadores lineares e suas propriedades
- Evolução temporal dos estados em MQ
- Teoremas/resultados importantes

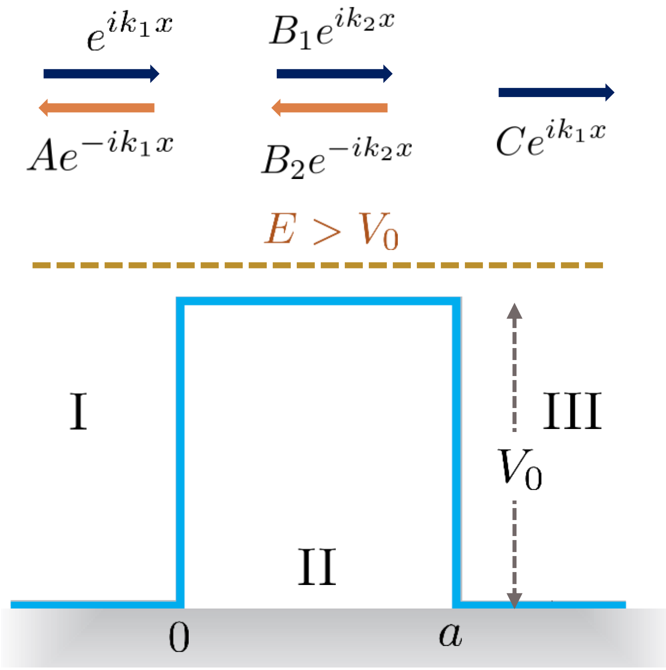
DF
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
TÉCNICO LISBOA

Filipe Rafael Joaquim

Centro de Física Teórica de Partículas (CFTP) – DF -IST

filipe.joaquim@tecnico.ulisboa.pt , Ext: 3704 , Gab. 4-8.3

BARREIRA DE POTENCIAL ($E > V_0$)



Usando o que aprendemos no caso do poço de potencial finito para $E > V_0$:

$$u_{\mathrm{I}}(x) = e^{ik_1x} + Ae^{-ik_1x}$$

$$u_{\mathrm{II}}(x) = B_1e^{ik_2x} + B_2e^{-ik_2x}$$

$$u_{\mathrm{III}}(x) = Ce^{ik_1x}$$

Temos agora: $k_1^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2} > 0\ ,\ k_2^2 = \dfrac{2m(E-V_0)}{\hbar^2} > 0$

Usamos as relações de continuidade para determinar as relações entre as constantes:

$$u_{\mathrm{I}}(0) = u_{\mathrm{II}}(0)\ ,\ \left.\frac{\partial u_{\mathrm{I}}(x)}{\partial x}\right|_{x=0} = \left.\frac{\partial u_{\mathrm{II}}^{+}(x)}{\partial x}\right|_{x=0}\ ,\ u_{\mathrm{II}}(a) = u_{\mathrm{III}}(a)\ ,\ \left.\frac{\partial u_{\mathrm{II}}(x)}{\partial x}\right|_{x=a} = \left.\frac{\partial u_{\mathrm{III}}^{+}(x)}{\partial x}\right|_{x=a}$$

- **Fluxos (ver caso do poço finito):** $|\vec{j}_{\mathrm{inc}}| = \dfrac{\hbar k_1}{m}\ ,\ |\vec{j}_{\mathrm{refl}}| = |A|^2\dfrac{\hbar k_1}{m}\ ,\ |\vec{j}_{\mathrm{trans}}| = |C|^2\dfrac{\hbar k_1}{m}$

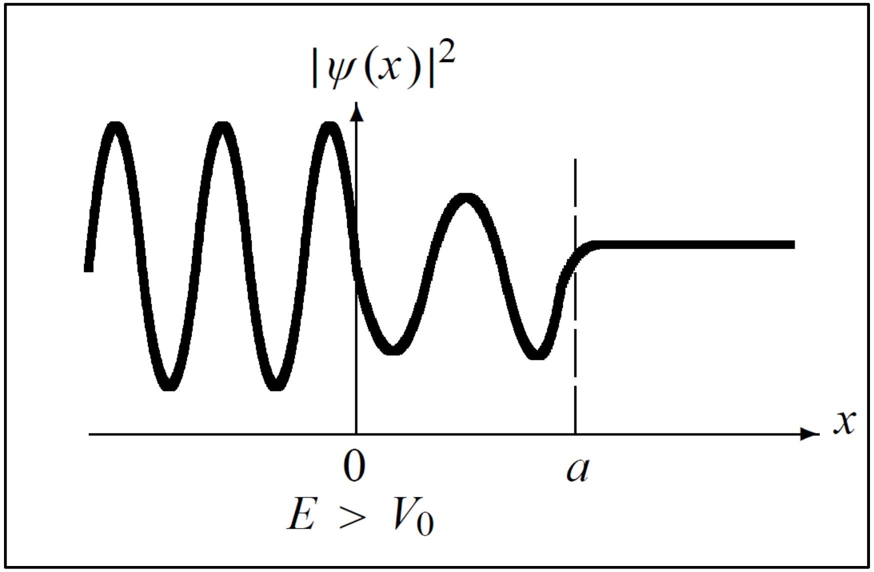
- **Coeficiente de transmissão:** $T = \left|\dfrac{\vec{j}_{\mathrm{trans}}}{\vec{j}_{\mathrm{inc}}}\right| = |C|^2\ ,\ \ C = \dfrac{4k_1k_2e^{-ik_1a}}{4k_1k_2 - 2i(k_1^2+k_2^2)\sin(k_2a)}$

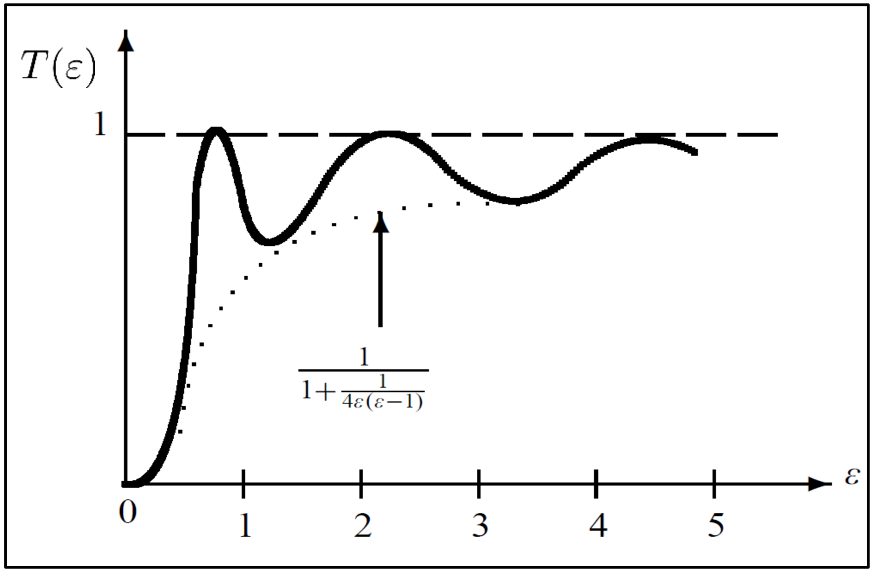
BARREIRA DE POTENCIAL ($E > V_0$)

- **Coeficiente de transmissão:** $T^{-1} = 1 + \dfrac{V_0^2}{4E(E-V_0)} \sin^2\left(a\sqrt{2mV_0/\hbar^2}\sqrt{E/V_0 - 1}\right)$

- **Definimos:** $\varepsilon = E/V_0\ ,\ \lambda = a\sqrt{2mV_0/\hbar^2}$

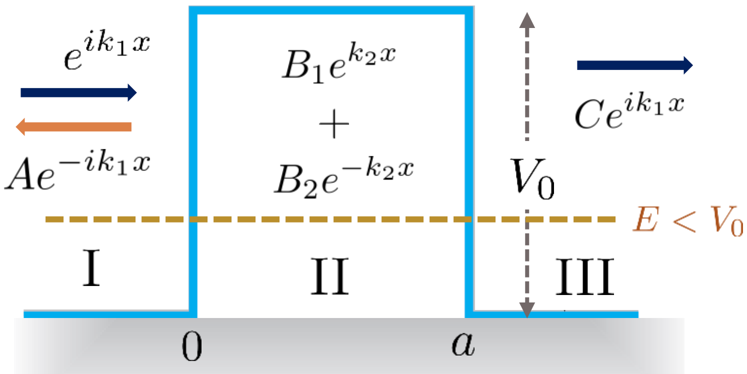
$$T = \left[1 + \frac{1}{4\varepsilon(\varepsilon-1)}\sin^2(\lambda\sqrt{\varepsilon-1})\right]^{-1}, \quad R = 1 - T = \left[1 + \frac{4\varepsilon(\varepsilon-1)}{\sin^2(\lambda\sqrt{\varepsilon-1})}\right]^{-1}$$





- Para altas energias ou barreiras “baixas”, $T \to 1$. As partículas não sentem o efeito do potencial.

BARREIRA DE POTENCIAL - Tunelamento $(E < V_0)$



$$u_{\mathrm{I}}(x) = e^{ik_1 x} + Ae^{-ik_1 x}$$
$$u_{\mathrm{II}}(x) = B_1 e^{k_2 x} + B_2 e^{-k_2 x}$$
$$u_{\mathrm{III}}(x) = Ce^{ik_1 x}$$

Também se poderia usar: $u_{\mathrm{I}}(x) = Ae^{ik_1 x} + Be^{-ik_1 x}$

Temos agora: $k_1^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2} > 0 \ , \ k_2^2 = \dfrac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} > 0$

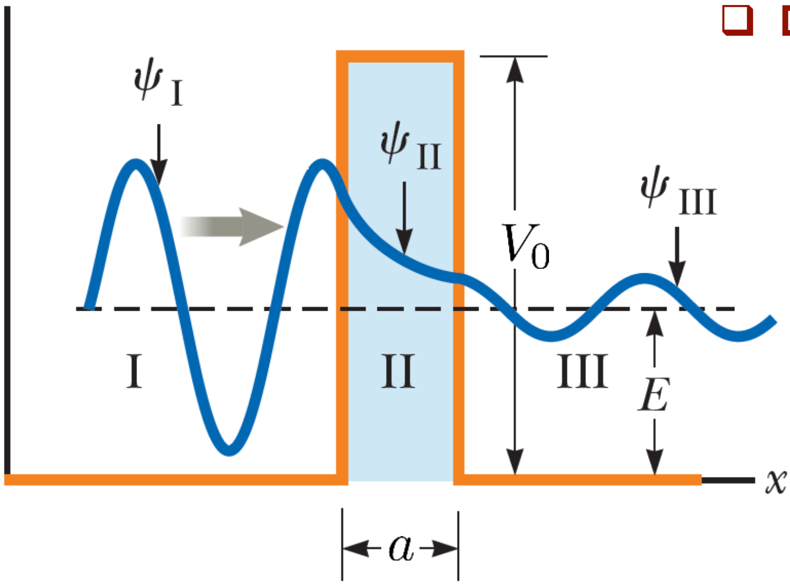
Usamos as relações de continuidade para determinar as constantes A e C

$$A = -i\frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2}\sinh(k_2 a)\left[2\cosh(k_2 a) + i\frac{k_2^2 - k_1^2}{k_1 k_2}\sinh(k_2 a)\right]^{-1}, \quad C = 2e^{-ik_1 a}\left[2\cosh(k_2 a) + i\frac{k_2^2 - k_1^2}{k_1 k_2}\sinh(k_2 a)\right]^{-1}$$

$$T = \left[1 + \frac{1}{4}\left(\frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2}\right)^2 \sinh^2(k_2 a)\right]^{-1} \longrightarrow T = \left[1 + \frac{1}{4}\frac{V_0^2}{E(V_0 - E)}\sinh^2\left(\frac{a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}\right)\right]^{-1}$$

$$R = \frac{1}{4}T\left(\frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2}\right)^2 \sinh^2(k_2 a) \longrightarrow R = \frac{1}{4}\frac{V_0^2 T}{E(V_0 - E)}\sinh^2\left(\frac{a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}\right)$$

BARREIRA DE POTENCIAL - Tunelamento $(E < V_0)$



- **Definimos novamente:** $\varepsilon = E/V_0\ ,\ \lambda = a\sqrt{2mV_0/\hbar^2}$

$$R = \frac{T}{4\varepsilon(1-\varepsilon)} \sinh^2\left(\lambda\sqrt{1-\varepsilon}\right),$$

$$T = \left[1 + \frac{1}{4\varepsilon(1-\varepsilon)} \sinh^2\left(\lambda\sqrt{1-\varepsilon}\right)\right]^{-1}$$

Tunelamento: Objetos quânticos podem "tunelar" através de barreiras classicamente impenetráveis.

- $\lambda\sqrt{1-\varepsilon} = k_2 a = \frac{a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)} \gg 1 \longrightarrow \sinh\left(\lambda\sqrt{1-\varepsilon}\right) \simeq \frac{1}{2}\exp\left(\lambda\sqrt{1-\varepsilon}\right)$

$$T = \left[1 + \frac{1}{4}\left(\frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2}\right)^2 \sinh^2(k_2 a)\right]^{-1} \xrightarrow[k_2 a \gg 1]{} \boxed{T \simeq \left(\frac{4k_1^2 k_2^2}{k_1^2 + k_2^2}\right)^2 e^{-2k_2 a}}$$

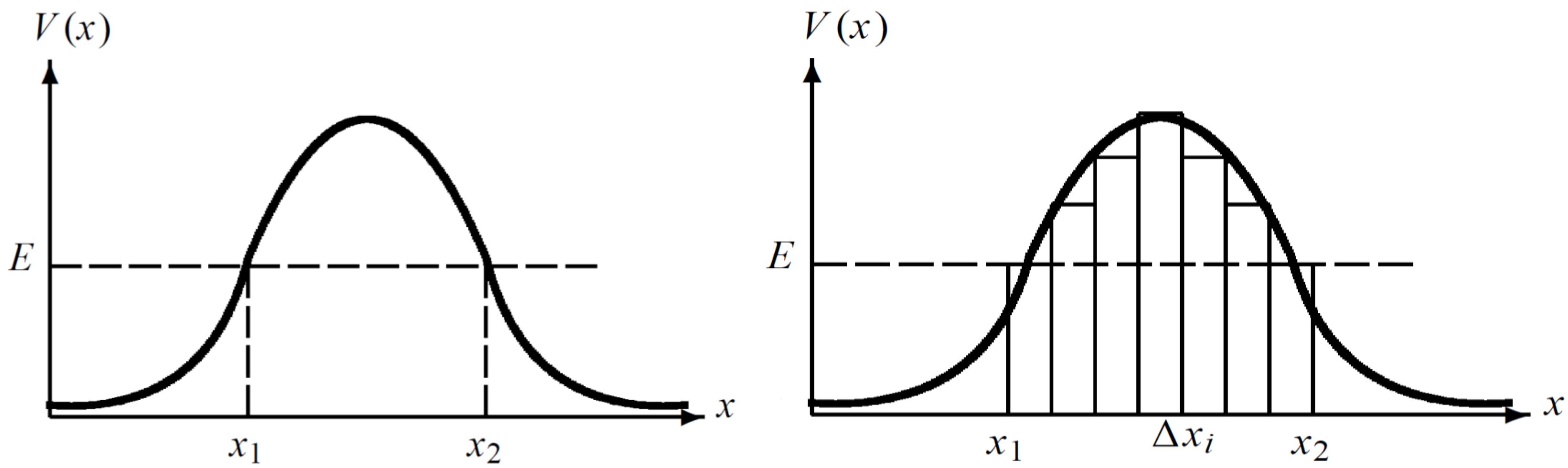
É fácil de ver que quando $\hbar \to 0$ (limite clássico) ou $a \to \infty$ temos $T \to 0$

BARREIRA DE POTENCIAL - Tunelamento $(E < V_0)$

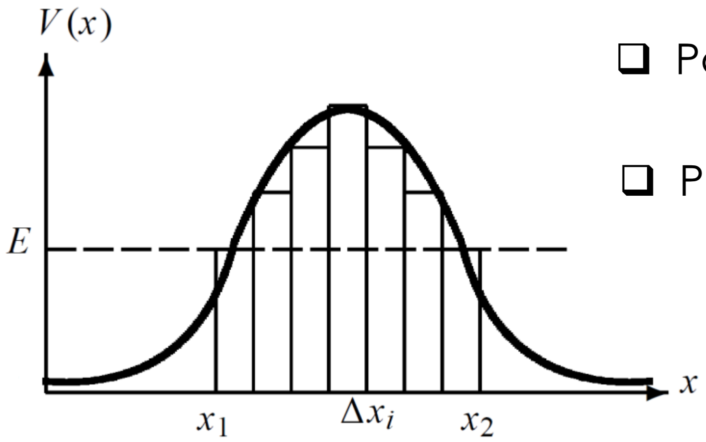
$$\boxed{T \simeq \left(\frac{4k_1^2k_2^2}{k_1^2+k_2^2}\right)^2 e^{-2k_2a}} \longrightarrow \ln(T) \simeq -2k_2a + 2\ln\left(\frac{4k_1^2k_2^2}{k_1^2+k_2^2}\right) \simeq -2k_2a$$

Vamos usar esta aproximação para dizer que: $T \simeq e^{-2k_2a}$

GERALMENTE AS BARREIRAS DE POTENCIAL NÃO SÃO RETANGULARES…



Dividimos a região não clássica em barreiras retangulares de largura Δx_i e valor $V(x_i)$



- Para cada barreira: $T_i \sim \exp\left[-\frac{2\Delta x_i}{\hbar}\sqrt{2m(V(x_i)-E)}\right]$
- Para toda a barreira:

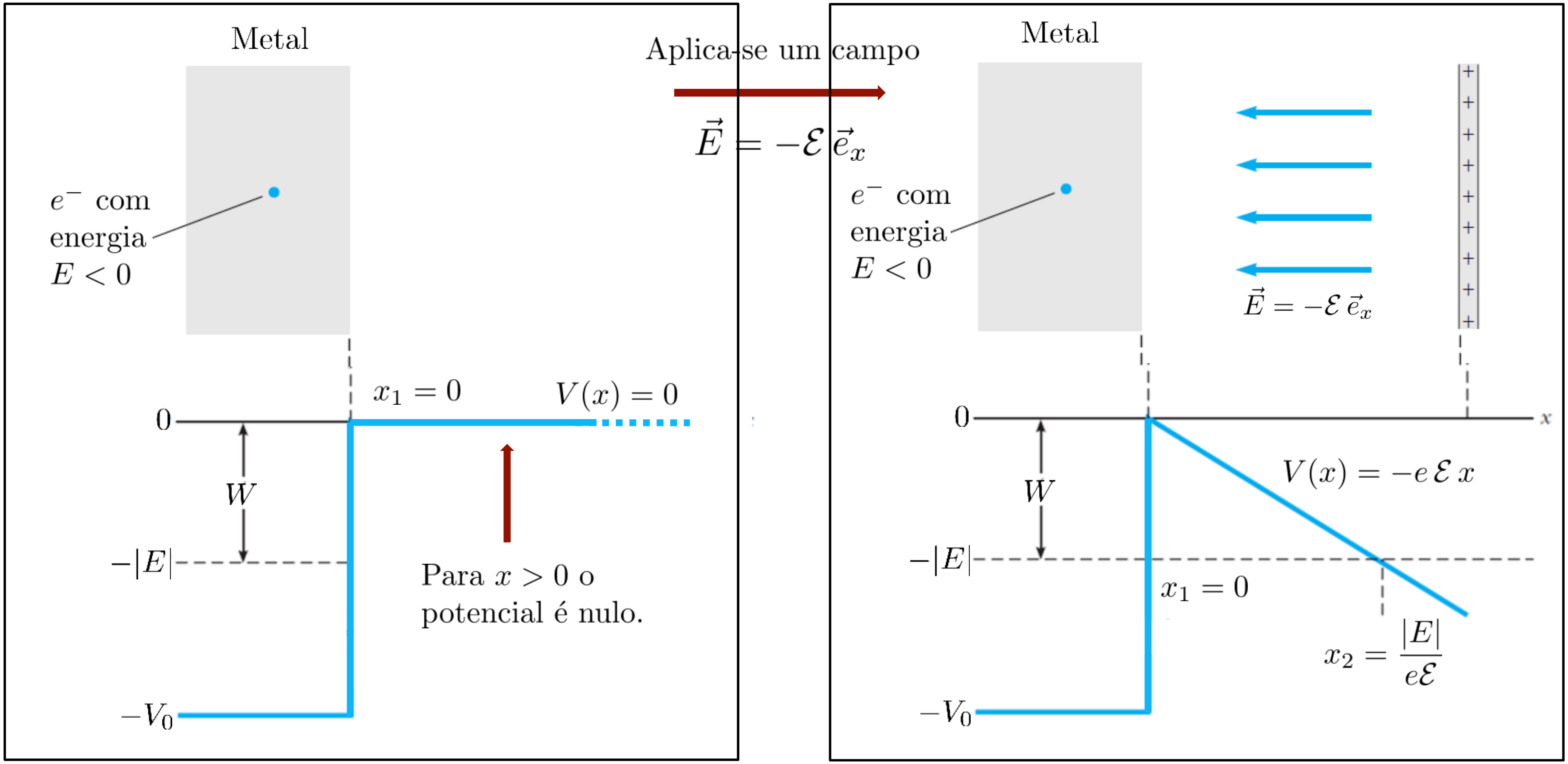
$$T \simeq \lim_{N\to\infty}\prod_{i=1}^{N}\exp\left[-\frac{2\Delta x_i}{\hbar}\sqrt{2m(V(x_i)-E)}\right]$$

$$= \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\lim_{\Delta x_i\to 0}\sum_i \Delta x_i\sqrt{2m(V(x_i)-E)}\right]$$

Então temos a aproximação: $T \simeq \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} dx\sqrt{2m\left[V(x)-E\right]}\right]$

É comum encontrar: $T \simeq e^{-2\gamma}\ ,\ \gamma = \frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} dx\,\sqrt{2m[V(x)-E]}$

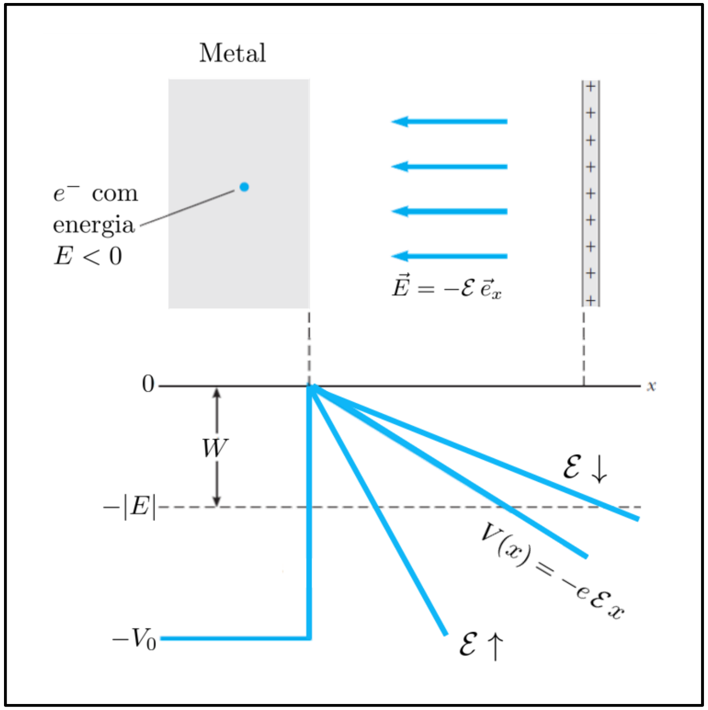
APLICAÇÕES DE TUNELAMENTO – Emissão por campo



Podemos agora calcular o coeficiente de transmissão:

$$T \simeq e^{-2\gamma}\ ,\ \gamma = \frac{1}{\hbar}\int_0^{\frac{|E|}{e\mathcal{E}}} \sqrt{2m_e\left[\,|E| - e\mathcal{E}x\right]}\,dx = \frac{2\sqrt{2m_e}|E|^{3/2}}{3e\hbar}\frac{1}{\mathcal{E}}$$

APLICAÇÕES DE TUNELAMENTO – Emissão por campo



Coeficiente de transmissão:

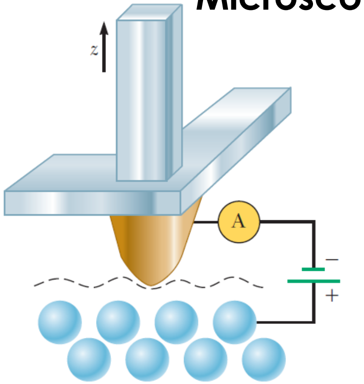
$$T \simeq \exp\left[-\frac{4\sqrt{2m_e}|E|^{3/2}}{3e\hbar}\frac{1}{\mathcal{E}}\right]$$

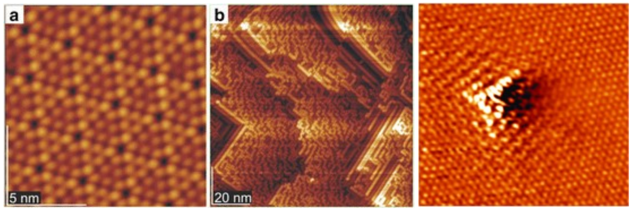
Os eletrões mais fáceis de arrancar são os mais energéticos (os do mar de Fermi) com energia $|E| = W$. Para esses eletrões:

$$\boxed{T \simeq \exp\left[-\frac{4\sqrt{2m_e}W^{3/2}}{3e\hbar}\frac{1}{\mathcal{E}}\right]}$$

(Fórmula de Fowler-Nordheim)

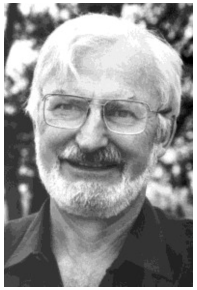
Microscópio por corrente de tunelamento (scanning tunneling microscope - STM)





O prémio Nobel da Física foi atríbuido a Rohrer e Binning em 1986;

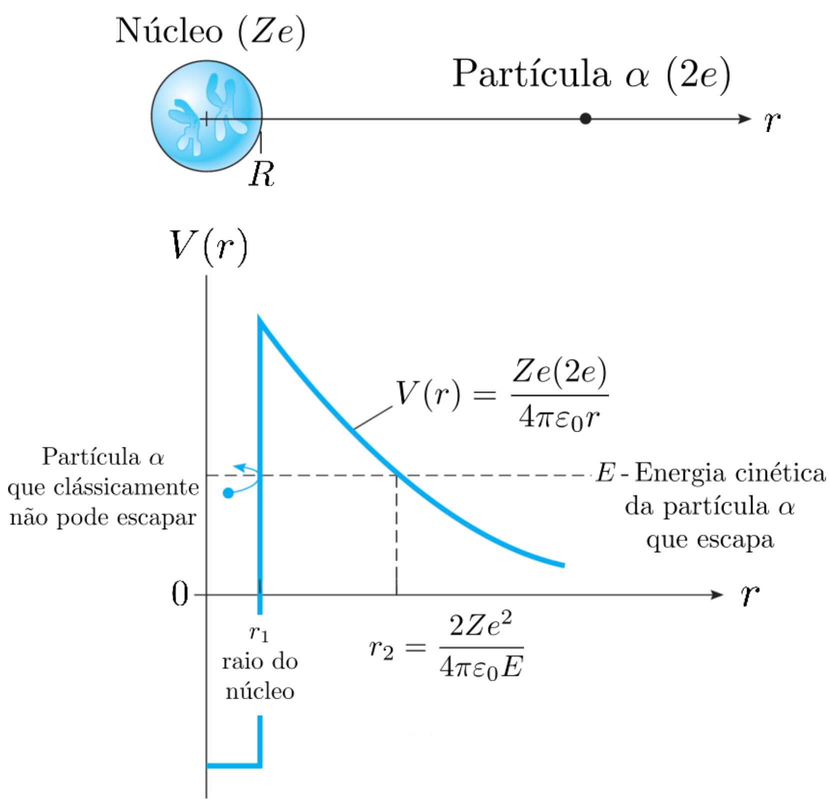
"for their design of the scanning tunneling microscope."



Heinrich Rohrer

Gerd Binning

APLICAÇÕES DE TUNELAMENTO – Decaimento α



Decaimento α – emissão espontânea de uma partícula α por parte de alguns núcleos. Gamow (1928) propôs a primeira explicação para este decaimento. Para isso, aproximou a interação nuclear (atrativa) por um poço de potencial.

Pontos de retorno clássico (pontos em que $V(r) = E$):

$$r_1 \text{ (raio do núcleo) },\ r_2 = \frac{2Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 E}$$

Pelo que vimos anteriormente, o coeficiente de transmissão através da barreira de Coulomb é dada por:

$$T \simeq e^{-2\gamma}\ ,\ \gamma = \frac{1}{\hbar}\int_{r_1}^{r_2} dr\,\sqrt{2m[V(r)-E]}$$

Resta-nos agora calcular este integral…

$$\gamma = \frac{1}{\hbar}\int_{r_1}^{r_2}\sqrt{2m\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{2Ze^2}{r} - E\right)}\,dr = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\int_{r_1}^{r_2}\sqrt{\frac{r_2}{r} - 1}\,dr$$

$$\xrightarrow{r \equiv r_2 \sin^2 u} \quad \gamma = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\left[r_2\left(\frac{\pi}{2} - \sin^{-1}\sqrt{\frac{r_1}{r_2}}\right) - \sqrt{r_1(r_2 - r_1)}\right]$$

Tendo em conta que, tipicamente, $r_1 \ll r_2$:

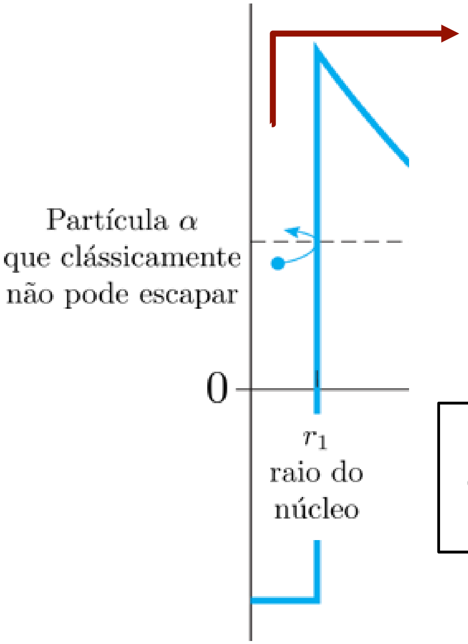
$$\gamma \cong \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\left[\frac{\pi}{2}r_2 - 2\sqrt{r_1 r_2}\right] = K_1\frac{Z}{\sqrt{E}} - K_2\sqrt{Zr_1}$$

$$K_1 \equiv \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\frac{\pi\sqrt{2m}}{\hbar} = 1.980\,\mathrm{MeV}^{1/2},$$

$$K_2 \equiv \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^{1/2}\frac{4\sqrt{m}}{\hbar} = 1.485\,\mathrm{fm}^{-1/2}$$

T – Probabilidade de a partícula α tunelar

Como vamos determinar o tempo de vida médio?



- A frequência de colisão com a "parede" do potencial é:

$$f = \frac{v}{2r_1}$$

, onde v é a velocidade típica da partícula α dentro do núcleo

- Probabilidade de emissão por unidade de tempo: $\frac{v}{2r_1}e^{-2\gamma}$

O tempo de vida é então: $\tau = \frac{2r_1}{v}e^{2\gamma} \longrightarrow \tau_{1/2} = \ln(2)\frac{2r_1}{v}e^{2\gamma}$

Tendo em conta que: $\gamma \cong \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\left[\frac{\pi}{2}r_2 - 2\sqrt{r_1 r_2}\right] = K_1\frac{Z}{\sqrt{E}} - K_2\sqrt{Zr_1}$

$$\longrightarrow \boxed{\log_{10}(\tau_{1/2}) = A(Z)\frac{1}{\sqrt{E}} + B(Z)}$$

Lei de Geiger-Nuttall

APLICAÇÕES DE TUNELAMENTO – Decaimento α

Physics Letters B 734 (2014) 203–206

Contents lists available at ScienceDirect

Physics Letters B

www.elsevier.com/locate/physletb

On the validity of the Geiger–Nuttall alpha-decay law and its microscopic basis

C. Qi [a,*], A.N. Andreyev [b,c], M. Huyse [d], R.J. Liotta [a], P. Van Duppen [d], R. Wyss [a]

Neste artigo testa-se a validade da relação de Geiger-Nuttall

$$\log_{10} T_{1/2} = A(Z)\, Q_\alpha^{-1/2} + B(Z)$$

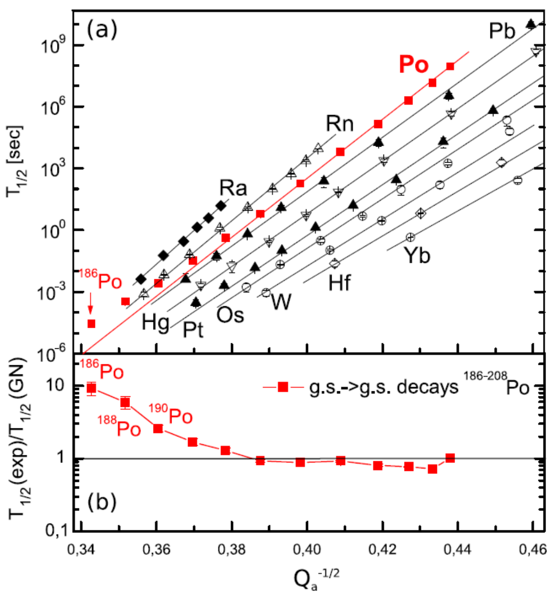


Fig. 1. (a) The logarithms of experimental partial α-decay half-lives (in s) [2,3,7,6] for the even–even Yb–Ra nuclei with neutron number $N < 126$ as a function of $Q_\alpha^{-1/2}$ (in MeV$^{-1/2}$). The straight lines show the description of the GN law with A and B values fitted for each isotopic chain. (b) The deviation of the experimental α-decay half-lives from those predicted by the GN law for the light Po isotopes.

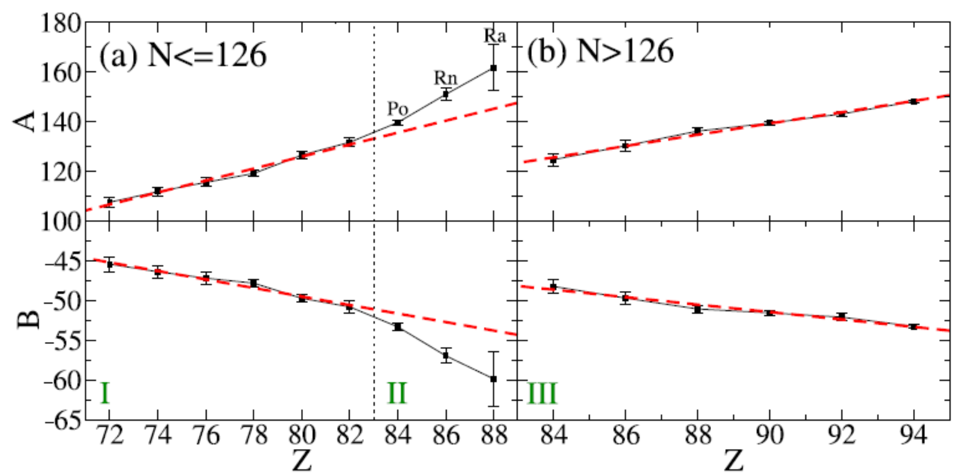
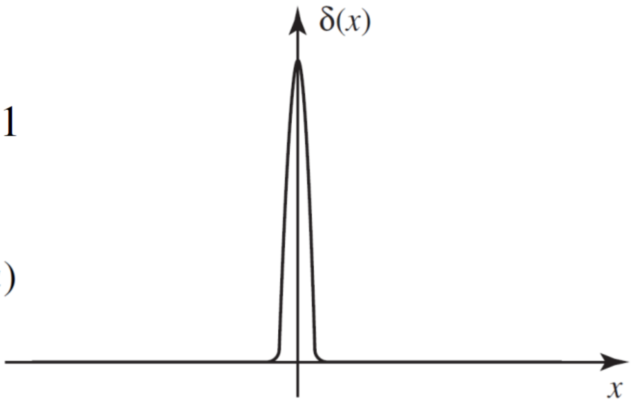


Fig. 2. (Color online.) (a) The coefficients $A(Z)$ and $B(Z)$ for even–even nuclei in regions I ($Z \le 82$) and II ($Z > 82$) with $N \le 126$. The red dashed lines are fitted only for the data from region I with $Z \le 82$ giving $A(Z) = 2.41Z - 66.7$ and $B(Z) = -0.54Z - 6.61$. (b) Same as (a) but for nuclei in region III ($Z > 82$), i.e., polonium to plutonium isotopes with neutron numbers $N > 126$. Again, the red dashed lines are determined by a fitting procedure, which gives $A(Z) = 2.27Z - 65.0$ and $B(Z) = -0.47Z - 9.36$.

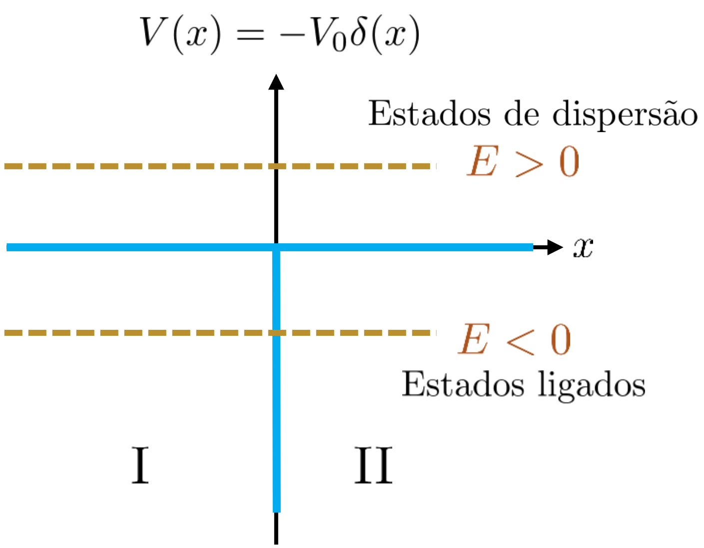
O POTENCIAL δ ATRATIVO – Griffiths 2.5.2

$$\delta(x) \equiv \left\{ \begin{array}{ll} 0, & \text{if } x \neq 0 \\ \infty, & \text{if } x = 0 \end{array} \right\}, \text{ with } \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)\, dx = 1$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\,\delta(x-a)\,dx = f(a)\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-a)\,dx = f(a)$$



- Vamos considerar o potencial δ atrativo: $V(x) = -V_0\delta(x)$



- E.S.: $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} - V_0\delta(x)\psi(x) = E\psi(x)$

- Estados ligados: $E < 0$

Para $x > 0$ e $x < 0$ (regiões I e II):

$$\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} = k^2\psi(x)\ ,\ k^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2} > 0$$

NOTA: SOBRE A CONTINUIDADE DA DERIVADA (AULA 2)

Vamos considerar de novo a E.S. independente do tempo:

$$\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x)-E]\psi(x) \xrightarrow[\text{à volta de um ponto com } x=a \text{, i.e. entre } a-\epsilon \text{ e } a+\epsilon.]{\text{Integramos agora a função}} \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}dx = \frac{2m}{\hbar^2}\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon}[V(x)-E]\psi(x)dx$$

$$\boxed{\left.\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\right|_{x=a^+} - \left.\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\right|_{x=a^-} = \frac{2m}{\hbar^2}\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon}[V(x)-E]\psi(x)dx\ , \quad a^\pm = x\pm\epsilon}$$

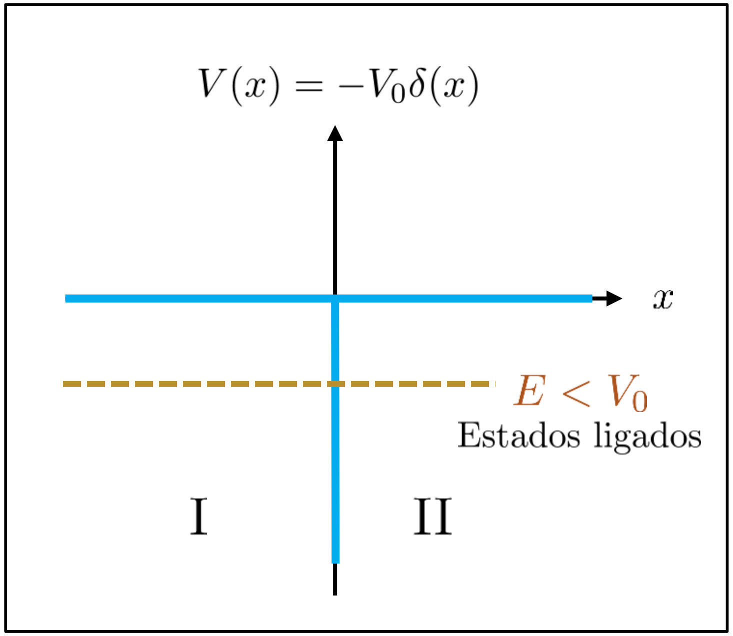
$$\xrightarrow{\lim_{\epsilon\to 0}} \left.\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\right|_{x=a^+} - \left.\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\right|_{x=a^-} = \frac{2m}{\hbar^2}\lim_{\epsilon\to 0}\left[\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon}V(x)\psi(x)dx\right]\ , \quad a^\pm = x\pm\epsilon$$

- Se $V(x)$ é finito então: $\lim_{\epsilon\to 0}\left[\left.\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\right|_{x=a^+} - \left.\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\right|_{x=a^-}\right] = 0$

- Se $V(x)$ for infinito, por ex. $V(x) = V_0\delta(x)$ então: $\lim_{\epsilon\to 0}\left[\left.\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\right|_{x=a^+} - \left.\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\right|_{x=a^-}\right] = \frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(a)$

As derivadas das funções de onda são descontínuas em pontos onde o potencial é infinito.

O POTENCIAL δ ATRATIVO – Griffiths 2.5.2



- Nas regiões I e II a solução mais geral será:

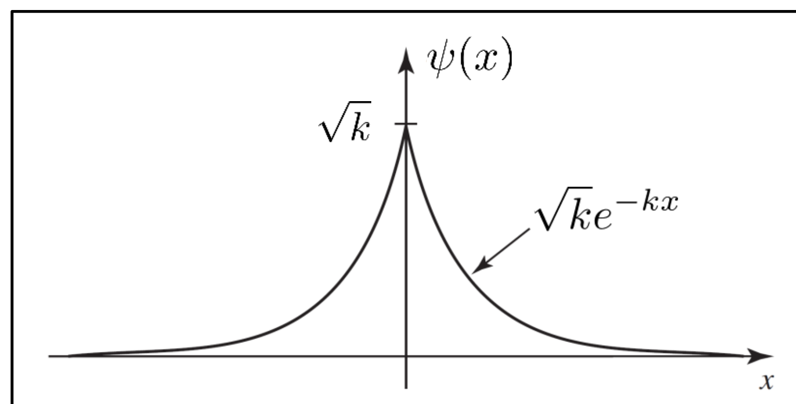
$$\psi_{\mathrm{I}}(x) = \cancel{Fe^{-kx}} + Be^{kx} \;,\; \psi_{\mathrm{II}}(x) = \cancel{Ce^{kx}} + Ae^{-kx}$$

- Relações de (des)continuidade

- A função de onda tem que ser contínua;
- A derivada da função de onda pode ser descontinua em pontos em que o potencial for ∞ ;

Continuidade: $\psi_{\mathrm{I}}(0) = A = \psi_{\mathrm{II}}(0) = B \rightarrow A = B$

$$\longrightarrow \psi(x) = \begin{cases} Be^{kx} \;, & x \leq 0 \\ Be^{-kx} \;, & x \geq 0 \end{cases} \xrightarrow{\text{normalização}} B = \sqrt{k}$$



Descontinuidade: Vamos integrar a E.S. de $-\epsilon$ a ϵ e fazemos o limite $\epsilon \rightarrow 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}\,dx + \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} V(x)\psi(x)\,dx = E\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} dx$$

O POTENCIAL δ ATRATIVO – Griffiths 2.5.2

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\underbrace{\left\{\left[\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\right]_{x=\epsilon}-\left[\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\right]_{x=-\epsilon}\right\}}_{-Bke^{-k\epsilon}-Bke^{k\varepsilon}}-V_0\underbrace{\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\delta(x)\psi(x)\,dx}_{\psi(0)=B}=0 \xrightarrow[\lim_{\epsilon\to 0}]{} \frac{\hbar^2}{m}k=V_0\to k=\frac{mV_0}{\hbar^2}$$

$$\boxed{k^2=\frac{2m|E|}{\hbar^2}\to E=-\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}}$$

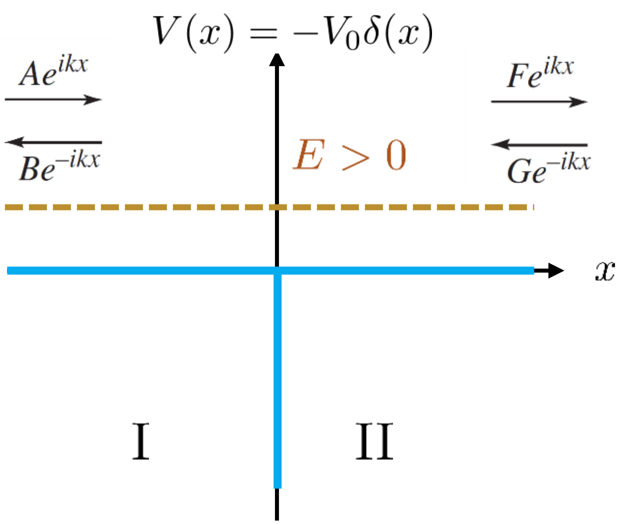
$$\xrightarrow{B=\sqrt{k}=mV_0/\hbar}$$

O potencial δ atrativo tem apenas um estado ligado com função de onda e energia dados por:

$$\psi(x)=\frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar}e^{-mV_0|x|/\hbar^2}$$

$$E=-\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}$$

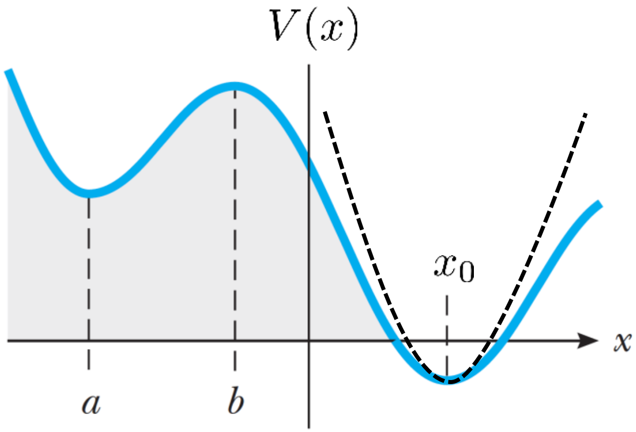
Estados de dispersão



Para os estados de dispersão, podemos determinar os coeficientes de transmissão e reflexão, tal como nos casos anteriores. O cálculo não tem nada de novo e está detalhado na secção 2.5.2 do Griffiths

$$R=\frac{1}{1+2\hbar^2E/(mV_0^2)}\ ,\ T=\frac{1}{1+mV_0^2/(2\hbar^2E)}$$

LEI DE HOOKE: $F = -kx = m\dfrac{d^2x}{dt^2} \longrightarrow \omega \equiv \sqrt{\dfrac{k}{m}}$ - frequência angular de oscilação



O movimento em torno de um ponto de equilíbrio estável é, no limite das pequenas amplitudes, descrito por um oscilador harmónico

$$V(x) = V(x_0) + V'(x_0)\,(x - x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)\,(x - x_0)^2 + \cdots$$

$$\longrightarrow V(x) \approx \frac{1}{2}V''(x_0)\,(x - x_0)^2 \longrightarrow k = V''(x_0)$$

OSCILADOR HARMÓNICO QUÂNTICO A 1-D: Resolver a eq. de Schrödinger com o potencial:

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

Como depende só de x a E.S. é separável.

$$\boxed{\text{E.S. independente do tempo: } -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi(x) = E\psi(x)}$$

RESOLUÇÃO DA E.S. INDEPENDENTE DO TEMPO

Método algébrico (Griff. 2.3.1)

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \longrightarrow \hat{H} = \frac{1}{2m}\left[\hat{p}^2 + (m\omega x)^2\right]$$

- Definimos os operadores:

$$\boxed{\hat{a}_\pm \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\mp i\,\hat{p} + m\omega x) \longrightarrow \hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}_-\hat{a}_+ - \frac{1}{2}\right)}$$

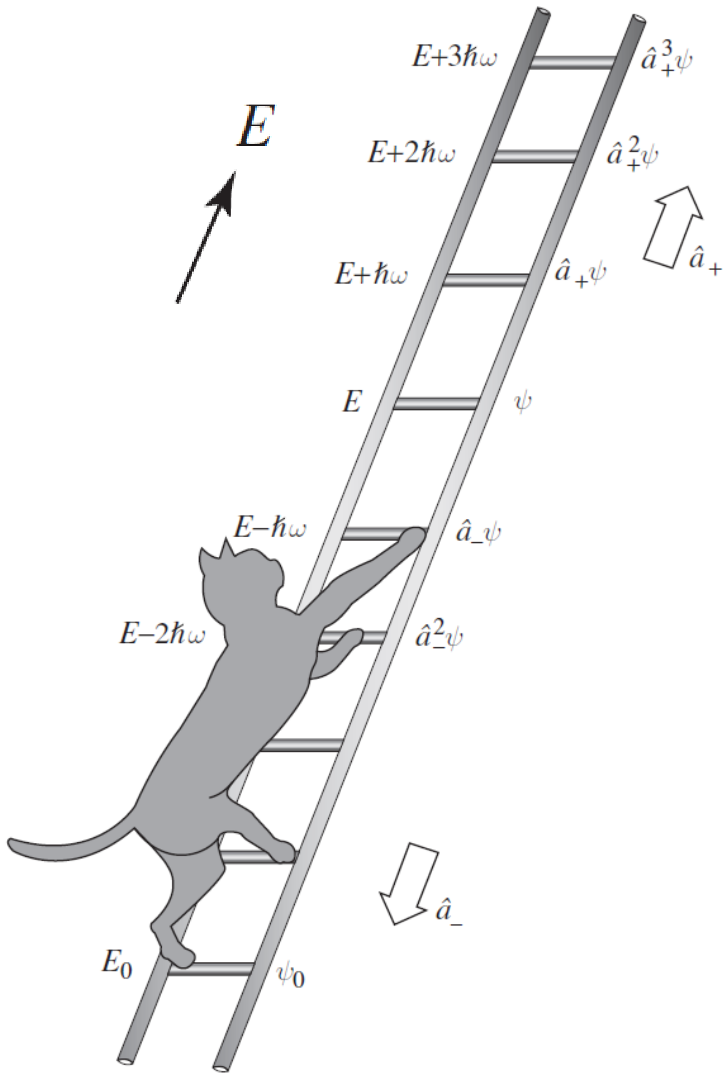
- Com isto, o problema inicial resume-se a:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi(x) = E\psi(x) \longrightarrow \hbar\omega\left(\hat{a}_\pm\hat{a}_\mp \pm \frac{1}{2}\right)\psi = E\psi$$

Se $\psi(x)$ obedece à E.S. de tal modo que $\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$, então:

$$\hat{H}\left[\hat{a}_+\psi(x)\right] = (E + \hbar\omega)\psi(x) \text{ e } \hat{H}\left[\hat{a}_-\psi(x)\right] = (E - \hbar\omega)\psi(x)$$

Ver demonstração no Griff.



- A ação dos operadores de subida ($\hat{a}_+$) e descida ($\hat{a}_-$) levam a estados com $E + \hbar\omega$ e $E - \hbar\omega$, respetivamente

$$\hat{a}_\pm \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(\mp i\,\hat{p} + m\omega x\right)$$

ISTO REPRESENTA UM PROBLEMA… QUAL?

Ao aplicar indefinidamente $\hat{a}_-$ chegamos a estados com energia negativa…

$$\Downarrow$$

Tem que haver um estado para o qual

$$\hat{a}_-\psi_0 = 0$$

Ou seja, a função de onda é zero para energias negativas

O OSCILADOR HARMÓNICO

- Vamos encontrar $\psi_0(x)$

$$\hat{a}_-\psi_0 = 0 \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)\psi_0 = 0 \longrightarrow \frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar}x\psi_0.$$

$$\boxed{\int\frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar}\int x\,dx \quad\Rightarrow\quad \ln\psi_0 = -\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + \text{ constante}} \longrightarrow \psi_0(x) = Ae^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

- Depois de normalizar, a função de onda para o estado de energia mais baixa (estado fundamental) do oscilador harmónico é dada por:

$$\boxed{\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}.}$$

- Tendo agora em conta que $\hat{H}\psi_0(x) = E_0\psi_0(x)$

$$\hbar\omega\left(\hat{a}_+\hat{a}_- + 1/2\right)\psi_0 = E_0\psi_0 \longrightarrow E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

O ESTADO FUNDAMENTAL DO OSCILADOR HARMÓNICO É CARACTERIZADO POR: $\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}, \quad E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$

COMO VAMOS DETERMINAR OS ESTADOS ESCITADOS?

- Sabemos que a ação de $\hat{a}_+$ faz subir a energia de $\hbar\omega$. Então, se aplicarmos n vezes, chegaremos a um estado ψ_n com energia E_n

$$\psi_n(x) = A_n \left(\hat{a}_+\right)^n \psi_0(x) \;\text{ com }\; E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

Está rigorosamente provado no Griffiths que:

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\hat{a}_+\right)^n \psi_0 \quad , \quad \hat{a}_+\psi_n = \sqrt{n+1}\,\psi_{n+1}, \quad \hat{a}_-\psi_n = \sqrt{n}\,\psi_{n-1}$$

É fácil de mostrar que os estados estacionários do OH são ortogonais entre si:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n \, dx = \delta_{mn}$$

Existe uma forma alternativa de determinar os estados estacionários do OH (método analítico – Griff. 2.3.2, Gasio. 4-7)

O OSCILADOR HARMÓNICO

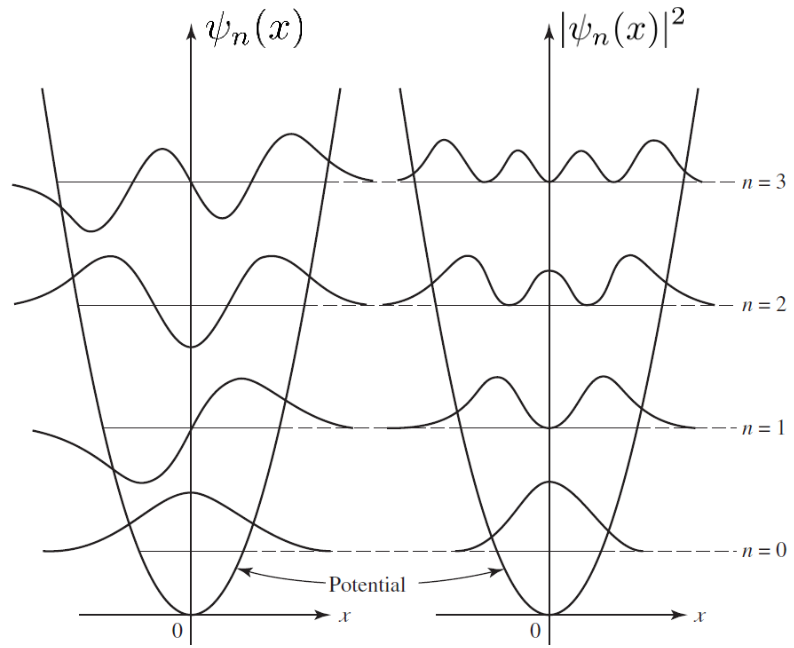
O método analítico permite mostrar que:

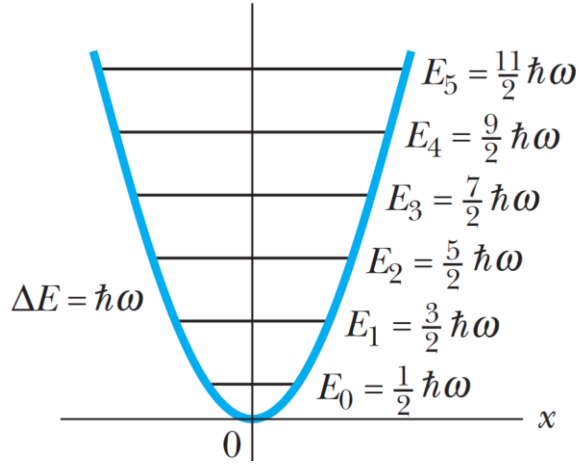
$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi)\, e^{-\xi^2/2}$$

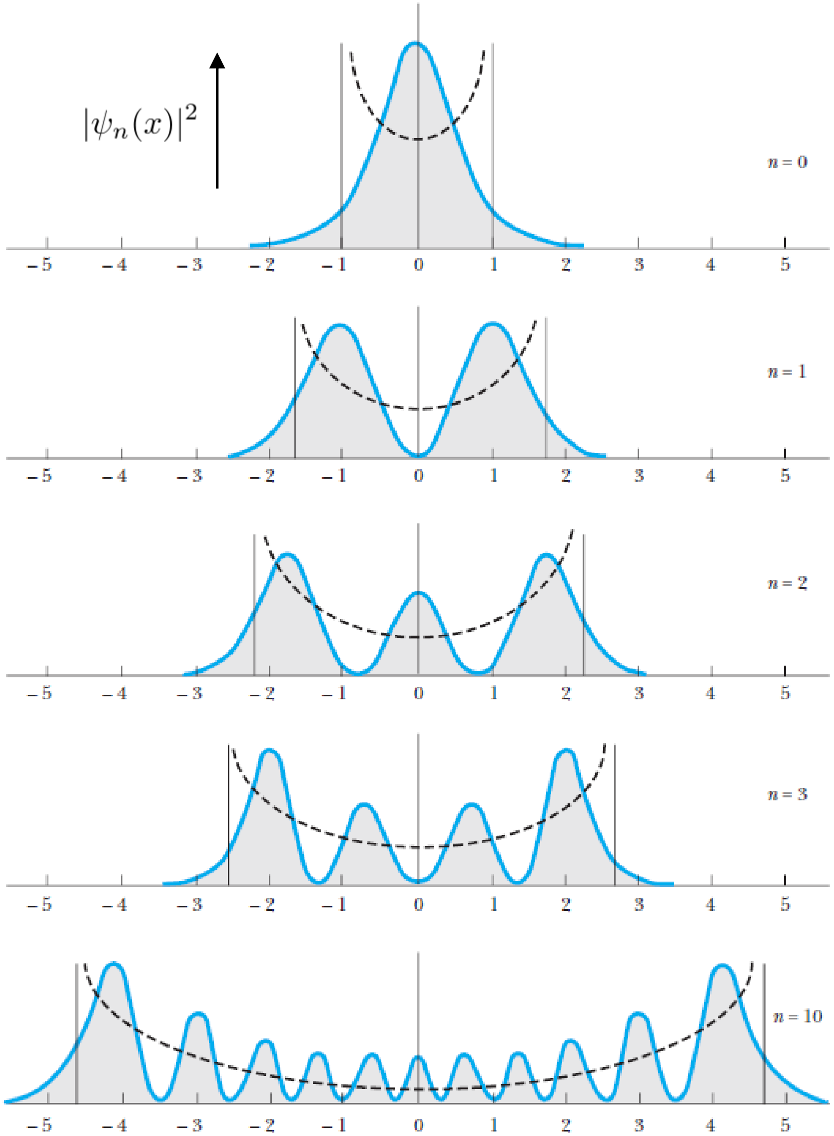
$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$$

onde $H_n(x)$ e são os polinómios de Hermite. Obviamente esta solução é equivalente à obtida pelo método algébrico.

$$H_0(y) = 1,$$
$$H_2(y) = 4y^2 - 2,$$
$$H_4(y) = 16y^4 - 48y^2 + 12,$$
$$H_1(y) = 2y,$$
$$H_3(y) = 8y^3 - 12y,$$
$$H_5(y) = 32y^5 - 160y^3 + 120y$$







Comparação com o caso clássico:

ρ_{cl} = probabilidade de a partícula estar entre x e $x + dx$

$$\rho_{cl} = \frac{dt}{T} = \frac{\omega}{2\pi}dt = \frac{\omega}{2\pi}\frac{1}{v}dx$$

A velocidade é: $v = \dfrac{dx}{dt} = A\omega\cos(\omega t)$

$$= \omega\sqrt{A^2 - A^2\sin^2(\omega t)} = \omega\sqrt{A^2 - x^2(t)}$$

$$\longrightarrow \rho_{cl}\,dx = \frac{1}{2\pi}\frac{dx}{\sqrt{A^2 - x^2(t)}}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\rho_{cl}\,dx = 1 \longrightarrow \boxed{\rho_{cl} = \frac{1}{\pi}\frac{dx}{\sqrt{A^2 - x^2}}}$$

$$A^2 = \frac{2E}{m\omega^2} \longrightarrow \boxed{\rho_{cl} = \frac{\sqrt{m\omega^2}}{\pi}\frac{dx}{\sqrt{2E - m\omega^2 x^2}}}$$

Determine a probabilidade de encontrar uma partícula sujeita a um potencial de oscilador harmónico na região clássicamente proíbida para os estados $n = 0, 1, 2, 3, 4....$ Comente.

$$\int_1^\infty e^{-y^2} dy = 0.1394, \qquad \int_{\sqrt{3}}^\infty y^2 e^{-y^2} dy = 0.0495,$$

$$\int_{\sqrt{5}}^\infty \left(4y^2 - 2\right)^2 e^{-y^2} dy = 0.6740, \qquad \int_{\sqrt{7}}^\infty \left(8y^3 - 12y\right)^2 e^{-y^2} dy = 3.6363,$$

$$\int_{\sqrt{9}}^\infty \left(16y^4 - 48y^2 + 12\right)^2 e^{-y^2} dx = 26.86,$$

Resposta:

$$P_0 = 0.1573, \qquad P_1 = 0.1116, \qquad P_2 = 0.095\,069, \quad P_3 = 0.085\,48, \qquad P_4 = 0.078\,93.$$

Considere uma partícula de massa m e carga elétrica q sujeita a um potencial de oscilador harmónico unidimensional de frequência ω. O sistema encontra-se sujeito a um campo eléctrico uniforme $\vec{E} = \mathcal{E}\vec{e}_x$ (V/m).

i) Escreva o Hamiltoniano do sistema.
ii) Determine $\psi_n(x)$ e E_n.

Resposta: i) $H = p^2/2m + m\omega^2 x^2/2 - q\mathcal{E}x$ ii) $E_n = \hbar\omega(n + 1/2) - \dfrac{\mathcal{E}^2 q^2}{2m\omega^2}$, $\psi_n(y) = \dfrac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\, 2^n n! x_0}} e^{-y^2/2x_0^2} H_n\left(\dfrac{y}{x_0}\right)$

$y = x - q\mathcal{E}/(m\omega^2)$