

Física Quântica I / Mecânica Quântica

Vítor M. Pereira

Departamento de Física | Universidade do Minho

2021/22 — 2º Sem

Lição 19

Oscilador harmónico em 1D. Solução algébrica.

Aspetos preliminares

- O oscilador harmónico em física clássica
- A equação de onda e natureza do espectro de energia
- Dois métodos de solução

O método algébrico via operadores de criação e destruição

- Operadores de criação e destruição
- Espectro de energia
- Função de onda do estado fundamental
- Construção iterativa dos restantes autoestados de energia
- Elementos de matriz entre autoestados de energia
- Incertezas e flutuações quânticas no estado fundamental
- Evolução temporal

Um modelo e paradigma muito importante em diferentes contextos físicos.

- Potencial confinante com dependência quadrática na posição:

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \quad \longrightarrow \quad F = -\frac{dV}{dx} = -kx. \quad (\text{lei de Hooke})$$

- Hamiltoniano clássico para uma partícula neste potencial:

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2.$$

- Equações de movimento clássicas (Newton):

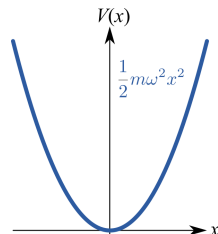
$$m \frac{dx^2}{dt^2} = -kx \quad \longrightarrow \quad x(t) = x_M \cos(\omega t - \phi).$$

- O movimento é **periódico** sinusoidal em torno da origem, com frequência angular

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (\text{frequência de oscilação}).$$

- É convencional usar esta frequência ω na definição do potencial:

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (\text{Hamiltoniano do oscilador harmónico}).$$



A eq. Schrödinger para este potencial

$$\overbrace{\left[\frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{X}^2 \right]}^{\hat{H}} |\varphi\rangle = E |\varphi\rangle \quad \xrightarrow[\hat{X} \mapsto x]{\hat{P} \mapsto -i\hbar \frac{d}{dx}} \quad \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right] \varphi(x) = E \varphi(x)$$

É conveniente reescrevê-la definindo

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad \text{e} \quad \epsilon \equiv \frac{E}{\hbar\omega} \quad \xrightarrow{\text{ESIT}} \quad \frac{d^2 \varphi(\xi)}{d\xi^2} + (2\epsilon - \xi^2) \varphi(\xi) = 0$$

Antes de começar, podemos estabelecer as seguintes propriedades:

- ❶ Os valores próprios de \hat{H} (energias E) são **positivos**:

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle &= \frac{1}{2m} \langle \psi | \hat{P}^2 | \psi \rangle + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle \psi | \hat{X}^2 | \psi \rangle = \frac{1}{2m} \langle \psi | \hat{P}^\dagger \hat{P} | \psi \rangle + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle \psi | \hat{X}^\dagger \hat{X} | \psi \rangle \\ &= \frac{1}{2m} \langle \hat{P} \psi | \hat{P} \psi \rangle + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle \hat{X} \psi | \hat{X} \psi \rangle \geq 0 \quad (\forall |\psi\rangle, \text{ e para os autoestados em particular}) \end{aligned}$$

- ❷ O espectro de energias é totalmente **discreto** porque

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} V(x) = +\infty \quad \Rightarrow \quad \text{todos os estados são confinados (ligados)}$$

- ❸ O espectro de energia é **infinito** e **não degenerado** (em 1D).
❹ As funções próprias $\varphi_n(x)$ têm **paridade definida**, porque $V(x) = V(-x)$.

Método I. Expansão em série (método de Frobenius). Um método sistemático de resolver a eq. diferencial

$$\frac{d^2 \varphi(\xi)}{d\xi^2} + (2\epsilon - \xi^2) \varphi(\xi) = 0,$$

que leva às soluções

$$\varphi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2} h_n(\sqrt{m\omega/\hbar} x), \quad h_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}.$$

Mas não é muito prático utilizar estas funções diretamente para cálculos. Por exemplo,

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{n'} | \hat{P}^2 | \varphi_n \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_{n'}(x)^* \left[\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right]^2 \varphi_n(x) dx \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{2^n 2^{n'} n! n'!}} \times \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2} h_{n'}(\sqrt{m\omega/\hbar} x) \left[\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right]^2 e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2} h_n(\sqrt{m\omega/\hbar} x) dx \quad (!!) \end{aligned}$$

Detalhes deste método: Bransden, Sec. 4.7 (p. 170).

Método II. Método algébrico, baseado totalmente em operadores. **O método que usaremos.**

O Hamiltoniano deste problem é

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{X}^2, \quad \text{onde} \quad [\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar.$$

Definimos agora os **novos operadores**:

$$\hat{a} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{X} + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} \hat{P}, \quad \hat{a}^\dagger \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{X} - i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} \hat{P}.$$

Estes operadores **não comutam** (importante!):

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{X} + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} \hat{P}, \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{X} - i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} \hat{P} \right] = \xrightarrow{[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar} = 1.$$

Notas:

- É convencional representar \hat{a} e \hat{a}^\dagger sem o “chapéu”. Faremos isso: $\hat{a} \rightarrow a$, $\hat{a}^\dagger \rightarrow a^\dagger$.
- Os operadores a e a^\dagger **não são** Hermíticos.

Reparemos que o produto

$$\begin{aligned} a^\dagger a &= \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{X} - i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} \hat{P} \right) \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{X} + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} \hat{P} \right) \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{X}^2 + \frac{1}{2m\omega\hbar} \hat{P}^2 + \frac{1}{2\hbar} i \hat{X} \hat{P} - \frac{1}{2\hbar} i \hat{X} \hat{P} \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{X}^2 + \frac{1}{2m\omega\hbar} \hat{P}^2 + \frac{1}{2\hbar} i [\hat{X}, \hat{P}] \\ \hbar\omega a^\dagger a &= \frac{m\omega^2}{2} \hat{X}^2 + \frac{1}{2m} \hat{P}^2 - \frac{\hbar\omega}{2} \end{aligned}$$

Logo, podemos escrever o Hamiltoniano como

Hamiltoniano do OH em termos dos operadores de criação e destruição

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{X}^2}{2} = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad \text{onde} \quad [a, a^\dagger] = 1.$$

O **operador número** (\hat{N}) é definido como

$$\hat{N} \equiv a^\dagger a, \quad \text{sendo que} \quad [\hat{N}, a] = [a^\dagger a, a] = [a^\dagger, a]a = -a, \quad [\hat{N}, a^\dagger] = \dots = a^\dagger.$$

Logo, o Hamiltoniano do OH pode escrever-se também como

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right)$$

e a tarefa de resolver a ESIT, $\hat{H}|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$, reduz-se a encontrar os auto-valores/vetores de \hat{N} :

$$\hat{N}|\varphi_n\rangle = n|\varphi_n\rangle \quad \longrightarrow \quad \hat{H}|\varphi_n\rangle = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right) |\varphi_n\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \underbrace{\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)}_{E_n} |\varphi_n\rangle \quad \Rightarrow \quad E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Vamos agora resolver o problema de valores próprios para \hat{N} : $\hat{N}|\varphi_n\rangle = n|\varphi_n\rangle$.

I. Os autovalores de \hat{N} não podem ser negativos.

Peguemos num autoestado $|\varphi_n\rangle$ de \hat{N} e atuemos nele com a :

$$a|\varphi_n\rangle \xrightarrow{\text{tomando o } |\dots|^2} (\langle\varphi_n|a^\dagger)(a|\varphi_n\rangle) = \langle\varphi_n|\hat{N}|\varphi_n\rangle = n\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle \quad \Rightarrow \quad n \geq 0. \quad \checkmark$$

II. Consideremos o caso $n = 0$. O ket $|\rangle = a|\varphi_0\rangle$ é nulo.

Retomando a expressão acima, se $n = 0$:

$$\langle\varphi_0|a^\dagger a|\varphi_0\rangle = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \text{norma do ket } (a|\varphi_0\rangle) = 0 \quad \Rightarrow \quad a|\varphi_0\rangle = 0. \quad \checkmark$$

III. Se $n > 0$, o ket $a|\varphi_n\rangle$ é autoestado de \hat{N} com valor próprio $n - 1$.

$$\hat{N}(a|\varphi_n\rangle) = (a\hat{N} + [\hat{N}, a])|\varphi_n\rangle = a\hat{N}|\varphi_n\rangle - a|\varphi_n\rangle = (n - 1)a|\varphi_n\rangle. \quad \checkmark$$

IV. O ket $a^\dagger|\varphi_n\rangle$ é autoestado de \hat{N} com valor próprio $n + 1$.

Analogamente à afirmação III,

$$\hat{N}a^\dagger|\varphi_n\rangle = (a^\dagger\hat{N} + [\hat{N}, a^\dagger])|\varphi_n\rangle = a^\dagger\hat{N}|\varphi_n\rangle + a^\dagger|\varphi_n\rangle = (n + 1)a^\dagger|\varphi_n\rangle. \quad \checkmark$$

V. O espectro de \hat{N} consiste em todos os inteiros não negativos

Se n for inteiro, de acordo com o resultado (III) acima,

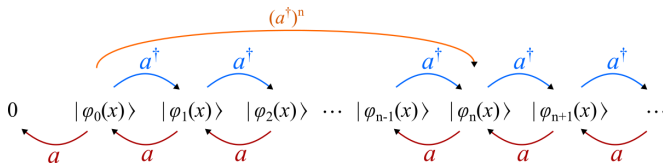
$$a^n |\varphi_n\rangle = a^{n-1} a |\varphi_n\rangle = \text{const.} \times a^{n-1} |\varphi_{n-1}\rangle = \text{const.} \times a^{n-2} |\varphi_{n-2}\rangle \cdots = \text{const.} \times |\varphi_0\rangle,$$

o que significa que $a^n |\varphi_n\rangle$ é autoestado de \hat{N} com valor próprio $n = 0$.

Mas, de acordo com o resultado (II),

$$a^{n+1} |\varphi_n\rangle = a(a^n |\varphi_n\rangle) = \text{const.} \times a |\varphi_0\rangle = 0.$$

Se n não fosse inteiro, não conseguiríamos obter $a^{n+1} |\varphi_n\rangle = 0$. Isso seria inconsistente com I–IV.



Ação dos operadores de criação/destruição num autoestado $|\varphi_n\rangle$ de \hat{N}

- A ação de a em $|\varphi_n\rangle$ resulta no autoestado $|\varphi_{n-1}\rangle$ (**destruição** de um quantum de energia).
- A ação de a^\dagger em $|\varphi_n\rangle$ resulta no autoestado $|\varphi_{n+1}\rangle$ (**criação** de um quantum de energia).
- A sequência de “destruição” $a|\varphi_n\rangle, a^2|\varphi_n\rangle, \dots$ termina com $a^{n+1}|\varphi_n\rangle = 0$.
- Os valores próprios, n , de \hat{N} são os inteiros $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

Partimos do Hamiltoniano do O.H. em 1D

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{X}^2,$$

definimos o novo operador

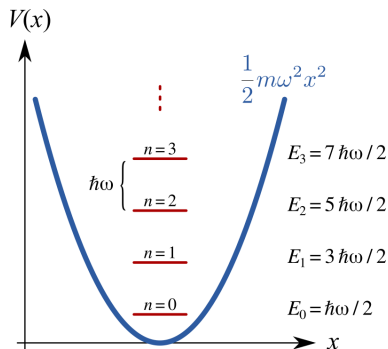
$$a \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{X} + i\sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}} \hat{P} \right), \quad [a, a^\dagger] = 1,$$

e re-escrevemos \hat{H} como

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right).$$

Deduzimos o espectro de \hat{N} , de onde resulta

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad \text{com} \quad n = 0, 1, 2, \dots$$



Características do espectro de energia

- Estado fundamental: $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega > 0$. (flutuação quântica; relação de incerteza)
- Espectro totalmente discreto e infinito.
- Níveis equidistantes: $E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$. (independente de n)

Função de onda do estado fundamental

Acabamos de determinar o espectro E_n . Falta determinar as FdO correspondentes, $\varphi_n(x)$.

Partimos do resultado (II) acima:

$$a|\varphi_0\rangle = 0.$$

Projetamos na base de posição:

$$\begin{aligned}\langle x|a|\varphi_0\rangle &= 0 \\ \Leftrightarrow \langle x|\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{X} + i\sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}}\hat{P}\right)|\varphi_0\rangle &= 0 \\ \Leftrightarrow \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\langle x|\hat{X}|\varphi_0\rangle + i\sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}}\langle x|\hat{P}|\varphi_0\rangle &= 0 \\ \Leftrightarrow \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\varphi_0(x) + i\sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}}\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\varphi_0(x) &= 0 \\ \Leftrightarrow \left(\frac{m\omega}{\hbar}x + \frac{d}{dx}\right)\varphi_0(x) &= 0\end{aligned}$$

Estado fundamental do oscilador harmónico 1D

$$\varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \quad (\text{função Gaussiana})$$

Principais resultados

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{X} + i\sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}}\hat{P}\right)$$

$$[a, a^\dagger] = 1$$

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)$$

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n \in \mathbb{N}_0$$

$$\hat{N} \equiv a^\dagger a, \quad \hat{N}|\varphi_n\rangle = n|\varphi_n\rangle$$

$$a|\varphi_n\rangle \propto |\varphi_{n-1}\rangle$$

$$a^\dagger|\varphi_n\rangle \propto |\varphi_{n+1}\rangle$$

$$a|\varphi_0\rangle = 0$$

Construção iterativa dos restantes autoestados de energia

O objetivo é gerar **todos** os restantes autoestados $|\varphi_n\rangle$ a partir do estado fundamental **normalizado**, $|\varphi_0\rangle$.

Recordando o resultado (IV) acima,

$$a^\dagger |\varphi_n\rangle = \overset{\text{constante}}{\downarrow} c_{n+1} |\varphi_{n+1}\rangle \Leftrightarrow |\varphi_{n+1}\rangle = \frac{1}{c_{n+1}} a^\dagger |\varphi_n\rangle.$$

Para $|\varphi_{n+1}\rangle$ estar normalizado,

$$\langle \varphi_{n+1} | \varphi_{n+1} \rangle = 1 \Leftrightarrow \frac{1}{|c_{n+1}|^2} \langle \varphi_n | a a^\dagger | \varphi_n \rangle = 1.$$

Usando a relação de comutação $[a, a^\dagger] = a a^\dagger - a^\dagger a = 1$,

$$\langle \varphi_{n+1} | \varphi_{n+1} \rangle = 1 \Leftrightarrow \frac{1}{|c_{n+1}|^2} \langle \varphi_n | 1 + a^\dagger a | \varphi_n \rangle = \frac{1+n}{|c_{n+1}|^2} = 1.$$

De onde resulta

$$c_{n+1} = \sqrt{n+1}.$$

Ação de a^\dagger entre autoestados normalizados

$$a^\dagger |\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1} |\varphi_{n+1}\rangle \Leftrightarrow |\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} a^\dagger |\varphi_{n-1}\rangle$$

Principais resultados

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{X} + i \sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}} \hat{P} \right)$$

$$[a, a^\dagger] = 1$$

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right)$$

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

$$\hat{N} \equiv a^\dagger a, \quad \hat{N} |\varphi_n\rangle = n |\varphi_n\rangle$$

$$a |\varphi_n\rangle \propto |\varphi_{n-1}\rangle$$

$$a^\dagger |\varphi_n\rangle \propto |\varphi_{n+1}\rangle$$

$$a |\varphi_0\rangle = 0$$

$$\varphi_0(x) = \left(\frac{\omega m}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2}$$

Construção iterativa dos restantes autoestados de energia

Podemos expandir recursivamente o último resultado:

$$\begin{aligned} |\varphi_n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n}} a^\dagger |\varphi_{n-1}\rangle \\ |\varphi_{n-1}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n-1}} a^\dagger |\varphi_{n-2}\rangle \\ &\vdots \\ |\varphi_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{1}} a^\dagger |\varphi_0\rangle \end{aligned}$$

Conjunto completo de autoestados a partir do fundamental

$$|\varphi_n\rangle = \frac{a^\dagger}{\sqrt{n}} \frac{a^\dagger}{\sqrt{n-1}} \frac{a^\dagger}{\sqrt{n-2}} \cdots \frac{a^\dagger}{\sqrt{1}} |\varphi_0\rangle \quad \Leftrightarrow \quad |\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |\varphi_0\rangle$$

Por fim, reparamos que

$$a|\varphi_n\rangle = a \left(\frac{1}{\sqrt{n}} a^\dagger |\varphi_{n-1}\rangle \right) = \frac{1}{\sqrt{n}} (1 + a^\dagger a) |\varphi_{n-1}\rangle = \sqrt{n} |\varphi_{n-1}\rangle.$$

Relações entre autoestados normalizados de \hat{H} para o oscilador harmónico

$$a^\dagger |\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1} |\varphi_{n+1}\rangle, \quad a |\varphi_n\rangle = \sqrt{n} |\varphi_{n-1}\rangle, \quad |\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |\varphi_0\rangle.$$

Como acabamos de estabelecer que

$$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |\varphi_0\rangle,$$

basta-nos projetar esta relação na base de posição:

$$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |\varphi_0\rangle$$

$$\langle x|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle x|(a^\dagger)^n |\varphi_0\rangle$$

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right]^n \varphi_0(x)$$

Funções de onda normalizadas partindo do estado fundamental

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right]^n \varphi_0(x), \quad \varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2}.$$

Por exemplo:

$$\varphi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right] \varphi_0(x) = \left[\frac{4}{\pi} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^3 \right]^{\frac{1}{4}} x e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2}.$$

Cada uma destas FdO pode ser escrita na seguinte forma final.

Funções de onda normalizadas do oscilador harmónico em 1D

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

As funções $h_n(z)$ são conhecidas como **polinómios de Hermite**. Obedecem às relações

$$h_n(z) = 2z h_{n-1}(z) - 2(n-1) h_{n-2}(z), \quad \text{e} \quad h_0(z) = 1, \quad h_1(z) = 2z.$$

Os polinómios de ordem mais baixa desta família são

$$h_0(z) = 1, \quad h_1(z) = 2z, \quad h_2(z) = 4z^2 - 2, \quad h_3(z) = 8z^3 - 12z, \quad \text{etc.}$$

Mas, em geral, **é mais fácil** apenas recordar que

$$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |\varphi_0\rangle \quad \longrightarrow \quad \varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right]^n \varphi_0(x),$$

juntamente com

$$a|\varphi_0\rangle = 0 \quad \longrightarrow \quad \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x + \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right] \varphi_0(x) = 0.$$

Sumário intercalar – o espectro de energias e os autoestados correspondentes

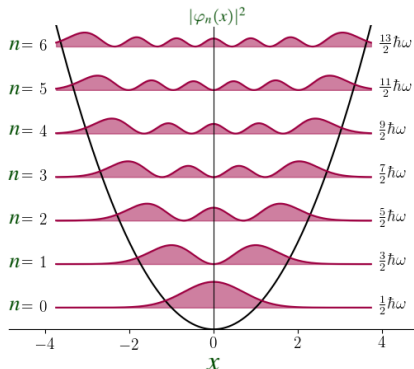
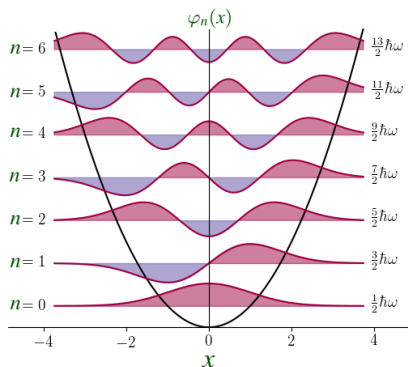
Terminámos a solução do problema de valores e vetores próprios

$$\hat{H} |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle \quad \text{onde} \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{X}^2.$$

Espectro de energias e autoestados correspondentes

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad \varphi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2} h_n\left(x\sqrt{m\omega/\hbar}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

(estas funções são o produto de Gaussianas com um polinómio de ordem n em x)



Elementos de matriz entre autoestados de energia

Elementos de matriz entre autoestados $|\varphi_n\rangle$ são simples de calcular usando os operadores

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{X} + i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}} \hat{P}, \quad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{X} - i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}} \hat{P}.$$

Basta invertamos estas relações para obter

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger), \quad \hat{P} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (a^\dagger - a),$$

e substituir no elemento de matriz a calcular. Por exemplo,

$$\langle \varphi_{n'} | \hat{X} | \varphi_n \rangle = \langle \varphi_{n'} | \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger) | \varphi_n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[\langle \varphi_{n'} | a | \varphi_n \rangle + \langle \varphi_{n'} | a^\dagger | \varphi_n \rangle \right],$$

requer apenas calcular

$$\langle \varphi_{n'} | a | \varphi_n \rangle = \langle \varphi_{n'} | \left(\sqrt{n} | \varphi_n \rangle \right) = \sqrt{n} \langle \varphi_{n'} | \varphi_{n-1} \rangle = \sqrt{n} \delta_{n', n-1},$$

e

$$\langle \varphi_{n'} | a^\dagger | \varphi_n \rangle = \sqrt{n+1} \langle \varphi_{n'} | \varphi_{n+1} \rangle = \sqrt{n+1} \delta_{n', n+1}.$$

Elementos de matriz entre autoestados de energia

$$\langle \varphi_{n'} | \hat{X} | \varphi_n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[\sqrt{n} \delta_{n', n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{n', n+1} \right]$$

$$\langle \varphi_{n'} | \hat{P} | \varphi_n \rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \left[\sqrt{n+1} \delta_{n', n+1} - \sqrt{n} \delta_{n', n-1} \right]$$

Aplicação: Quais são as incertezas δX e δP em cada um dos estados estacionários?

$$\delta X_n^2 = \langle \varphi_n | \hat{X}^2 | \varphi_n \rangle - \langle \varphi_n | \hat{X} | \varphi_n \rangle^2, \quad \delta P_n^2 = \langle \varphi_n | \hat{P}^2 | \varphi_n \rangle - \langle \varphi_n | \hat{P} | \varphi_n \rangle^2.$$

Usando o resultado anterior,

$$\langle \varphi_n | \hat{X} | \varphi_n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[\sqrt{n} \delta_{n,n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{n,n+1} \right] = 0 = \langle \varphi_n | \hat{P} | \varphi_n \rangle.$$

Para o cálculo de \hat{X}^2 , expandimos:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_n | \hat{X}^2 | \varphi_n \rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \varphi_n | (a + a^\dagger)(a + a^\dagger) | \varphi_n \rangle = \langle \varphi_n | aa + a^\dagger a^\dagger + aa^\dagger + a^\dagger a | \varphi_n \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \varphi_n | (aa^\dagger + a^\dagger a) | \varphi_n \rangle \stackrel{[a, a^\dagger]=1}{=} \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \varphi_n | (2a^\dagger a + \mathbf{1}) | \varphi_n \rangle \\ &= \frac{\hbar}{m\omega} \langle \varphi_n | \hat{N} | \varphi_n \rangle + \frac{\hbar}{2m\omega} = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right) \end{aligned}$$

Portanto,

$$\langle \varphi_n | \hat{X}^2 | \varphi_n \rangle = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Procedendo analogamente, podemos obter

$$\langle \varphi_n | \hat{P}^2 | \varphi_n \rangle = \hbar m\omega \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Daqui resulta

$$\delta X_n^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad \delta P_n^2 = \hbar m\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \longrightarrow \quad \delta X_n \delta P_n = \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Em particular, no estado fundamental:

$$\delta X_0 \delta P_0 = \frac{\hbar}{2}. \quad (\text{mínimo permitido pela relação de Heisenberg})$$

Note-se que estes resultados foram obtidos de forma algébrica simples!

Ou seja, evitámos calcular integrais explicitamente, como por exemplo,

$$\begin{aligned} \langle \varphi_n | \hat{P}^2 | \varphi_n \rangle &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} \frac{1}{2^n n!} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \\ &\quad e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2} h_n(\sqrt{m\omega/\hbar} x) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 \left[e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2} h_n(\sqrt{m\omega/\hbar} x) \right] \end{aligned}$$

A grande utilidade dos operadores a e a^\dagger é contornar o cálculo de integrais explícitos!

Aplicação: Como varia $\langle \hat{X} \rangle = \langle \psi(t) | \hat{X} | \psi(t) \rangle$ no tempo?

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |\varphi_n\rangle, \quad \text{onde } c_n = \langle \varphi_n | \psi(0) \rangle.$$

A dependência temporal de $|\psi\rangle$ é

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-iE_n t/\hbar} c_n |\varphi_n\rangle \xrightarrow{E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})} |\psi(t)\rangle = e^{-i\omega t/2} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-in\omega t} c_n |\varphi_n\rangle.$$

Recordando que $\hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger)$, então $\langle \hat{X} \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\langle a \rangle + \langle a^\dagger \rangle)$. Mas

$$\begin{aligned} \langle \psi(t) | a | \psi(t) \rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} e^{-i(n-m)\omega t} c_n c_m^* \langle \varphi_m | a | \varphi_n \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} e^{-i(n-m)\omega t} c_n c_m^* \sqrt{n} \delta_{m,n-1} \\ &= e^{-i\omega t} \sum_{n=0}^{\infty} c_n c_{n-1}^* \sqrt{n} \equiv e^{-i\omega t} S \end{aligned}$$

Logo,

$$\begin{aligned} \langle \psi(t) | \hat{X} | \psi(t) \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [e^{-i\omega t} S + e^{i\omega t} S^*] = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re} [e^{-i\omega t} S] \\ &= \underbrace{\left(\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re} S \right)}_A \cos(\omega t) + \underbrace{\left(\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Im} S \right)}_B \sin(\omega t) \\ &= A \cos(\omega t) + B \sin(\omega t) \quad (\text{comportamento familiar?}) \end{aligned}$$

- O Hamiltoniano pode ser re-escrito como

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{X}^2 = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) \quad \longrightarrow \quad E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (n = 0, 1, 2, \dots).$$

- O operador de “destruição” é definido como

$$a \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{X} + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} \hat{P}, \quad [a, a^\dagger] = 1.$$

- Ação destes operadores nos autoestados de energia:

$$a|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}|\varphi_{n-1}\rangle, \quad a^\dagger|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle, \quad a|\varphi_0\rangle = 0, \quad |\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}a^\dagger|\varphi_0\rangle.$$

- Função de onda do estado fundamental, normalizada:

$$a|\varphi_0\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \varphi_0(x) = \left(\frac{\omega m}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2}.$$

- Construção das restantes funções de onda:

$$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}a^\dagger|\varphi_0\rangle \quad \Rightarrow \quad \varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right]^n \varphi_0(x).$$

- Elementos de matriz nesta base $\{|\varphi_n\rangle\}$ obtêm-se de forma simples se exprimirmos \hat{X} e \hat{P} em termos de a e a^\dagger .