Aula 27 (29/Mar)

No aula de hoje:

* Revisão da aula anterior.
* Espectro de energias do OHQ em 1D.
* Auto-estados do OHQ 1D.
* Valores médios e desvio padrão de $\hat{X}$ e $\hat{P}$.

—————— // ——————

Revisão da última aula

* Revisão oscilador harmônico clássico.
* Oscilador harmônico quântico em 1D.
* Operadores de criação e de destruição.

—————— // ——————

Capítulo 7: Exemplos de Quantificação Canônica

7.1 Oscilador Harmônico Quântico em 1D

Na última aula demonstramos várias propriedades da base de auto-estados do operador número, $\hat{N} = \hat{a}^+ \hat{a}$:

<u>Lema 1</u>: Os auto-vals. de $\hat{N}$ são positivos ou zero.

<u>Lema 2</u>: Seja $|\varphi_\nu^i\rangle$ auto-vec. de $\hat{N}$ não nulo, então

(i) se $\nu = 0$, então $\hat{a}|\varphi_\nu^i\rangle = 0$.

(ii) se $\nu > 0$, então $\hat{a}|\varphi_\nu^i\rangle$ é ket não nulo que é auto-vec. de $\hat{N}$ com auto-val. $\underline{\nu - 1}$.

<u>Lema 3</u>: Seja $|\varphi_\nu^i\rangle$ auto-vect. de $\hat{N}$ não nulo,

(i) $\hat{a}^+|\varphi_\nu^i\rangle$ é sempre não nulo.

(ii) $\hat{a}^+|\varphi_\nu^i\rangle$ é auto-vect. de $\hat{N}$ com auto-val $\underline{\nu + 1}$.

<u>Lema 4</u>: O espectro de $\hat{N}$ é composto por inteiros não negativos.

<u>Lema 5</u>: Todos os auto-estados de $\hat{N}$ são <u>não degenerados</u>.

<u>Nota</u>: Podemos simplificar notação escrevendo os auto-vecs. de $\hat{N}$ e $\hat{H}$ como

$$|\varphi_n\rangle \longrightarrow |n\rangle$$

Assim, teremos que nesta base $\{|n\rangle\}$, que é uma base ortogonal de $\mathcal{E}$, podemos escrever o Hamiltoniano

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

e as suas auto-energias como

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

ou seja, teremos auto-energias E_n

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

onde $n = 0, 1, 2, \ldots$

Podemos representá-lo graficamente como

Nota: Auto-vals igualmente espaçados.

Nota: Estado menor energia $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} > 0$, que é claramente diferente do caso clássico onde temos $E = x_M^2 \omega^2 m/2$, que se $x_M \to 0$, será $E \to 0$.

Como deveremos interpretar $\hat{a}$ e $\hat{a}^+$?

↳ O operador $\hat{a}$ destroi um quanto de energia, $\hbar\omega$, do sist. quando actua num auto-vec de $\hat{N}$, $|n\rangle$

↳ O operador $\hat{a}^+$ cria um quanto de energia, $\hbar\omega$, no sistema quando actua num auto-vec de $\hat{N}$, $|n\rangle$.

7.1.3.3) Auto-estados do OHQ em 1D

Os estados $|n\rangle$ estão normalizados?

↳ Por indução, começando por assumir que $\langle 0|0\rangle = 1$, temos

$$[\hat{a}, \hat{a}^{+}] = \hat{1}$$

$$\langle 1|1\rangle = ? = \langle 0|\hat{a}\hat{a}^{+}|0\rangle = \langle 0|\hat{N} + \hat{1}|0\rangle = \langle 0|1|0\rangle = 1$$

$$\langle 2|2\rangle = ? = \langle 1|\hat{a}\hat{a}^{+}|1\rangle = \langle 1|\hat{N} + \hat{1}|1\rangle = 2\langle 1|1\rangle = 2$$

$$\langle 3|3\rangle = ? = \langle 2|\hat{a}\hat{a}^{+}|2\rangle = \langle 2|\hat{N} + \hat{1}|2\rangle = 3\langle 2|2\rangle = 6$$

$$\vdots$$

que podemos rapidamente concluir que resulta em

$$\langle n|n\rangle = ? = \langle n-1|a a^{+}|n-1\rangle = \dots = n!$$

Vamos então introduzir novos auto-vecs de $\hat{N}$ normalizados

$$\boxed{|\phi_n\rangle \equiv \frac{|n\rangle}{\sqrt{n!}}}\ .$$

<u>Nota:</u> O conjunto $\{|\phi_n\rangle\}$ é base ortonormal de $\mathcal{E}$.

$$\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \delta_{nm}$$

$$\sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = \hat{1}$$

<u>Nota:</u> A actuação $\hat{a}$ e $\hat{a}^+$ neste conjunto $\{|\phi_n\rangle\}$ é ligeiramente diferente.

$$\hookrightarrow \hat{a}^+ |\phi_n\rangle = \hat{a}^+ \frac{|n\rangle}{\sqrt{n!}} = \frac{|n+1\rangle}{\sqrt{n!}} = \sqrt{n+1}\,\frac{|n+1\rangle}{\sqrt{(n+1)!}}$$

$$\Leftrightarrow \boxed{\hat{a}^+ |\phi_n\rangle = \sqrt{n+1}\,.\,|\phi_{n+1}\rangle}$$

$$\hookrightarrow \hat{a} |\phi_n\rangle = \hat{a} \frac{\hat{a}^+}{\sqrt{n}} |\phi_{n-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} (\hat{a}^+\hat{a} + \hat{1}) |\phi_{n-1}\rangle$$

$$= \frac{n \cancel{-1} \cancel{+1}}{\sqrt{n}} |\phi_{n-1}\rangle$$

$$\Leftrightarrow \boxed{\hat{a} |\phi_n\rangle = \sqrt{n}\, |\phi_{n-1}\rangle}$$

Nota: Nesta representação $\{|\phi_n\rangle\}$ teremos

$$\hat{a} = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & & & \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & & \\ & 0 & 0 & \sqrt{3} & \\ & & 0 & 0 & \ddots \\ & & & & \ddots \end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix} |\phi_0\rangle \\ |\phi_1\rangle \\ |\phi_2\rangle \\ \vdots \end{bmatrix}$$

$$\hat{a}^+ = \begin{bmatrix} 0 & 0 & & & \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & & \\ & \sqrt{2} & 0 & 0 & \\ & & \sqrt{3} & 0 & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots \end{bmatrix}$$

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a}^+ + \hat{a}\right) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & & & \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & & \\ & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \\ & & \sqrt{3} & 0 & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots \end{bmatrix}$$

$$\hat{P} = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} \cdot i\left(\hat{a}^+ - \hat{a}\right) = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} \begin{bmatrix} 0 & -i\sqrt{1} & & & \\ i\sqrt{1} & 0 & -i\sqrt{2} & & \\ & i\sqrt{2} & 0 & -i\sqrt{3} & \\ & & i\sqrt{3} & 0 & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots \end{bmatrix}$$

Vamos expressar os auto-estados $|\phi_n\rangle$ na representação $\{|x\rangle\}$ e obter os coeficientes

$$|\phi_n\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, |x\rangle \underbrace{\langle x|\phi_n\rangle}_{=\phi_n(x)}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_n(x)\, |x\rangle \quad ,$$

isto é, vamos determinar os $\phi_n(x)$.

Na última aula obtivemos $\phi_0(x)$, escrevendo $\hat{a}|\phi_0\rangle = 0$ na representação $\{|x\rangle\}$,

$$\langle x| \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,\hat{X} + \frac{i}{\sqrt{m\omega\hbar}}\hat{P}\right]|\phi_0\rangle = 0$$

$$\Longleftrightarrow \langle x| \cancel{\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}}\left[\hat{X} + \frac{i}{\hbar}\hat{P}\right]|\phi_0\rangle = 0$$

$$\Longleftrightarrow \left[x + \frac{\cancel{i}}{\cancel{\hbar}}\left(\cancel{-i\hbar}\frac{d}{dx}\right)\right]\phi_0(x) = 0$$

$$\Longleftrightarrow \left(x + \frac{d}{dx}\right)\phi_0(x) = 0$$

$$\Leftrightarrow \phi_0(x) = C_0 \cdot e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} ,$$

onde podemos mostrar que $C_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$, impondo a normalização de $\phi_0(x)$.

Podemos obter $\phi_n(x)$ recursivamente, aplicando $\underline{\hat{a}^+}$ a $\phi_0(x)$,

$$\hat{a}^+ |\phi_{n-1}\rangle = \sqrt{n}\, |\phi_n\rangle$$

$$\Leftrightarrow |\phi_n\rangle = \frac{\hat{a}^+}{\sqrt{n}} |\phi_{n-1}\rangle$$

que podemos escrever

$$|\phi_n\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}} |\phi_0\rangle ,$$

que na representação das posições, $\{|x\rangle\}$ fica

$$\langle x|\phi_n\rangle = \langle x| \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}} |\phi_0\rangle$$

$$\frac{i}{\sqrt{m\omega\hbar}}\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right) = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{d}{dx}$$

$$\Leftrightarrow \phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\frac{1}{\sqrt{2^n}} \cdot \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{m\omega\hbar}}\hat{P}\right]^n \cdot \phi_0(x)$$

$$\Longleftrightarrow \phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sqrt{\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^n} \left[\frac{m\omega}{\hbar} x - \frac{d}{dx}\right]^n \underbrace{\phi_0(x)}_{= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \cdot e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}}$$

Podemos então obter, por ex., $\phi_1(x)$ e $\phi_2(x)$,

$$\hookrightarrow \phi_1(x) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \cdot \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \cdot \left(\frac{m\omega}{\hbar} x - \frac{d}{dx}\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

$$= \underbrace{\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}}_{\equiv C_0} \cdot \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \cdot \underbrace{x}_{\to \text{ polinómio grau } 1} \cdot e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

$$\hookrightarrow \phi_2(x) = \sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2} \cdot C_0 \cdot \underbrace{\left(\frac{m\omega}{\hbar} x - \frac{d}{dx}\right)^2}_{\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 x^2 - \frac{m\omega}{\hbar}\left(x\frac{d}{dx} + 1 + x\frac{d}{dx}\right) + \frac{d^2}{dx^2}} \cdot e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

$$= \cdots = \frac{C_0}{\sqrt{2}} \underbrace{\left(\frac{2m\omega}{\hbar} x^2 - 1\right)}_{\hookrightarrow \text{ polinómio grau } 2} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

Podemos escrever relação recorrência entre n's sucessivos como

$$\phi_{n+1}(x) = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \cdot \left(\frac{m\omega}{\hbar} x - \frac{d}{dx}\right) \phi_n(x)$$

que podemos simplificar definindo $\chi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \cdot x$,

$$\phi_{n+1}(x) = \frac{1}{\sqrt{2(n+1)}} \cdot \left(x - \frac{d}{dx}\right) \cdot \phi_n(x)$$

Se escrevermos $\phi_n(x)$ como

$$\phi_n(x) = C_n \cdot H_n(x) \cdot e^{-x^2/2},$$

onde C_n é constante, H_n é polinômio de grau n (que têm paridade bem definida, dada por $(-1)^n$, tal que: $\underline{n}$ par $\Rightarrow$ polinômio par; se $\underline{n}$ ímpar $\Rightarrow$ polin ímpar).

Usando duas últimas eqs podemos escrever

$$C_{n+1} \cdot H_{n+1}(x) \cdot e^{-x^2/2} = \frac{1}{\sqrt{2(n+1)}} \left(x - \frac{d}{dx}\right) \cdot \left(C_n \cdot H_n(x)\, e^{-x^2/2}\right)$$

de onde podemos concluir que

$$C_{n+1} = \frac{C_n}{\sqrt{2(n+1)}}$$

$$H_{n+1}(x) = 2x \cdot H_n(x) - \frac{d}{dx} H_n(x)$$

Esta última fórmula define os polinô

mios de Hermite,

$$H_0 = 1$$

$$H_1 = 2\chi$$

$$H_2 = 4\chi^2 - 2$$

$$H_3 = 8\chi^3 - 12\chi$$

$$\vdots$$

Em resumo teremos então

Estado Normalizado	Componentes na representação $\|x\rangle$	Paridade	Energia
$\|\Phi_0\rangle = \|0\rangle$	$\Phi_0(\chi) = C_0 e^{-\chi^2/2}$	Par	$\hbar\omega/2$
$\|\Phi_1\rangle = \|1\rangle$	$\Phi_1(\chi) = C_1(2\chi) e^{-\chi^2/2}$	Ímpar	$3\hbar\omega/2$
$\|\Phi_2\rangle = \|2\rangle/\sqrt{2}$	$\Phi_2(\chi) = C_2(4\chi^2 - 2) e^{-\chi^2/2}$	Par	$5\hbar\omega/2$
$\|\Phi_3\rangle = \|3\rangle/\sqrt{3!}$	$\Phi_3(\chi) = C_3(8\chi^3 - 12\chi) e^{-\chi^2/2}$	Ímpar	$7\hbar\omega/2$
$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$

$$\chi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \cdot x$$

Podemos representar graficamente es-
tas funções de onda

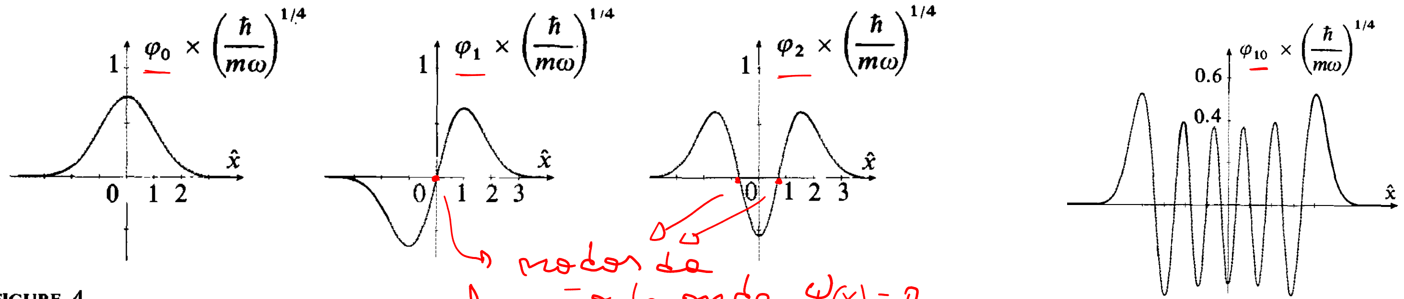


FIGURE 4

Wave functions associated with the first three levels of a harmonic oscillator.

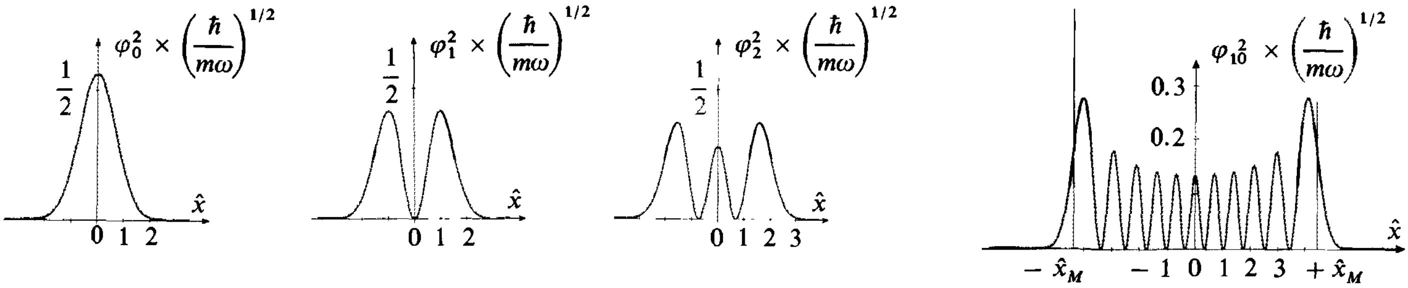
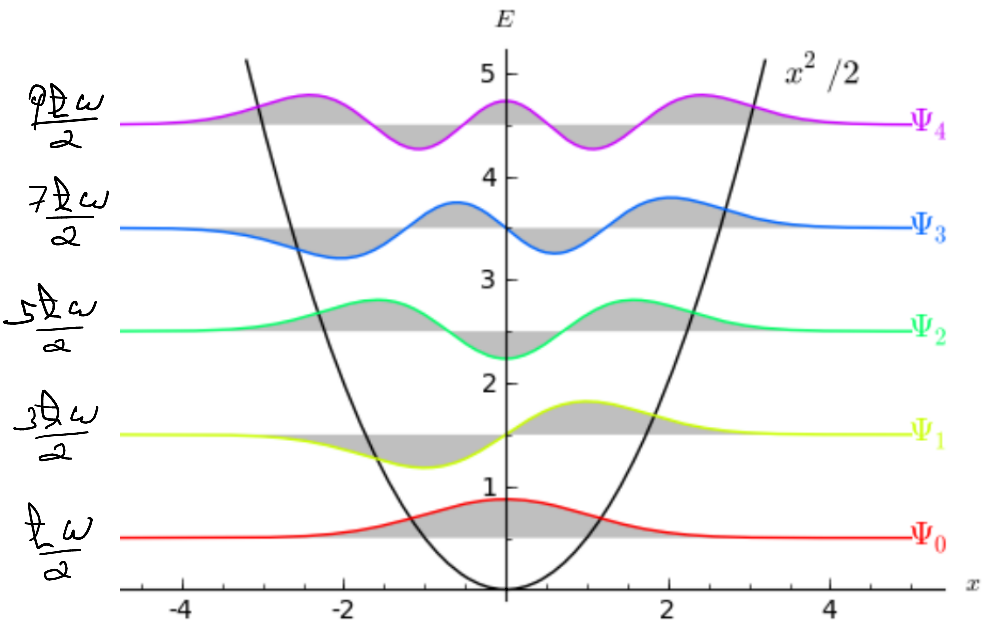


FIGURE 5

Probability densities associated with the first three levels of a harmonic oscillator.



Nota: Auto-energia aumenta aumenta com n, pois $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$. Com o aumento de n a região em que a f.o. é não-nula também aumenta.

↳ Isto é consistente com a mec. Clássica, para a qual vimos que $E = x_M^2 \cdot \frac{m}{2}\omega^2$, o que implica que se E aumenta, a amplitude x_M aumenta que é a máxima distância que a partícula pode ter da origem.

<u>Nota:</u> Quando $\underline{n}$ aumenta, aumenta número nodos na f.o, i.e, os x onde $\psi(x) = 0$. Isso traduz o aumento da energia cinética,

$$\langle E_c \rangle = \frac{1}{2m}\langle \hat{P}^2 \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_n^*(x)\,\frac{d^2}{dx^2}\,\phi_n(x)\,.dx$$

pois mais pontos com $\psi(x) = 0$, resulta no aumento da curvatura da f.o., logo aumenta $\langle E_c \rangle$.

↳ Isto também é consistente com a M. Clássica pois maior energia do sistema implica maior velocidade média ($E \propto x_M$ e $v \propto x_M$) logo maior Ecin média.

Nota: F.O. têm maior amplitude nos máximos exteriores. Isto é manifestação do facto de em média a partícula passar mais tempo nos extremos da trajectória, pelo facto de ali a sua velocidade média ser $v \simeq 0$, já que esta reverte o seu movimento.

7.1.4) Valor médio e desvio padrão de $\hat{X}$ e $\hat{P}$

Como vimos anteriormente

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

$$\hat{P} = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\left(\hat{a}^+ - \hat{a}\right)$$

que nos permite escrever elementos de matriz na repres. $\{|\phi_n\rangle\}$, como

$$\langle\phi_{n'}|\hat{X}|\phi_n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n+1}\cdot\delta_{n',n+1} + \sqrt{n}\cdot\delta_{n',n-1}\right)$$

$$\langle\phi_{n'}|\hat{P}|\phi_n\rangle = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\left(\sqrt{n+1}\cdot\delta_{n',n+1} - \sqrt{n}\cdot\delta_{n',n-1}\right)$$

Isto torna óbvio que para auto-estado $|\phi_n\rangle$ o valor esperado de $\hat{x}$ e $\hat{P}$ é

$$\langle \hat{x} \rangle = \langle \phi_n | \hat{x} | \phi_n \rangle = 0$$

$$\langle \hat{P} \rangle = \langle \phi_n | \hat{P} | \phi_n \rangle = 0$$

para $\forall n \in \mathbb{N}_0$.

Já o desvio padrão de $\hat{x}$ é dado por

$$(\Delta x)^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \phi_n | \underbrace{(\hat{a}^+ + \hat{a})^2}_{(\hat{a}^+)^2 + \hat{a}^+\hat{a} + \underbrace{\hat{a}\hat{a}^+}_{= \hat{a}^+\hat{a} + \hat{1}} + \hat{a}^2} | \phi_n \rangle$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \phi_n | (\hat{a}^+)^2 + 2\hat{a}^+\hat{a} + \hat{1} + \hat{a}^2 | \phi_n \rangle$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega} (2n + 1) = \frac{\hbar}{m\omega} (n + 1/2)$$

sendo o desvio padrão para $\hat{P}$ dado por

$$(\Delta p)^2 = \langle \hat{P}^2 \rangle - \langle \hat{P} \rangle^2 = \langle \hat{P}^2 \rangle$$

$$= -\frac{m\omega\hbar}{2} \langle \phi_n | (\hat{a}^+ - \hat{a}) | \phi_n \rangle$$

$$= -\frac{m\omega\hbar}{2} \langle \phi_n | \left((\hat{a}^+)^2 - 2\hat{a}^+\hat{a} - \hat{1} + \hat{a}^2 | \phi_n \right\rangle$$

$$= m\omega\hbar \, (n + 1/2)$$

Multiplicando os dois desvios padrão, Δx e Δp, obteremos relação incerteza de Heisenberg?

$$\Delta x . \Delta p = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}(n + 1/2)} . \sqrt{m\omega\hbar(n + 1/2)}$$

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

pois $n = 0, 1, 2, \ldots$, que obedece P. Incerteza.

Nota: O limite inferior ocorre para $n = 0$, o estado fundamental.

<u>Nota</u>: Ao contrário de M Clássica temos

$$\langle E_p \rangle = \langle \phi_0 | V(x) | \phi_0 \rangle = \frac{1}{2} m\omega^2 \langle \phi_0 | x^2 | \phi_0 \rangle$$

$$= \frac{m\omega^2}{2} \frac{\hbar}{m\omega} \frac{1}{2} = \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{E_0}{2}$$

$$\langle E_c \rangle = \langle \phi_0 | \frac{P^2}{2m} | \phi_0 \rangle = \frac{1}{2m} \cdot m\omega\hbar \frac{1}{2} = \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{E_0}{2}.$$

ou seja

$$\langle E_p \rangle \overset{\text{T. Virial}}{=} \langle E_c \rangle = E_0/2$$

que traduz o facto de no estado fundamental a partícula quântica (do OHQ em 1D) ter "algum movimento".

<u>Como é evolução dos valores médios?</u>

Se estivermos num estado estacionário sabemos que valores médios serão constantes do movimento.

Mas e se tivermos sobreposição de estados estacionários?