$$\boxed{\text{Aula 28 (30/Mar)}}$$

No aula de hoje:

* Revisão da aula anterior.
* Evolução temporal dos valores médios.
* Oscilador Harmónico Clássico 2D.
* Oscilador Harmónico Quântico 2D.

—— // ——

Revisão da última aula

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

—— // ——

Capítulo 7: Exemplos de Quantificação Canónica

7.1 Oscilador Harmónico Quântico em 1D

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

Como é evolução dos valores médios?

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

Mas e se tivermos sobreposição de estados estacionários?

Esperamos que T. Ehrenfest seja obedecido, e estes valores esperados evoluem segundo eqs clássicas.

Consideremos sobreposição de $|\phi_n\rangle$ em $t=0$

$$|\psi(t=0)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \underbrace{c_n(t=0)}_{c_n^0} |\phi_n\rangle$$

que é "análogo" do pacote de ondas.

No instante t teremos

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n^0 \cdot e^{-iE_n t/\hbar} |\phi_n\rangle$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} c_n^0 \cdot e^{-i\omega(n+1/2).t} |\phi_n\rangle$$

Assim, o valor esperado $\langle x\rangle(t) = \langle \psi(t)|\,\hat{x}\,|\psi(t)\rangle$ num instante $\underline{t}$ será

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(\hat{a}^{+} + \hat{a})$$

$$\langle\hat{x}\rangle(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sum_{n,m=0}^{\infty} c_m^{0*} \cdot c_n^0 \langle\phi_m| e^{i\omega(m-n)t} \cdot \left(\sqrt{n+1}\,|\phi_{n+1}\rangle + \right.$$
$$\left. + \sqrt{n}\,|\phi_{n-1}\rangle\right)$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \cdot \sum_{n,m=0}^{\infty} c_m^{0*} c_n^0 \cdot e^{i\omega(m-n)t} \left(\sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1} + \right.$$
$$\left. + \sqrt{n} \cdot \delta_{m,n-1}\right)$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \left(c_{n+1}^{0*} c_n^0 \cdot e^{i\omega t} \cdot \sqrt{n+1} + \sqrt{n} \cdot c_{n-1}^{0*} c_n^0\, e^{-i\omega t}\right)$$

que se definirmos

$$z \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{n+1} \cdot c_{n+1}^{0*} \cdot c_n$$

e notarmos que

$$z^* = \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{n+1} \cdot c_{n+1}^0 \cdot c_n^{0*} \overset{m=n+1}{=} \sum_{m=1}^{\infty} \sqrt{m}\, c_m^0 \cdot c_{m-1}^{0*}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{n}\, c_n^0\, c_{n-1}^{0*}$$

que é igual ao segundo termo em cima.

Assim $\langle \hat{X} \rangle(t)$ ficará

$$\langle \hat{X} \rangle(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \cdot \left(Z \cdot e^{i\omega t} + Z^* \cdot e^{-i\omega t} \right)$$

$$Z = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\, A \cdot e^{i\varphi_0} \qquad = A \cdot \frac{e^{i(\omega t + \varphi_0)} + e^{-i(\omega t + \varphi_0)}}{2}.$$

$$\Leftrightarrow \langle \hat{X} \rangle(t) = A \cdot \cos(\omega t + \varphi_0)$$

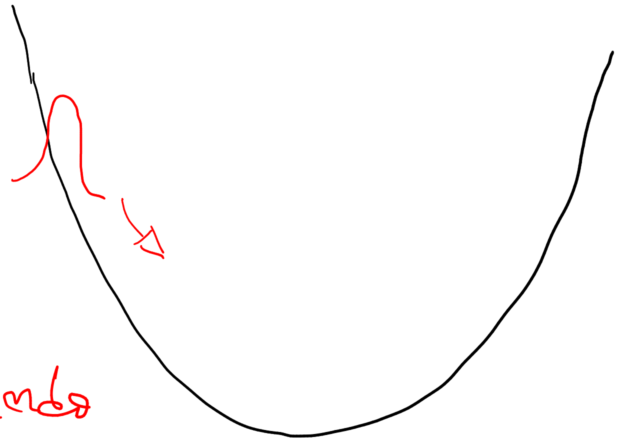
que é a expressão clássica que tínhamos obtido no início do capítulo.

De forma semelhante podemos mostrar que

$$\langle \hat{P} \rangle(t) = B \cdot \operatorname{sen}(\omega t + \varphi_0)$$

tal como no caso clássico.

Podemos visualizar



"pacote de ondas" vindo da sobreposição de $|\phi_n\rangle$

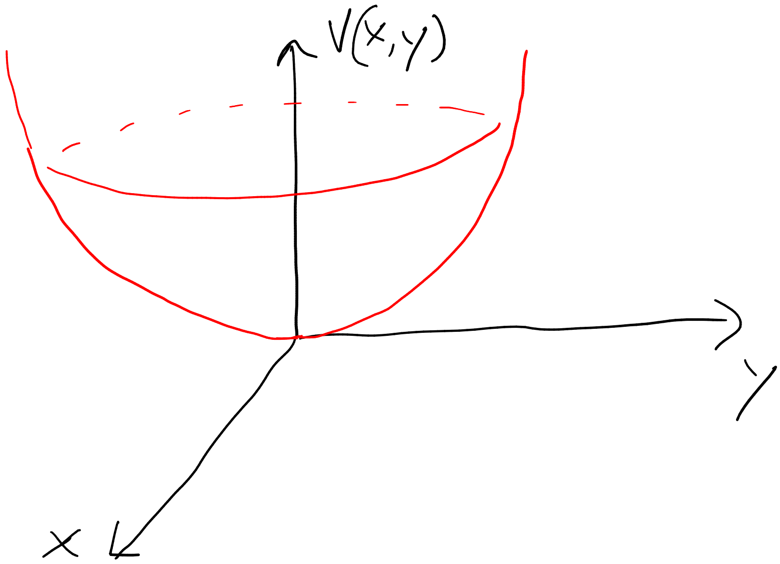
7.2) Oscilador Harmônico Quântico 2D

Este problema permitir-nos-à começar a explorar a importância da simetria no estudo de sistemas quânticos, tema do capítulo 8.

7.2.1) Oscilador Harmônico Clássico 2D

Considere partícula de massa μ num potencial

$$V(x,y) = \frac{\mu\omega^2}{2}(x^2+y^2)$$



O Hamiltoniano clássico será

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 (x^2 + y^2).$$

As eqs de Hamilton

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad e \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

dão-nos eqs do movimento $(i = x, y)$

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = \dfrac{p_x(t)}{\mu} \\ \dot{p}_x(t) = -\mu\omega^2 x(t) \end{cases} \qquad \begin{cases} \dot{y}(t) = \dfrac{p_y(t)}{\mu} \\ \dot{p}_y(t) = -\mu\omega^2 y(t) \end{cases}$$

que podemos desacoplar diferenciar

do mais uma lei em relação ao tempo

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2} = -\omega^2 . x(t) \Longrightarrow x(t) = x_M . \cos(\omega t + \varphi_x^0)$$

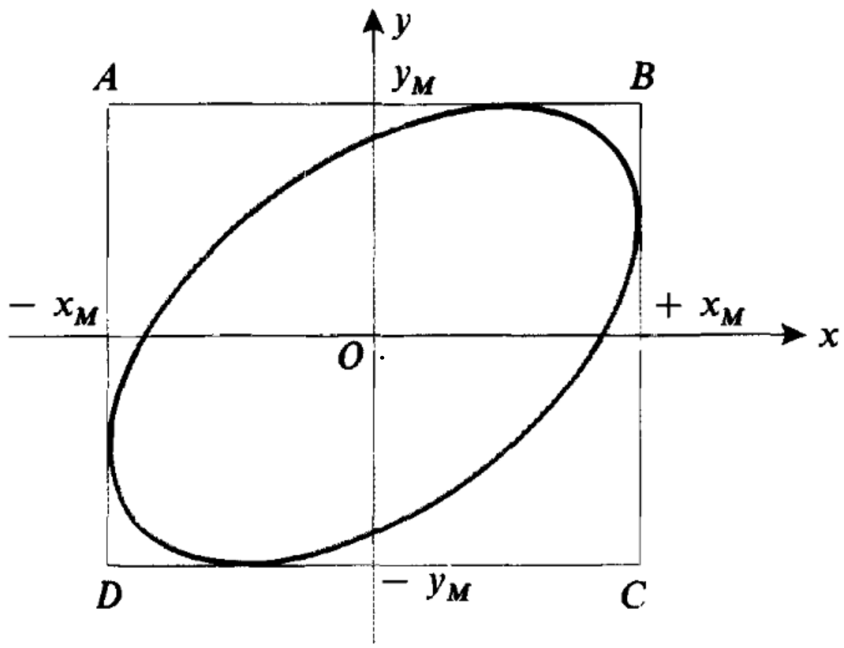
$$\Longrightarrow p_x(t) = -\mu\omega x_M \operatorname{sen}(\omega t + \varphi_x^0)$$

$$\frac{d^2y(t)}{dt^2} = -\omega^2 . y(t) \Longrightarrow y(t) = y_M . \cos(\omega t + \varphi_y^0)$$

$$p_y(t) = -\mu\omega x_M . \operatorname{sen}(\omega t + \varphi_y^0)$$

onde $x_M, \varphi_x^0, y_M, \varphi_y^0$ são determinados pelas condições iniciais.

No plano xOy esta partícula descreverá então órbitas em geral elípticas, que vão ser determinadas pelas constantes x_M, y_M, φ_x^0 e φ_y^0.



Em geral teremos as seguintes possibilidades para o movimento.

$\phi_y - \phi_x = -\pi$	movimento linear na direcção $x = -y$
$0 > \phi_y - \phi_x > -\pi$	movimento retrógrado na elipse
$\phi_y - \phi_x = 0$	movimento linear na direcção $x = y$
$\pi > \phi_y - \phi_x > 0$	movimento directo na elipse
$\phi_y - \phi_x = +\pi$	movimento linear na direcção $x = -y$

Nota: Algumas constantes do movimento são

* Energia total, $E = \frac{\mu\omega^2}{2}(x_M^2 + y_M^2)$
* Energia E_x, $E_x = \frac{\mu\omega^2}{2} x_M^2$
* Energia E_y, $E_y = \frac{\mu\omega^2}{2} y_M^2$
* Componente z do momento angular orbital.

$$\mathcal{L}_z = x p_y - y \cdot p_x$$

$$= x_M \cos(\omega t + \varphi_x^0) \cdot \left[-\mu\omega\, y_M \operatorname{sen}(\omega t + \varphi_y^0)\right]$$

$$- y_M \cos(\omega t + \varphi_y^0)\left[-\mu\omega\, x_M \operatorname{sen}(\omega t + \varphi_x^0)\right]$$

$$= -\mu\omega x_M y_M \cos(\omega t + \varphi_x^0)\,\text{sen}(\omega t + \varphi_y^0) +$$

$$+ \mu\omega x_M y_M \cos(\underbrace{\omega t + \varphi_y^0}_{\beta})\,\text{sen}(\underbrace{\omega t + \varphi_x^0}_{\alpha})$$

$\text{sen}(\alpha \pm \beta)$
$= \text{sen}\,\alpha \cos\beta$
$\pm \cos\alpha\,\text{sen}\,\beta$

$$= \mu\omega x_M y_M\,\text{sen}(\cancel{\omega t} + \varphi_x^0 - \cancel{\omega t} - \varphi_y^0)$$

$$\Leftrightarrow \mathcal{L}_z = \mu\omega x_M y_M\,\text{sen}(\varphi_x^0 - \varphi_y^0)$$

↳ são tudo constantes

$\Rightarrow \mathcal{L}_z$ constt do movimento.

7.2.2) Oscilador Harmónico Quântico em 2D usando quantões lineares

Comecemos por quantizar o hamiltoniano clássico,

$$H \longrightarrow \hat{H} = \frac{\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2}{2\mu} + \frac{\mu\omega^2}{2}(\hat{X}^2 + \hat{Y}^2)$$

onde $\hat{X}$ e $\hat{Y}$ são observáveis associadas às quantidades físicas x, e y, sendo $\hat{P}_x$ e $\hat{P}_y$ os seus momentos canónicos conjugados.

As relações comutação são

$$[\hat{X}_i, \hat{P}_j] = i\hbar \delta_{ij} \hat{\mathbb{1}}$$

onde $\hat{X}_i = (\hat{X}, \hat{Y})$ e $\hat{P}_j = (\hat{P}_x, \hat{P}_y)$.

Podemos notar que

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y$$

ou seja, temos duas cópias do OHQ em 1D, visto (7.1).

Podemos definir op. criação e destruição na direcção x e y

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

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

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

$$\hat{a}_y^{+} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,\hat{Y} - \frac{i}{\sqrt{m\omega\hbar}}\,\hat{P}_y\right)$$

Podemos verificar que

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

$$[\hat{a}_x, \hat{a}_y] = [\hat{a}_x, \hat{a}_y^{+}] = \ldots = 0 \quad ,$$

e definir os operadores número

$$\hat{N}_x = \hat{a}_x^{+}\hat{a}_x$$

$$\hat{N}_y = \hat{a}_y^{+}\hat{a}_y$$

de tal modo que o hamiltoniano pode ser escrito como

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{N}_x + \hat{N}_y + \hat{1}\right).$$

É claro que podemos escolher C.C.O.C. = $\{\hat{N}_x, \hat{N}_y\}$ e usar base de estados dada pelo produto tensorial $\{|\phi_{n_x}\rangle \otimes |\phi_{n_y}\rangle\}$,

$$\hat{H}_x |\phi_{n_x} \phi_{n_y}\rangle = E_{n_x} |\phi_{n_x} \phi_{n_y}\rangle$$

$$\hat{H}_y |\phi_{n_x} \phi_{n_y}\rangle = E_{n_y} |\phi_{n_x} \phi_{n_y}\rangle$$

onde $|\phi_{n_x} \phi_{n_y}\rangle = |\phi_{n_x}\rangle \otimes |\phi_{n_y}\rangle$ sendo

$$E_{n_x} = \hbar\omega\left(n_x + \frac{1}{2}\right),$$

$$E_{n_y} = \hbar\omega\left(n_y + \frac{1}{2}\right).$$

Assim, as auto-energias de $\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y$ serão

$$\boxed{E_{(n_x, n_y)} = \hbar\omega\left(n_x + n_y + 1\right)}$$

sendo que os auto-estados correspondentes serão dados por

$$|\phi_{n_x}\phi_{n_y}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_x!\,n_y!}}\left(\hat{a}_x^+\right)^{n_x}\cdot\left(\hat{a}_y^+\right)^{n_y}|\phi_0\phi_0\rangle$$

Nota: Agora o espectro de $\hat{H}$ será degenerado.

$$E_{(0,0)} = \hbar\omega \longrightarrow \text{não-deg.}$$

$$E_{(1,0)} = E_{(0,1)} = 2\hbar\omega \longrightarrow \text{deg. } 2.$$

$$E_{(2,0)} = E_{(0,2)} = E_{(1,1)} = 3\hbar \longrightarrow \text{deg } 3.$$

$$\vdots$$

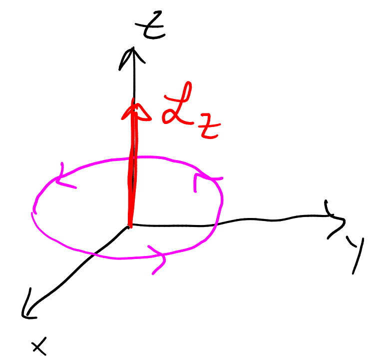
Nota: O conjunto $\{\hat{H}\}$ não é CCOC, pois temos degenerescência em energia. Mas $\{\hat{H}, \hat{H}_x\}$ ou $\{\hat{H}, \hat{H}_y\}$ são CCOC, assim com $\{\hat{N}_x, \hat{N}_y\}$.

7.2.3) Oscilador Harmônico Quântico em 2D usando quantões circulares

Como o potencial é invariante por rotações em torno do eixo Oz,

$$R_{O_z}(\theta) \cdot V(\vec{r}) = V(\vec{r})$$

e como vimos na versão clássica deste problema que a componente z do momento angular é constante do movimento ($\mathcal{L}_z$ está associado às rotações em torno do eixo Oz).



Vamos então olhar para o operador de momento angular orbital ao longo de $\vec{e}_z$:

$$\hat{L}_z = \hat{X}\hat{P}_y - \hat{Y}\hat{P}_x ,$$

que podemos escrever em termos de op. criação e destruição

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

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

então $\hat{L}_z$ ficará

$$\hat{L}_z = i\frac{\hbar}{2}\left[(a_x^{+}+a_x)(a_y^{+}-a_y) - (a_y^{+}+a_y)(a_x^{+}-a_x)\right]$$

$$= i\frac{\hbar}{2}\left[\cancel{a_x^{+}a_y^{+}} - a_x^{+}a_y + a_x a_y^{+} - \cancel{a_x a_y} - \cancel{a_y^{+}a_x^{+}} + a_y^{+}a_x - a_y a_x^{+} + \cancel{a_y a_x}\right].$$

$$\Rightarrow \hat{L}_z = i\hbar\left[\hat{a}_x\hat{a}_y^{+} - \hat{a}_x^{+}\hat{a}_y\right].$$

Podemos então mostrar que $[\hat{H},\hat{L}_z]=0$ e assim $\{H, L_z\}$ formam CCOC.

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] = \hbar\omega i\hbar \left[\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + \hat{a}_y^\dagger \hat{a}_y + \hat{1}, \hat{a}_x \hat{a}_y^\dagger - \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y\right]$$

$$= i\hbar^2\omega \left([a_x^\dagger a_x, a_x a_y^\dagger - a_x^\dagger a_y] + [a_y^\dagger a_y, a_x a_y^\dagger - a_x^\dagger a_y] \right)$$

$$[a_x^\dagger a_x, a_x a_y^\dagger - a_x^\dagger a_y] = [a_x^\dagger a_x, a_x a_y^\dagger] - [a_x^\dagger a_x, a_x^\dagger a_y]$$

$$= (a_x^\dagger a_x a_x - a_x a_x^\dagger a_x) a_y^\dagger - (a_x^\dagger a_x a_x^\dagger - a_x^\dagger a_x^\dagger a_x) a_y$$

$$= \underbrace{[a_x^\dagger, a_x]}_{=-1} a_x a_y^\dagger - a_x^\dagger \underbrace{[a_x, a_x^\dagger]}_{=1} a_y$$

$$= -\hat{a}_x \hat{a}_y^\dagger - \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y$$

$$[a_y^\dagger a_y, a_x a_y^\dagger - a_x^\dagger a_y] = \cdots = a_y^\dagger a_x + a_y a_x^\dagger$$

Teremos então

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] = i\hbar^2\omega \left(-\cancel{a_x a_y^\dagger} - \cancel{a_x^\dagger a_y} + \cancel{a_y^\dagger a_x} + \cancel{a_y a_x^\dagger} \right)$$

$$= 0 \quad \blacksquare$$

Vamos então trabalhar com o CCOC $\{\hat{H}, \hat{L}_z\}$. Vamos introduzir novos operadores de criação e destruição de "quantões circulares":

$$\hat{a}_d \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{a}_x - i\hat{a}_y\right)$$

$$\hat{a}_d^{+} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{a}_x^{+} + i\hat{a}_y^{+}\right)$$

$$\hat{a}_e \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{a}_x + i\hat{a}_y\right)$$

$$\hat{a}_e^{+} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{a}_x^{+} - i\hat{a}_y^{+}\right)$$

Podemos facilmente mostrar relações comutação são

$$\left[\hat{a}_d, \hat{a}_d^{+}\right] = \hat{\mathbb{1}} = \left[\hat{a}_e, \hat{a}_e^{+}\right],$$

sendo todos os outros comutadores zero.

Notando que os operadores número $\hat{N}_d$ e $\hat{N}_e$ têm forma

$$\hat{N}_d \equiv \hat{a}_d^{+}\hat{a}_d = \frac{1}{2}\left(a_x^{+}a_x + a_y^{+}a_y - i a_x^{+}a_y + i a_y^{+}a_x\right)$$

$$\hat{N}_e \equiv \hat{a}_e^{+}\hat{a}_e = \frac{1}{2}\left(a_x^{+}a_x + a_y^{+}a_y + i a_x^{+}a_y - i a_y^{+}a_x\right)$$

podemos então escrever

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

$$\hat{L}_z = \hbar\left(\hat{N}_d - \hat{N}_e\right)$$

Como $[\hat{N}_d, \hat{N}_e] = 0$ eles também formam CCOC, e assim podemos rotular a nossa base como $\{|n_e, n_d\rangle\}$.

Em tal caso podemos escrever os espectros $\hat{H}$ e $\hat{L}_z$ como

$$E_{(n_e,n_d)} = \hbar\omega\left(n_e + n_d + 1\right) \equiv \hbar\omega(n+1)$$

$$l_{z\,(n_e,n_d)} = \hbar\left(n_d - n_e\right) \equiv \hbar m$$

onde introduzimos dois novos números quânticos

$$n \equiv n_d + n_e ,$$

$$m \equiv n_d - n_e ,$$

identificando, respectivamente, os auto-estados do $\hat{H}$ e do $\hat{L}_z$.

Interpretação de $\hat{a}_e^+$ e $\hat{a}_d^+$:

Assim, o operador $\hat{a}_d^+$ (ou $\hat{a}_e^+$) adiciona ao sistema um quantão de energia, $\hbar\omega$, bem como adiciona um quantão de momento angular $\hbar$ no sentido directo (ou no sentido inverso).

$$
n = 1 \ , \quad \begin{cases} m = 1 \ , & \Phi_{(n_e=0, n_d=1)}(\rho, \phi) = \dfrac{\omega\mu}{\sqrt{\pi}\hbar} e^{i\phi} \rho e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}\rho^2} \ , \\ m = -1 \ , & \Phi_{(n_e=1, n_d=0)}(\rho, \phi) = \dfrac{\omega\mu}{\sqrt{\pi}\hbar} e^{-i\phi} \rho e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}\rho^2} \ , \end{cases}
$$

$$
n = 2 \ , \quad \begin{cases} m = 2 \ , & \Phi_{(n_e=0, n_d=2)}(\rho, \phi) = \left(\dfrac{\omega\mu}{\hbar}\right)^{3/2} e^{2i\phi} \dfrac{\rho^2}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}\rho^2} \ , \\ m = 0 \ , & \Phi_{(n_e=1, n_d=1)}(\rho, \phi) = \sqrt{\dfrac{\omega\mu}{\pi\hbar}} \left[\dfrac{\omega\mu}{\hbar}\rho^2 - 1\right] e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}\rho^2} \ , \\ m = -2 \ , & \Phi_{(n_e=2, n_d=0)}(\rho, \phi) = \left(\dfrac{\omega\mu}{\hbar}\right)^{3/2} e^{-2i\phi} \dfrac{\rho^2}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}\rho^2} \ . \end{cases}
$$