

Mais sobre os novos operadores

- Vimos que $|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|\varphi_0\rangle$. Como fica a ortonormalidade $\langle\varphi_{n'}|\varphi_n\rangle$?

$$\langle\varphi_{n'}|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n'!}} \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle\varphi_0|a^{n'}(a^\dagger)^n|\varphi_0\rangle \Rightarrow \text{note que se usarmos as regras de}$$

comutação, podemos encostar o a no ket $|\varphi_0\rangle$ e isso resultaria em zero. O

mesmo pode-se dizer sobre encostar pela direita a^\dagger no bra $\langle\varphi_0|$, isto é

$\langle\varphi_0|a^\dagger = (a|\varphi_0\rangle)^\dagger = 0$. Para explorar isso, considere $a^{n'}(a^\dagger)^n|\varphi_0\rangle$, sabendo que

$[a, a^\dagger] = 1$. Com isso, temos

$$\begin{aligned} a^{n'}(a^\dagger)^n|\varphi_0\rangle &= a^{n'-1}aa^\dagger(a^\dagger)^{n-1}|\varphi_0\rangle = a^{n'-1}(1+a^\dagger a)(a^\dagger)^{n-1}|\varphi_0\rangle = \\ &= a^{n'-1}(1+N) \underbrace{(a^\dagger)^{n-1}|\varphi_0\rangle}_{\propto |\varphi_{n-1}\rangle} = a^{n'-1}(1+(n-1))(a^\dagger)^{n-1}|\varphi_0\rangle \end{aligned}$$

Isso permite escrever $a^{n'}(a^\dagger)^n|\varphi_0\rangle = na^{n'-1}(a^\dagger)^{n-1}|\varphi_0\rangle$. Separe em três situações:

- $n < n' \Rightarrow \langle\varphi_{n'}|\varphi_n\rangle = \frac{\langle\varphi_0|a^{n'}(a^\dagger)^n|\varphi_0\rangle}{\sqrt{n'!n!}} = \frac{n(n-1)\dots 2.1}{\sqrt{n'!n!}} \langle\varphi_0|a^{n'-n}|\varphi_0\rangle = 0$
- $n > n' \Rightarrow \langle\varphi_{n'}|\varphi_n\rangle = \frac{\langle\varphi_0|a^{n'}(a^\dagger)^n|\varphi_0\rangle}{\sqrt{n'!n!}} = \frac{n(n-1)\dots(n-n'+1)}{\sqrt{n'!n!}} \langle\varphi_0|a^{\dagger n-n'}|\varphi_0\rangle = 0$
- $n = n' \Rightarrow \langle\varphi_n|\varphi_n\rangle = \frac{\langle\varphi_0|a^n(a^\dagger)^n|\varphi_0\rangle}{\sqrt{n!n!}} = \frac{n(n-1)\dots 2.1}{\sqrt{n!n!}} \langle\varphi_0|\varphi_0\rangle = 1$

Mais sobre os novos operadores

- Na aula passada vimos que $|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} a^\dagger |\varphi_{n-1}\rangle$.
- Troque n por $n+1$ e obtenha $|\varphi_{n+1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}} a^\dagger |\varphi_n\rangle \Rightarrow a^\dagger |\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1} |\varphi_{n+1}\rangle$
- Multiplique $|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} a^\dagger |\varphi_{n-1}\rangle$ por a e obtenha $a|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} a a^\dagger |\varphi_{n-1}\rangle$ que com auxílio de $[a, a^\dagger] = 1$, fica $a|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} (1 + a^\dagger a) |\varphi_{n-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} (1 + (n-1)) |\varphi_{n-1}\rangle$,
 $\therefore a|\varphi_n\rangle = \sqrt{n} |\varphi_{n-1}\rangle$.

- Tome o adjunto hermiteano das expressões nas caixas $\begin{cases} \langle \varphi_n | a = \sqrt{n+1} \langle \varphi_{n+1} | \\ \langle \varphi_n | a^\dagger = \sqrt{n} \langle \varphi_{n-1} | \end{cases}$
- Estamos prontos para obter resultados de aplicações dos operadores X e P (escritos em função de a e a^\dagger) sobre autokets de N e H , os $\{|\varphi_n\rangle\}$.

A partir de $\begin{cases} a = \frac{\hat{X} + i\hat{P}}{\sqrt{2}} \\ a^\dagger = \frac{\hat{X} - i\hat{P}}{\sqrt{2}} \end{cases}$ escrevemos $\begin{cases} \hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}} (a^\dagger + a) \\ \hat{P} = \frac{i}{\sqrt{2}} (a^\dagger - a) \end{cases}$ onde $\begin{cases} \hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X \\ \hat{P} = \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}} P \end{cases}$

Isso permite escrever $X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a^\dagger + a)$ e $P = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} i(a^\dagger - a)$.

Mais sobre os novos operadores

- A combinação dos resultados obtidos nas caixas do slide 2 permite escrever

$$X|\varphi_n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [\sqrt{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle + \sqrt{n}|\varphi_{n-1}\rangle]$$

$$P|\varphi_n\rangle = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} i [\sqrt{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle - \sqrt{n}|\varphi_{n-1}\rangle]$$

Essas expressões permitem aplicar operadores construídos por combinações de X e P nos elementos da base de H .

- É útil escrever a representação matricial de a e a^\dagger na base $\{|\varphi_n\rangle\}$. Para

tanto, use

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

$$\begin{array}{c} \langle\varphi_0| \\ \langle\varphi_1| \\ \langle\varphi_2| \\ \langle\varphi_3| \\ \vdots \end{array} a \doteq \begin{array}{c} |\varphi_0\rangle \\ |\varphi_1\rangle \\ |\varphi_2\rangle \\ |\varphi_3\rangle \\ \vdots \end{array} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots \end{pmatrix} a^\dagger \doteq \begin{array}{c} |\varphi_0\rangle \\ |\varphi_1\rangle \\ |\varphi_2\rangle \\ |\varphi_3\rangle \\ \vdots \end{array} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots \end{pmatrix}$$

Estados estacionários do OHS na representação da coordenada

- Na aula passada, vimos que $|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |\varphi_0\rangle$. Com auxílio dos resultados do slide 2, podemos escrever $a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} X - \frac{iP}{\sqrt{2m\hbar\omega}}$ e com isso, obter:

$\varphi_n(x) = \langle x|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle x|(a^\dagger)^n|\varphi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle x|\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} X - \frac{iP}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\right)^n|\varphi_0\rangle$, que pode ser escrita por:

$\varphi_n(x) = \langle x|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hbar \frac{d}{dx}\right)^n \langle x|\varphi_0\rangle$, para finalmente obter uma fórmula de recorrência para todos os estados a partir do fundamental:

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

Lembre que na aula passada, a partir de $a|\varphi_0\rangle = 0$, obtivemos esse estado na representação das coordenadas, $\varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2}$ (normalizado).

Com alguns ajustes a fórmula de recorrência fica:

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

Estados estacionários do OHS na representação da coordenada

- Será que a fórmula de recorrência carrega a informação que as soluções têm paridade bem definida? Para verificar isso, troque $x \rightarrow -x$ e obtenha

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

- A paridade das funções de onda do OHS é $(-1)^n \begin{cases} n \text{ ímpar, função ímpar} \\ n \text{ par, função par} \end{cases}$
- Note que o polinômio (de Hermite) que multiplica a exponencial é de grau n .

- **n = 0**

$$\varphi_0(x) = \left[\frac{1}{2^0 0!} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^0 \right]^{1/2} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \left[\frac{m\omega}{\hbar} x - \frac{d}{dx} \right]^0 e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2}$$

- **n = 1**

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

O primeiro estado excitado do OHS é: $\varphi_1(x) = \left(\frac{4}{\pi} \right)^{1/4} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{3/4} x e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2}$

- **n = 2**

O segundo estado excitado do OHS é dado por (faça em casa)

$$\varphi_2(x) = \left(\frac{1}{2} \right)^{1/2} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \left[\frac{2m\omega}{\hbar} x^2 - 1 \right] e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2}$$

Estados estacionários do OHS na representação da coordenada

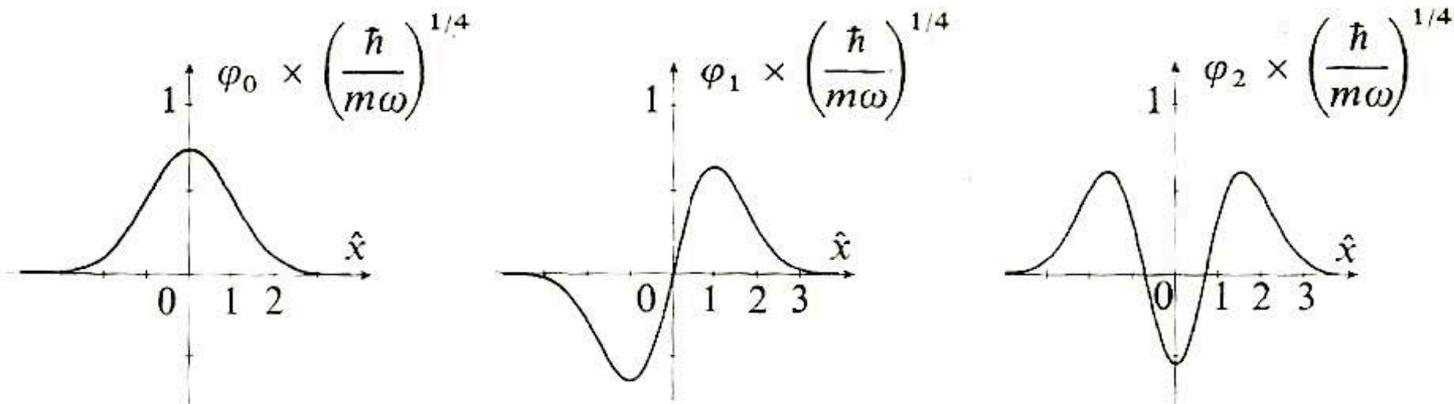


Fig. 4, cap. 5 do texto

Funções de onda associadas aos três primeiros níveis do OHS

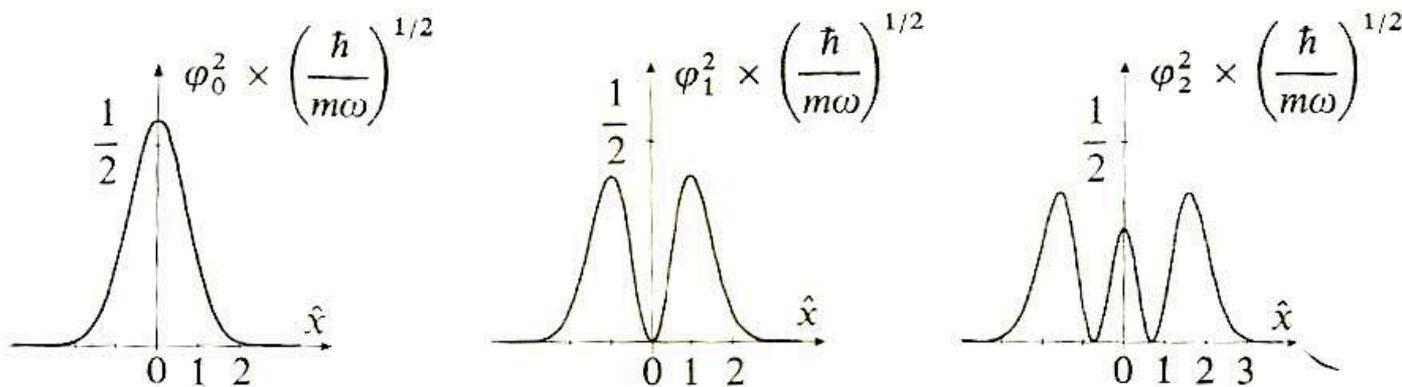
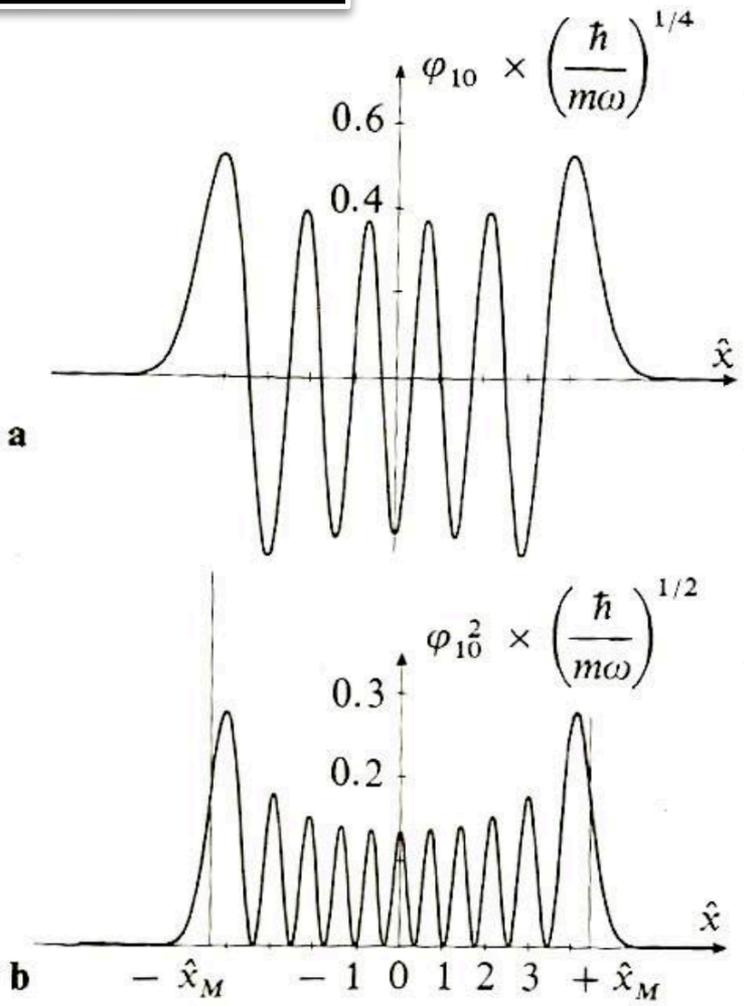


Fig. 5, cap. 5 do texto

- Quanto vale a probabilidade de achar a partícula entre x e $x + dx$? $dP = |\langle x | \varphi_n \rangle|^2 dx = |\varphi_n(x)|^2 dx$.

Fig. 6, cap. 5 do texto



- Quanto n cresce, a região de x onde $\varphi_n(x)$ é diferente de zero e não desprezível cresce (compare com as figuras do slide anterior). Note que é o que ocorre classicamente.
- Note a presença possível da partícula em regiões classicamente proibidas $|x| > x_m$.
- Note picos maiores nas curvas de densidade de probabilidade nas regiões de $x \sim x_m$. Partícula passa mais tempo nestas regiões, pois a velocidade é pequena quando $x \sim x_m$.

Médias e desvios quadráticos da média

Para avaliar o desvio quadrático da média para os estados estacionários, precisamos calcular $\langle X \rangle$, $\langle P \rangle$, $\langle X^2 \rangle$, e $\langle P^2 \rangle$ para o estado $|\varphi_n\rangle$. Para isso, usamos as seguintes

relações:
$$\left\{ \begin{array}{l} X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger) \rightarrow X^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}(a^2 + a^{\dagger 2} + aa^\dagger + a^\dagger a) \\ P = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(-a + a^\dagger) \rightarrow P^2 = -\frac{m\hbar\omega}{2}(a^2 + a^{\dagger 2} - aa^\dagger - a^\dagger a) \\ a|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}|\varphi_{n-1}\rangle \text{ e } a^\dagger|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle \\ \langle\varphi_{n'}|\varphi_n\rangle = \delta_{n',n} \end{array} \right.$$

que fornecem
$$\left\{ \begin{array}{l} \langle\varphi_n|X|\varphi_n\rangle = 0 \\ \langle\varphi_n|X^2|\varphi_n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\langle\varphi_n|(a^2 + a^{\dagger 2} + aa^\dagger + a^\dagger a)|\varphi_n\rangle = \frac{\hbar}{m\omega}(n + \frac{1}{2}) \\ \langle\varphi_n|P|\varphi_n\rangle = 0 \\ \langle\varphi_n|P^2|\varphi_n\rangle = -\frac{m\hbar\omega}{2}\langle\varphi_n|(a^2 + a^{\dagger 2} - aa^\dagger - a^\dagger a)|\varphi_n\rangle = m\hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \end{array} \right.$$

Lembre que
$$\left\{ \begin{array}{l} (\Delta X)^2 = \langle\varphi_n|X^2|\varphi_n\rangle - \langle\varphi_n|X|\varphi_n\rangle^2 = \langle\varphi_n|X^2|\varphi_n\rangle \\ (\Delta P)^2 = \langle\varphi_n|P^2|\varphi_n\rangle - \langle\varphi_n|P|\varphi_n\rangle^2 = \langle\varphi_n|P^2|\varphi_n\rangle \end{array} \right.$$

Com isso podemos escrever

$$(\Delta X)^2(\Delta P)^2 = \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \hbar^2.$$

Médias e desvios quadráticos da média

- Note que isso nos leva à $(\Delta X)(\Delta P) = (n + \frac{1}{2})\hbar$ sempre superior à $\frac{\hbar}{2}$, conforme esperado, segundo a relação de incerteza.
- Note que para o estado fundamental essa relação reflete o extremo inferior da relação de incerteza $(\Delta X)(\Delta P) = \frac{1}{2}\hbar$.

- Sabemos que $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ e vimos que $(\Delta X)^2 = \frac{\hbar}{m\omega}(n + \frac{1}{2})$. Podemos escrever $(\Delta X)^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \frac{E_n}{\hbar\omega} \Rightarrow$ Se usarmos que $E_n = \frac{1}{2}m\omega^2 x_m^2$, obtemos uma relação entre (ΔX) e x_m , dada por $(\Delta X)^2 = \frac{1}{2}x_m^2 \therefore (\Delta X) = \frac{x_m}{\sqrt{2}}$.

A incerteza sobre a posição da partícula é cerca de 70% da amplitude clássica.

- De forma semelhante $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ com $(\Delta P)^2 = m\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$, permite escrever $(\Delta P)^2 = m\hbar\omega \frac{E_n}{\hbar\omega} \Rightarrow$ Se usarmos agora que $E_n = \frac{p_m^2}{2m}$, obtemos uma relação entre (ΔP) e p_m , dada por $(\Delta P)^2 = \frac{p_m^2}{2} \therefore (\Delta P) = \frac{p_m}{\sqrt{2}}$.

A incerteza sobre o momento da partícula é da ordem de 70% do valor máximo do momento clássico p_m .

Médias e desvios quadráticos da média

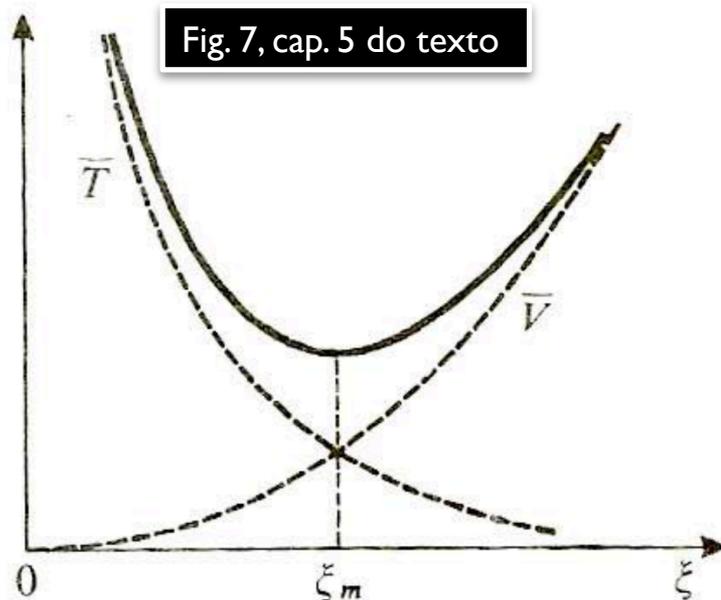
- Quanto vale o valor médio do potencial $\langle V(X) \rangle$?

$$\bar{V} = \langle V(X) \rangle = \frac{1}{2}m\omega^2 \langle X^2 \rangle = \frac{1}{2}m\omega^2 (\Delta X)^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2}\right) = \frac{E_n}{2}.$$

- Quanto vale o valor médio da energia cinética $\langle \frac{P^2}{2m} \rangle$?

$$\bar{T} = \langle \frac{P^2}{2m} \rangle = \frac{1}{2m} (\Delta P)^2 = \frac{1}{2m} m\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) = \frac{E_n}{2}.$$

- Se considerarmos $(\Delta X) = \xi$ e que para o estado fundamental $(\Delta X)(\Delta P) \sim \hbar$, podemos escrever $(\Delta P) = \frac{\hbar}{\xi}$. A energia fica $\bar{E} = \bar{T} + \bar{V} = \frac{\hbar^2}{2m\xi^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 \xi^2$.



- Note que a relação de incerteza atua como uma espécie de vínculo (se (ΔX) cresce, (ΔP) decresce e vice-versa).

- Podemos calcular a menor energia,

$$\text{impondo } \frac{\partial \bar{E}}{\partial \xi} = 0 \rightarrow -\frac{2\hbar^2}{2m\xi^3} + \frac{2m\omega^2}{2}\xi = 0,$$

$$\text{fornece } \xi_m = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \rightarrow E_m = \hbar\omega.$$

Evolução temporal dos valores médios

- Para sistemas conservativos, um bom começo é expandir o estado inicial na base de estados estacionários, isto é, sabendo que: $\mathbb{1} = \sum_{n=0}^{\infty} |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|$, escreva $\mathbb{1}|\psi(0)\rangle$,

$$\text{de tal forma que } |\psi(0)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(0)|\varphi_n\rangle \text{ com } c(0) = \langle\varphi_n|\psi(0)\rangle.$$

- A evolução temporal do estado do sistema fica

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(0)|\varphi_n\rangle \implies |\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(t)|\varphi_n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(0)e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}|\varphi_n\rangle.$$

- Para o OHS, onde $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$, temos

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(0)e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t}|\varphi_n\rangle$$

- Com isso podemos escrever o valor médio de uma observável, A por

$$\langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} c_m^*(0)c_n(0)A_{mn}e^{i(m-n)\omega t} \text{ com } A_{mn} = \langle\varphi_m|A|\varphi_n\rangle.$$

As frequências de Bohr que participam são múltiplos de ω . O controle de relevância das frequências envolvidas é do elemento de matriz A_{mn} .

Evolução temporal dos valores médios

- Como ficariam os valores médios de X e P ?

$$\langle \psi(t) | X | \psi(t) \rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} c_m^*(0) c_n(0) X_{mn} e^{i(m-n)\omega t} \quad \text{com } X_{mn} = \langle \varphi_m | X | \varphi_n \rangle.$$

$$\langle \psi(t) | P | \psi(t) \rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} c_m^*(0) c_n(0) P_{mn} e^{i(m-n)\omega t} \quad \text{com } P_{mn} = \langle \varphi_m | P | \varphi_n \rangle.$$

Sabemos que $X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^\dagger + a)$ e $P = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}i(a^\dagger - a)$ e isso permite concluir que X_{mn} e P_{mn} só não são zeros quando $m = n \pm 1$ e \therefore só $e^{\pm i\omega t}$ participam (funções do tipo $\sin \omega t$ e $\cos \omega t$, como na física clássica).

- Para reforçar, considere o teorema de Ehrenfest para X e P .

$$\frac{d}{dt} \langle X \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [X, H] \rangle = \frac{\langle P \rangle}{m} \quad \text{e} \quad \frac{d}{dt} \langle P \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [P, H] \rangle = -m\omega^2 \langle X \rangle$$

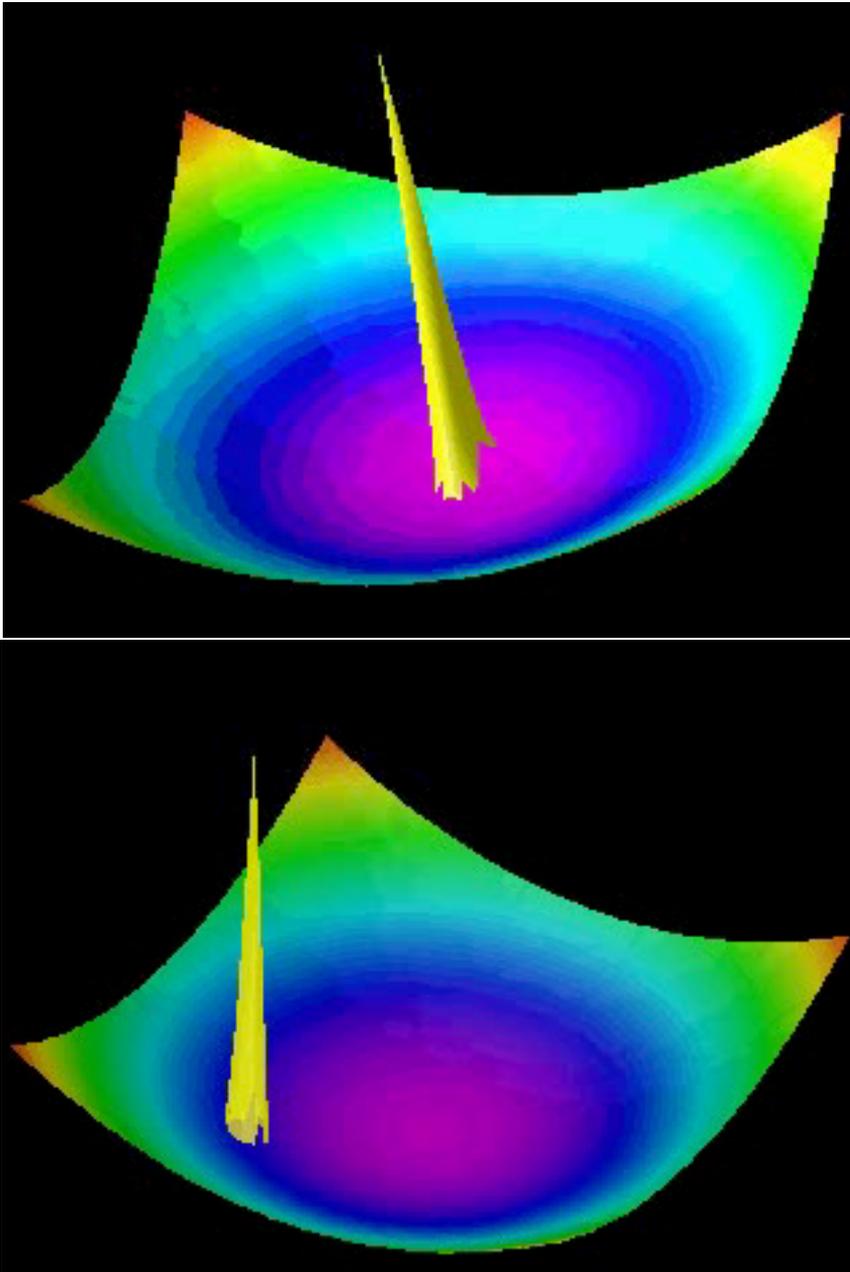
que combinadas fornecem $\frac{d^2}{dt^2} \langle X \rangle = -\omega^2 \langle X \rangle$ $\left\{ \begin{array}{l} \langle X \rangle(t) = A \cos \omega t + B \sin \omega t \\ \frac{\langle P \rangle(t)}{m} = -\omega A \sin \omega t + \omega B \cos \omega t \end{array} \right.$

- Note que $A = \langle X \rangle(0)$ e $B = \frac{\langle P \rangle(0)}{\omega m}$ e isso permite escrever

$$\langle X \rangle(t) = \langle X \rangle(0) \cos \omega t + \frac{\langle P \rangle(0)}{m\omega} \sin \omega t \quad \therefore \text{ Se } \underbrace{|\psi\rangle = |\varphi_n\rangle}_{\text{ } \Rightarrow \langle X \rangle(t) = 0}$$

$$\langle P \rangle(t) = -m\omega \langle X \rangle(0) \sin \omega t + \langle P \rangle(0) \cos \omega t \quad \hookrightarrow \quad \langle P \rangle(t) = 0$$

Cuidados especiais com nossas interpretações



- Se $|\psi\rangle = |\varphi_n\rangle \Rightarrow \begin{cases} \langle X \rangle(t) = 0 \\ \langle P \rangle(t) = 0 \end{cases}$
- O comportamento oscilatório clássico só é visto quando $|\psi(0)\rangle$ é uma combinação de estados estacionários. As duas animações ao lado representam combinações de estacionários (se fosse só um estado, não haveria movimento).