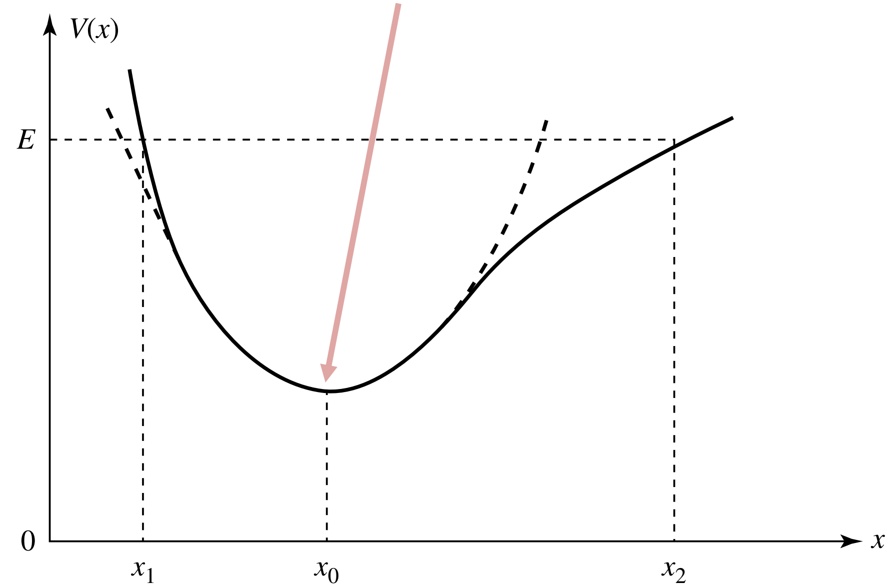
F 689 – Mecânica Quântica I

2º Semestre de 2022
16/11/2022
Aula 21

Aula passada

Oscilador harmônico unidimensional: movimento em torno de mínimos quadrátricos.

$$V\left(x\right)\approx V\left(x_0\right)+\frac{1}{2}V''\left(x_0\right)\left(x-x_0\right)^2$$



Descrição clássica:

$$\ddot{x}+\omega^2 x=0;\quad \omega=\sqrt{\frac{V''\left(x_0\right)}{m}}$$

Solução geral: $x_{cl}\left(t\right)=x_M\cos\left(\omega t+\varphi\right)$

Energia total (cinética + potencial) é conservada:

$$E_{cl}=\frac{1}{2}m\dot{x}^2+\frac{1}{2}m\omega^2x^2=\text{const.}=\frac{1}{2}m\omega^2x_M^2$$

Hamiltoniana clássica: $H_{cl}\left(p,x\right)=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$

Aula passada

Descrição quântica:

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2; \quad [X,P] = i\hbar$$

Operadores de criação e destruição:

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

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{X}{\lambda} - i\frac{\lambda}{\hbar}P\right)$$

$$\lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \qquad [\lambda] = L$$

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

Hamiltoniana em termos dos operadores de criação e destruição:

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

Aula passada

Operador número:

$$N = a^\dagger a$$
$$[N, a] = -a$$
$$\left[N, a^\dagger\right] = a^\dagger$$

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

Espectro de N e de H: discreto e não degenerado

$$N\left|\varphi_n\right\rangle = n\left|\varphi_n\right\rangle\,, \quad n = 0, 1, 2, 3, \ldots$$
$$H\left|\varphi_n\right\rangle = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\left|\varphi_n\right\rangle\,, \quad n = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

Atuação de a e a^+ nos auto-vetores:

$$a\left|\varphi_n\right\rangle = C_n\left|\varphi_{n-1}\right\rangle$$
$$a^\dagger\left|\varphi_n\right\rangle = D_n\left|\varphi_{n+1}\right\rangle$$
$$a\left|\varphi_0\right\rangle = 0$$
$$\left|\varphi_n\right\rangle = K_n\left(a^\dagger\right)^n\left|\varphi_0\right\rangle$$

Auto-estados de H: normalização

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

2) $|\varphi_1\rangle = \dfrac{a^+|\varphi_0\rangle}{K_1}$; $|\varphi_2\rangle = \dfrac{(a^+)^2}{K_2}|\varphi_0\rangle$; . . .

SUPONHA QUE $|\varphi_{n-1}\rangle$ JÁ ESTÁ NORMALIZADO:

$$\langle\varphi_{n-1}|\varphi_{n-1}\rangle = 1$$

ENTÃO:

$$|\varphi_n\rangle = c_n a^+ |\varphi_{n-1}\rangle$$

$$\Rightarrow \langle\varphi_n|\varphi_n\rangle = \langle\varphi_{n-1}| a\, c_n^* c_n a^+ |\varphi_{n-1}\rangle$$

$$= |c_n|^2 \langle\varphi_{n-1}| a a^+ |\varphi_{n-1}\rangle = |c_n|^2 \langle\varphi_{n-1}|(N+1)|\varphi_{n-1}\rangle =$$

$$[a, a^+] = 1 \Rightarrow a a^+ = 1 + a^+ a = N + 1$$

$$= |c_n|^2\, n \langle\varphi_{n-1}|\varphi_{n-1}\rangle = |c_n|^2 n = 1 \Rightarrow |c_n| = \frac{1}{\sqrt{n}}$$

$$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} a^\dagger |\varphi_{n-1}\rangle = \frac{a^\dagger}{\sqrt{n}} \underbrace{\frac{a^\dagger}{\sqrt{n-1}} |\varphi_{n-2}\rangle}_{|\varphi_{n-1}\rangle}$$

APLICANDO RECURSIVAMENTE

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

SE $|\varphi_0\rangle$ ESTIVER NORMALIZADO, $|\varphi_n\rangle$ TAMBÉM ESTARÁ.

A PARTIR DE AGORA SUPOREMOS $|\varphi_n\rangle$ NORMALIZADOS A 1.

Ortonormalidade e fechamento

COMO $|\varphi_n\rangle$ E $|\varphi_{n'}\rangle$ SÃO ORTOGONAIS SE $n \neq n'$

$$\Rightarrow \langle \varphi_n | \varphi_{n'} \rangle = \delta_{n n'}$$

$\underline{H}$ É HERMITIANO E, PODE-SE PROVAR, É UM OBSERVÁVEL: SEUS AUTO-VETORES FORMAM UMA BASE COMPLETA DE $\mathcal{E}$.

$$\Rightarrow \sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = \mathbb{1} \quad \text{(FECHAMENTO)}$$

Ação de operadores lineares nos auto-estados

VIMOS QUE: $|\varphi_n\rangle = \frac{a^+}{\sqrt{n}}|\varphi_{n-1}\rangle$

$n \to n+1$: $\boxed{a^+|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}\,|\varphi_{n+1}\rangle}$

APLICANDO a NA EQUAÇÃO ACIMA:

$\underbrace{a a^+}_{N+1}|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}\,a|\varphi_{n+1}\rangle \Rightarrow (n+1)|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}\,a|\varphi_{n+1}\rangle$

$\Rightarrow a|\varphi_{n+1}\rangle = \sqrt{n+1}\,|\varphi_n\rangle$

FAZENDO $n \to n-1$: $\boxed{a|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}\,|\varphi_{n-1}\rangle}$

VIMOS: $X = \frac{\lambda}{\sqrt{2}}(a+a^\dagger)$ $\qquad$ $P = \frac{\hbar}{\lambda}\frac{i}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a)$

ONDE: $\lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$

SEGUE QUE:

$$X|\varphi_n\rangle = \frac{\lambda}{\sqrt{2}}(a+a^\dagger)|\varphi_n\rangle = \frac{\lambda}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{n}\,|\varphi_{n-1}\rangle + \sqrt{n+1}\,|\varphi_{n+1}\rangle\right)$$

$$P|\varphi_n\rangle = \frac{\hbar}{\lambda}\frac{i}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a)|\varphi_n\rangle = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}\,\lambda}\left(\sqrt{n+1}\,|\varphi_{n+1}\rangle - \sqrt{n}\,|\varphi_{n-1}\rangle\right)$$

DISSO SEGUE QUE:

$$\boxed{\langle\varphi_n|X|\varphi_n\rangle = 0 = \langle\varphi_n|P|\varphi_n\rangle}$$

EMBORA $\langle\varphi_n|X|\varphi_n\rangle = \langle\varphi_n|P|\varphi_n\rangle = 0$, $\langle\varphi_n|X^2|\varphi_n\rangle \neq 0$

E $\langle\varphi_n|P^2|\varphi_n\rangle \neq 0$.

$$x^2 = \frac{\lambda^2}{2}(a+a^+)(a+a^+) = \frac{\lambda^2}{2}\left(a^2 + (a^+)^2 + \underbrace{aa^+}_{N+1} + \underbrace{a^+a}_{N}\right)$$

$$x^2 = \frac{\lambda^2}{2}\left[a^2 + (a^+)^2 + 2N+1\right]$$

$$p^2 = -\frac{\hbar^2}{2\lambda^2}(a^+-a)(a^+-a) = -\frac{\hbar^2}{2\lambda^2}\left[(a^+)^2 + a^2 \underbrace{- a^+a - aa^+}_{-(2N+1)}\right]$$

$$p^2 = \frac{\hbar^2}{2\lambda^2}\left[-a^2 - (a^+)^2 + 2N+1\right]$$

$$\langle \varphi_n | x^2 | \varphi_n \rangle = \frac{\lambda^2}{2}(2n+1) = \lambda^2\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

$$\langle \varphi_n | p^2 | \varphi_n \rangle = \frac{\hbar^2}{2\lambda^2}(2n+1) = \frac{\hbar^2}{\lambda^2}\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

SEGUE QUE: $\Delta x^2 = \langle x^2 \rangle - (\langle x \rangle)^2$

NOS AUTO-ESTADOS $|\varphi_n\rangle$:

$$\Delta x^2 = \lambda^2 \left(n + \frac{1}{2}\right) \Rightarrow \Delta x = \lambda \sqrt{n + \frac{1}{2}}$$

$$\Delta p^2 = \langle p^2 \rangle - (\cancelto{0}{\langle p \rangle})^2 = \frac{\hbar^2}{\lambda^2} \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

$$\Rightarrow \Delta p = \frac{\hbar}{\lambda} \sqrt{n + \frac{1}{2}}$$

SEGUE QUE: $\Delta x \Delta p = \hbar \left(n + \frac{1}{2}\right)$

i) O RESULTADO É COMPATÍVEL COM O PRINCÍPIO DE INCERTEZA:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

ii) O ESTADO FUNDAMENTAL "SATURA" O LIMITE INFERIOR:

$$\Delta x_0 \Delta p_0 = \frac{\hbar}{2}$$

ELE É UM ESTADO DE INCERTEZA MÍNIMA.

Forma matricial dos operadores na base de auto-estados de H, $|\phi_n>$

$$\hat{N} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \qquad \hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 3 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 5 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$\hat{a} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \qquad \hat{a}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$\hat{X} = \underbrace{\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}}_{\frac{\lambda}{\sqrt{2}}}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad \hat{P} = \underbrace{i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}}_{\frac{\hbar}{\lambda}\frac{i}{\sqrt{2}}}\begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

O estado fundamental é um estado de incerteza mínima

Função de onda do estado fundamental: $\varphi_0(x) = Ae^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$

Pacote de incerteza mínima:

$$\Delta x \Delta p_x = \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \psi(x) = \frac{1}{\left[2\pi(\Delta x)^2\right]^{1/4}} e^{i\langle p\rangle x/\hbar} \exp\left[-\left(\frac{x-\langle x\rangle}{2\Delta x}\right)^2\right]$$

AS DUAS FORMAS SÃO COMPATÍVEIS SE: $\langle x \rangle = 0 = \langle p \rangle$

$$\Delta x_0 = \lambda \sqrt{n + \frac{1}{2}}\,\Big|_{n=0} = \frac{\lambda}{\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

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

"GANHEI" DE GRAÇA A NORMALIZAÇÃO DE $\varphi_0(x)$

Teorema do virial

PROBLEMA 10a DO CAPÍTULO III: TEOREMA DO VIRIAL

SE $H = \frac{P^2}{2m} + V(x)$ ONDE $V(x) = \lambda X^n$, ENTÃO:

$$n\langle V(X)\rangle = 2\left\langle \frac{P^2}{2m}\right\rangle$$

CALCULADOS NOS AUTO-ESTADOS DE H

OSCILADOR HARMÔNICO: $n=2$

$$\langle V(x)\rangle = \frac{1}{2} m\omega^2 \langle X^2\rangle = \frac{\langle P^2\rangle}{2m}$$

DE FATO:

$$\frac{1}{2} m\omega^2\left[\lambda^2\left(n+\frac{1}{2}\right)\right] = \frac{\cancel{m}\omega^{\cancel{2}}}{2}\,\frac{\hbar}{\cancel{m\omega}}\left(n+\frac{1}{2}\right) = \frac{\hbar\omega}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right) = \langle V(x)\rangle$$

$$\frac{\langle P^2\rangle}{2m} = \frac{1}{2m}\,\frac{\hbar^2}{\lambda^2}\left(n+\frac{1}{2}\right) = \frac{\hbar^{\cancel{2}}}{2\cancel{m}}\,\frac{\cancel{m}\omega}{\cancel{\hbar}}\left(n+\frac{1}{2}\right) = \frac{\hbar\omega}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

$=$

ALÉM DISSO:

$$\langle H \rangle = \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle + \frac{1}{2} m\omega^2 \langle x^2 \rangle = \frac{\hbar\omega}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar\omega}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

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

Funções de onda dos auto-estados

DE MANEIRA GERAL:

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

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{\lambda} - i\frac{\lambda}{\hbar}P\right) \xrightarrow{\text{REP. } |x\rangle} \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{\lambda} - \lambda\frac{d}{dx}\right) =$$

$$= \frac{\lambda}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{\lambda^2} - \frac{d}{dx}\right)$$

$$\Rightarrow \varphi_n(x) = \frac{\lambda^n}{\sqrt{2^n(n!)}}\left(\frac{x}{\lambda^2} - \frac{d}{dx}\right)^n \varphi_0(x)$$

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

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

A APLICAÇÃO SUCESSIVA $n\times$ DE [ ] DARÁ SEMPRE UM POLINÔMIO DE ORDEM $\underline{n}$ × GAUSSIANA

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\,\frac{1}{(\pi\lambda^2)^{1/4}}\,\underbrace{H_n\left(\frac{x}{\lambda}\right)}_{\text{POLINÔMIOS DE ORDEM } \underline{n}} e^{-\frac{x^2}{2\lambda^2}} \qquad \lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

SÃO OS POLINÔMIOS DE HERMITE

Polinômios de Hermite

Os primeiros 10 polinômios de Hermite:

$$H_0(x) = 1,$$
$$H_1(x) = 2x,$$
$$H_2(x) = 4x^2 - 2,$$
$$H_3(x) = 8x^3 - 12x,$$
$$H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12,$$
$$H_5(x) = 32x^5 - 160x^3 + 120x,$$
$$H_6(x) = 64x^6 - 480x^4 + 720x^2 - 120,$$
$$H_7(x) = 128x^7 - 1344x^5 + 3360x^3 - 1680x,$$
$$H_8(x) = 256x^8 - 3584x^6 + 13440x^4 - 13440x^2 + 1680,$$
$$H_9(x) = 512x^9 - 9216x^7 + 48384x^5 - 80640x^3 + 30240x,$$
$$H_{10}(x) = 1024x^{10} - 23040x^8 + 161280x^6 - 403200x^4 + 302400x^2 - 30240.$$

Propriedades matemáticas dos $H_n(x)$

Paridade: $H_n(-x) = (-1)^n H_n(x)$

Equação diferencial: $\left[\frac{d^2}{dx^2} - 2x\frac{d}{dx} + 2n\right] H_n(x) = 0$

Função geratriz: $e^{-\beta^2 + 2\beta x} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\beta^n}{n!} H_n(x)$

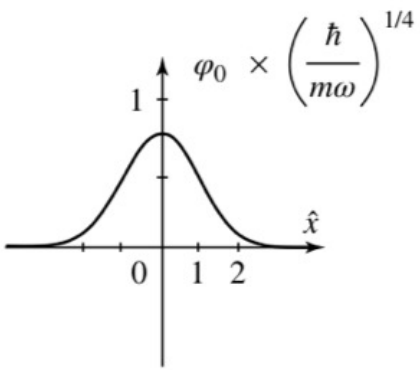
Relações de recorrência:
$$H_n'(x) = 2nH_{n-1}(x)$$
$$H_n(x) = 2xH_{n-1}(x) - 2(n-1)H_{n-2}(x)$$
$$H_n(x) = \left(2x - \frac{d}{dx}\right) H_{n-1}(x)$$

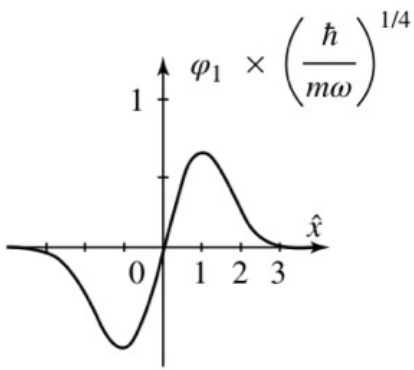
Ortogonalidade: $\int_{-\infty}^{+\infty} H_m(x) H_n(x) e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{m,n}$

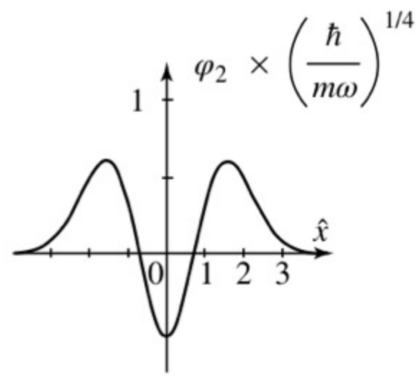
Funções de onda dos auto-estados

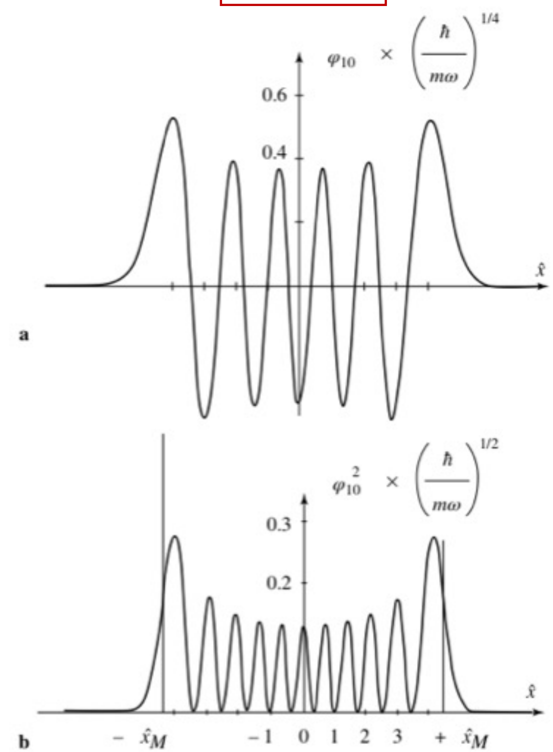
Os primeiros auto-estados:

n=10

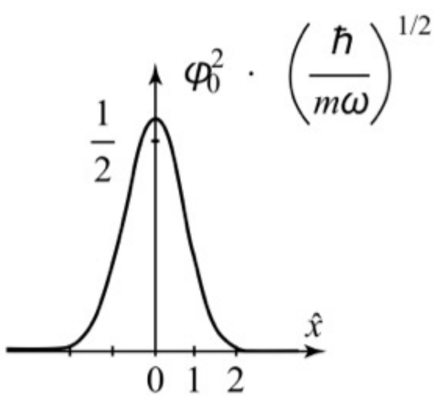


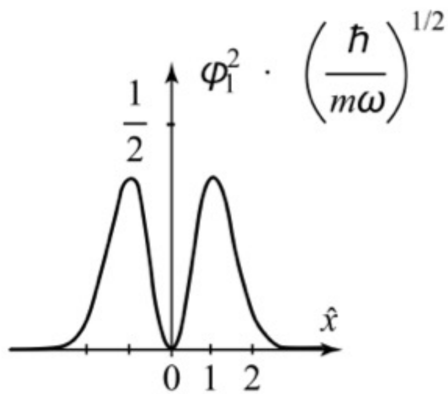


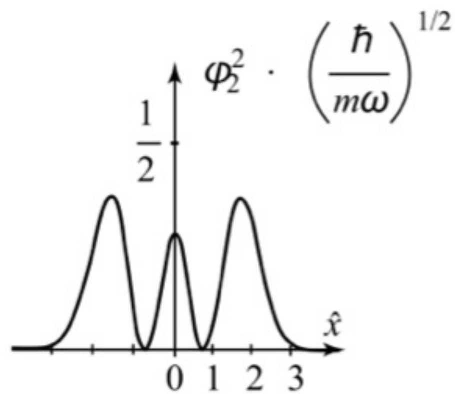




As densidades de probabilidade:

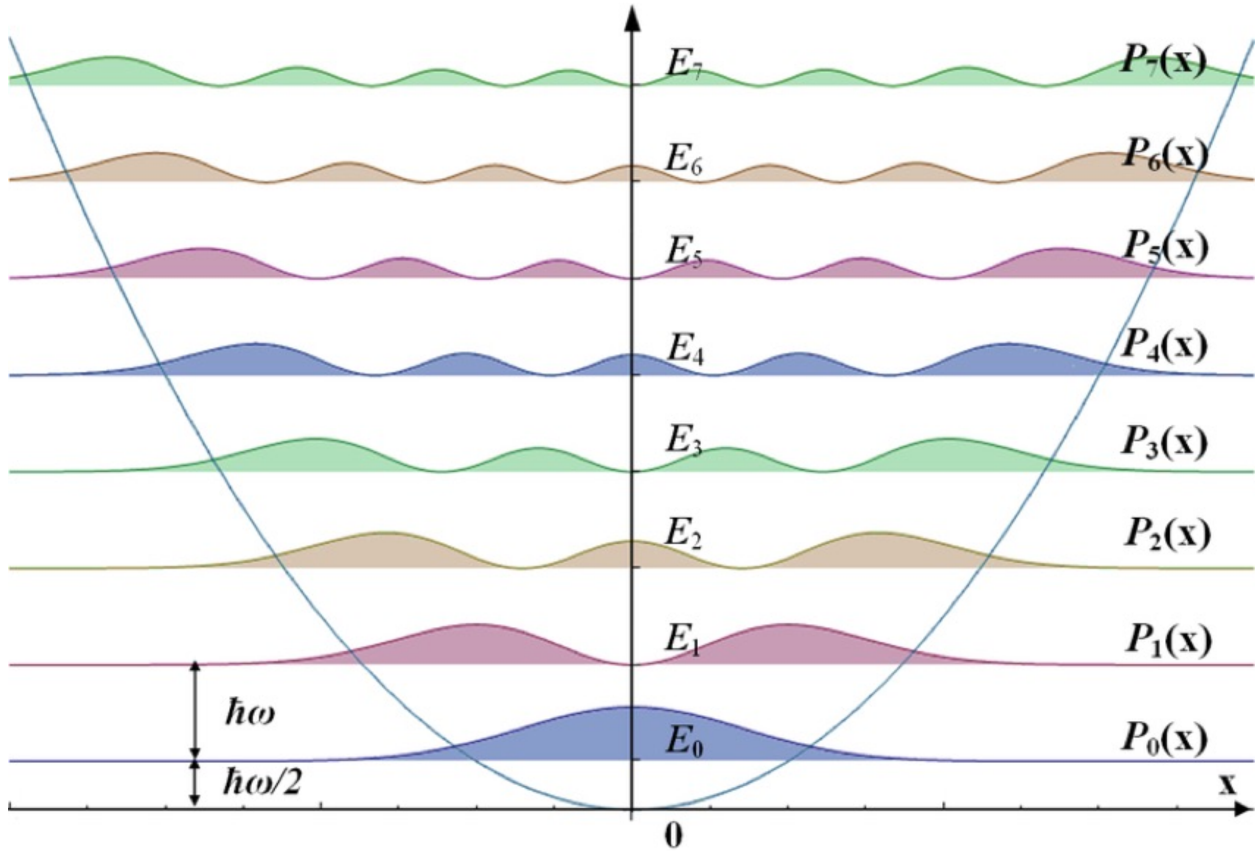






Note que $\underline{n}$ dá o número de nós da auto-função $\varphi_n(x)$

Densidades de probabilidade



Extensão espacial das funções onda

$$\Delta x = \lambda \sqrt{n+\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\sqrt{n+\frac{1}{2}}$$ AUMENTA COM $\sqrt{n}$

COMO: $E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \Rightarrow \Delta x = \sqrt{\frac{E_n}{m\omega^2}}$

DO RESULTADO CLÁSSICO:

$$E = \frac{1}{2} m\omega^2 x_m^2$$

LEVANDO $\underline{E}$ EM Δx: $\Delta x = \frac{x_m}{\sqrt{2}}$

ISSO EXPLICA POR QUÊ $|\varphi_n(x)|^2$ ESTÁ CONTIDA QUASE INTEIRAMENTE ENTRE $-x_m$ E $+x_m$ (REGIÃO CLASSICAMENTE PERMITIDA).

ANALOGAMENTE:

$$\Delta P = \sqrt{m\hbar\omega}\sqrt{n+\frac{1}{2}} = \sqrt{m E_n}$$

$$E = \frac{P_n^2}{2m}$$ $P_n(t)$ OSCILA ENTRE $-P_n$ E $+P_n$

$$\Rightarrow \Delta P = \frac{P_n}{\sqrt{2}}$$

$|\overline{\varphi}_n(p)|^2$ ESTÁ QUASE TOTALMENTE CONFINADA

À REGIÃO $[-P_n, +P_n]$

Relação entre os auto-estados e a solução clássica

É POSSÍVEL OBTER UMA RELAÇÃO ENTRE $|\varphi_n(x)|^2 = P_n(x)$ E A SOLUÇÃO CLÁSSICA PARA $\underline{n >> 1}$.

$$x(t) = X_M \cos(\omega t + \varphi)$$

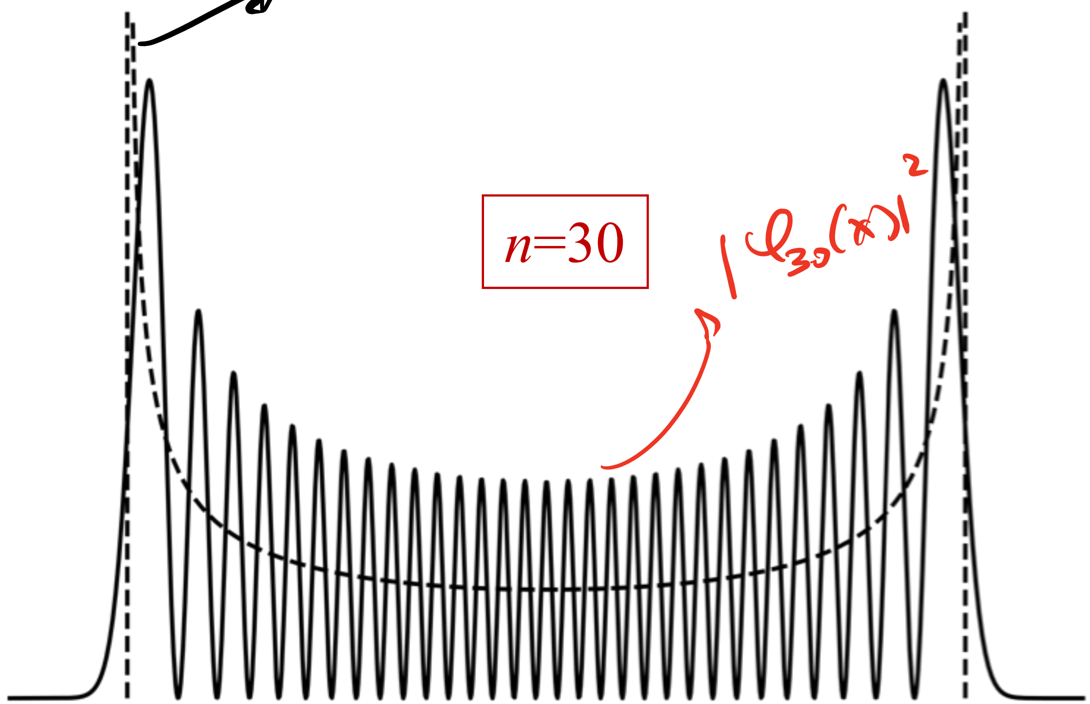
DADO $x, x+dx$ $P_{cl}(x)$ É PROPORCIONAL AO TEMPO QUE A PARTÍCULA OSCILANTE PASSA NO INTERVALO $[x, x+dx]$ PARA VÁRIAS OSCILAÇÕES.

$$P_{cl}(x) = \frac{\omega}{\pi} \frac{1}{\sqrt{\frac{2E}{m} - \omega^2 x^2}}$$

COMPARE COM $\quad P_n(x) = |\varphi_n(x)|^2$

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

$P_{cl}(x)$ (TRACEJADA)



VER NOTAS PARA A PROVA DE QUE

$P_n(x) = P_{cl}(x) \times$ FUNÇÃO OSCILATÓRIA