FUNÇÕES DE ONDA DOS AUTO-ESTADOS

AS FUNÇÕES DE ONDA DOS AUTO-ESTADOS EXCITADOS ($n \geq 1$) PODEM SER FACILMENTE OBTIDAS:

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

MAS:

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

E, NA REPRESENTAÇÃO $|x\rangle$, $a^\dagger$ ATUA COMO:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{\lambda} - \lambda \frac{d}{dx} \right) = \frac{\lambda}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{\lambda^2} - \frac{d}{dx} \right)$$

PORTANTO:

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

OU:

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

A EXPRESSÃO PARECE COMPLICADA, MAS A ATUAÇÃO DE $\left(\frac{x}{\lambda^2} - \frac{d}{dx}\right)^n$ NA GAUSSIANA

É EQUIVALENTE A MULTIPLICÁ-LA POR UM POLINÔMIO DE ORDEM n COM PARIDADE $(-1)^n$, CHAMADO DE POLINÔMIO DE HERMITE, $H_n(x/\lambda)$. A EXPRESSÃO COMPLETA É:

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

OS 10 PRIMEIROS POLINÔMIOS DE HERMITE SÃO:

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

NOTE SUA PARIDADE:

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

ALGUMAS PROPRIEDADES MATEMÁTICAS DOS POLINÔMIOS DE HERMITE

EQUAÇÃO DIFERENCIAL:

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

FUNÇÃO GERATRIZ:

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

RELAÇÕES DE RECORRÊNCIA:

$$H_n'(x) = 2n\, H_{n-1}(x)$$

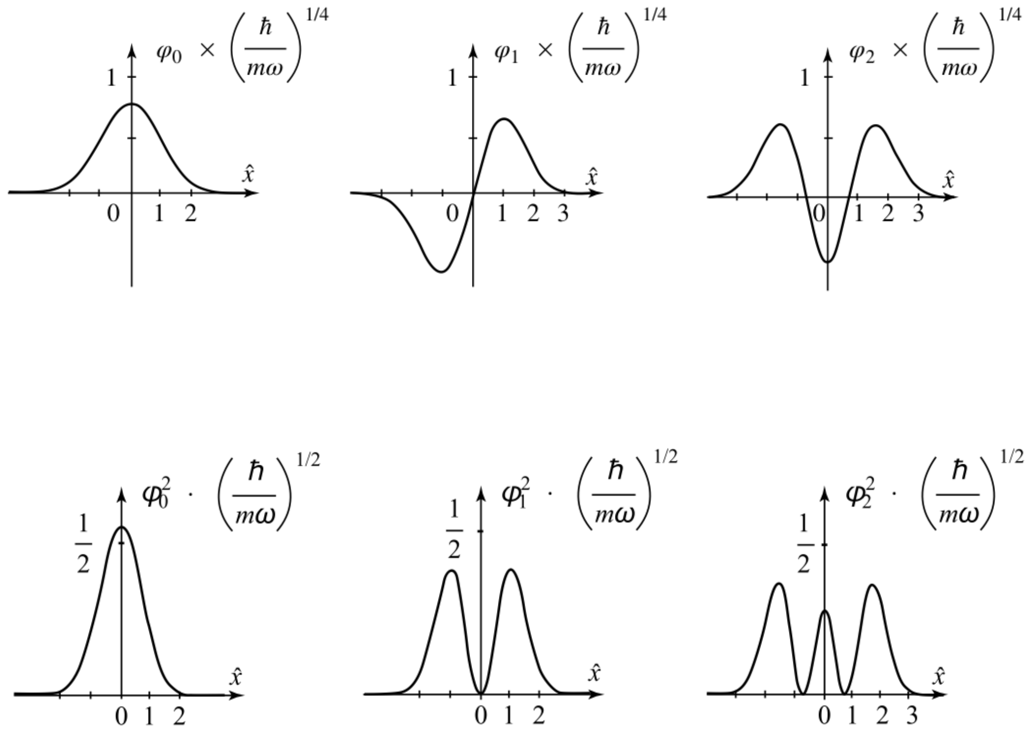
$$H_n(x) = 2x\, H_{n-1}(x) - 2(n-1)\, H_{n-2}(x)$$

$$H_n'(x) = 2x\, H_n(x) - H_{n+1}(x)$$

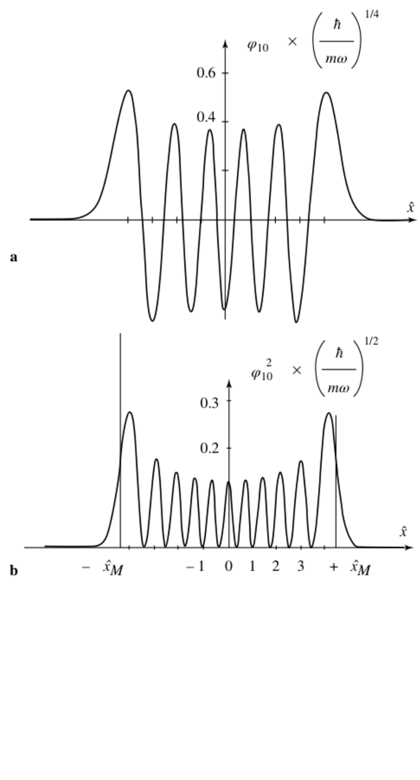
ORTOGONALIDADE:

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

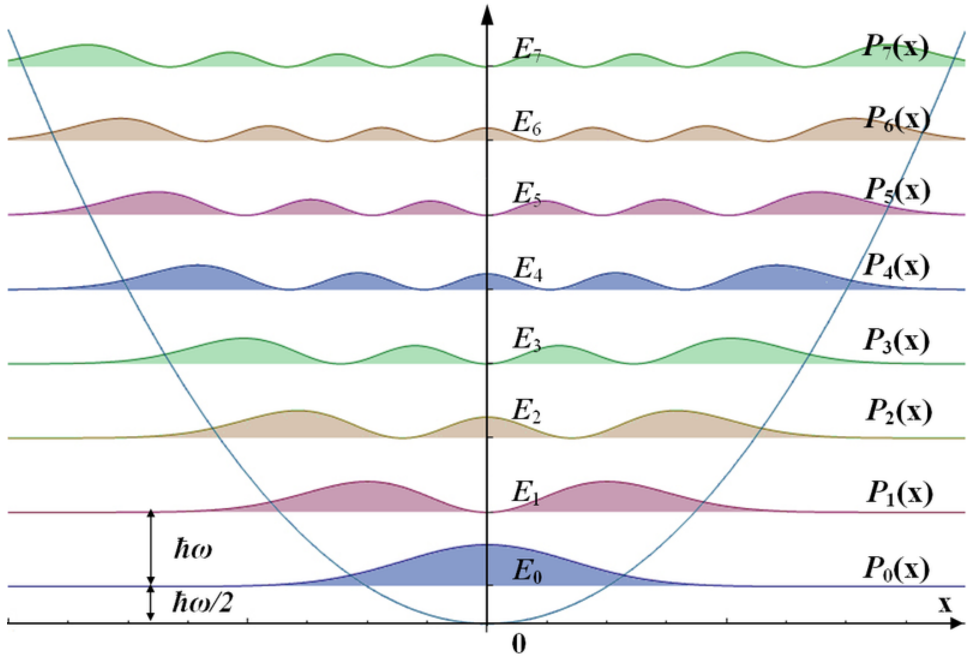
AS FUNÇÕES DE ONDA DOS PRIMEIROS ESTADOS E SUA DENSIDADE DE PROBABILIDADE PODEM SER VISTAS ABAIXO:



NOTE QUE $\underline{n}$ É TAMBÉM O NÚMERO DE NÓS DA FUNÇÃO DE ONDA



É INTERESSANTE OBSERVAR AS DENSIDADES DE PROBABILIDADE PARA DIFERENTES $\underline{n}$ NUMA MESMA FIGURA



NOTEM COMO AS PROBABILIDADES SE ESPALHAM POR REGIÕES MAIORES À MEDIDA QUE $\underline{n}$ CRESCE, POIS:

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

DE FATO, USANDO $n+\frac{1}{2} = \frac{E}{\hbar\omega}$

$$\Delta x = \sqrt{\frac{E}{m\omega^2}}$$

SE USARMOS O RESULTADO CLÁSSICO

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

PODEMOS ESCREVER:

$$\Delta X = \frac{X_M}{\sqrt{2}}$$

O QUE "EXPLICA" POR QUÊ A PROBABILIDADE SE ESPALHA ATÉ OS PONTOS DE RETORNO CLÁSSICOS: $\pm X_M$.

ANALOGAMENTE:

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

USANDO O RESULTADO CLÁSSICO: $P_M = m \omega X_M$

$$\Rightarrow E = \frac{P_M^2}{2m} \Longrightarrow \Delta P = \frac{P_M}{\sqrt{2}}$$

RELAÇÃO ENTRE OS AUTO-ESTADOS E A SOLUÇÃO CLÁSSICA

OS AUTO-ESTADOS DE H SÃO ESTADOS ESTACIONÁRIOS E, POR ISSO, NÃO DEPENDEM DO TEMPO. A SOLUÇÃO CLÁSSICA, POR OUTRO LADO, TEM CARÁTER OSCILATÓRIO. ENTRETANTO, PODE-SE OBTER UMA ANALOGIA ENTRE ELES NO LIMITE $n \gg 1$.

PODEMOS DEFINIR UMA PROBABILIDADE CLÁSSICA DE SE ENCONTRAR A PARTÍCULA ENTRE x E $x+dx$ A PARTIR DA SOLUÇÃO CLÁSSICA:

$$x_{cl}(t) = x_m \cos(\omega t + \varphi)$$

ATRAVÉS DE UMA MÉDIA TEMPORAL SOBRE O PERÍODO:

$$P_{cl}(x) = \frac{1}{T} \int_0^T dt \, \delta\left[x - x_m \cos(\omega t + \varphi)\right]$$

A DELTA DE DIRAC GARANTE QUE HÁ UMA CONTRIBUIÇÃO TODA VEZ QUE $x_{cl}(t) = x$.

DAS PROPRIEDADES DA DELTA DE DIRAC

$$P_{cl}(x) = \frac{1}{T}\int_0^T dt \sum_i \frac{\delta(t-t_i)}{\left|\frac{d}{dt}\left[x_m \cos(\omega t+\varphi)\right]\right|_{t=t_i}}$$

ONDE t_i SÃO AS RAÍZES DO ARGUMENTO DA DELTA:

$$x = x_m \cos(\omega t_i + \varphi)$$

DURANTE UM PERÍODO $\underline{T}$, HÁ DUAS RAÍZES PARA ESSA EQUAÇÃO (UMA NA "IDA", OUTRA NA "VOLTA"). ALÉM DISSO,

$$\frac{d}{dt}\left[x_m \cos(\omega t+\varphi)\right] = -\omega\, x_m \sin(\omega t+\varphi)$$

EM CADA RAIZ $\underline{t_i}$ TEMOS:

$$\cos(\omega t_i + \varphi) = \frac{x}{x_m} \Rightarrow \sin(\omega t_i + \varphi) = \pm\sqrt{1 - \frac{x^2}{x_m^2}}$$

ONDE CADA SINAL CORRESPONDE À "IDA" OU À "VOLTA" (VELOCIDADES OPOSTAS).

PORTANTO:

$$P_{c\ell}(t) = \frac{1}{T}\int_0^T \sum_i \frac{\delta(t-t_i)}{\omega x_M \sqrt{1-\frac{x^2}{x_M^2}}}$$

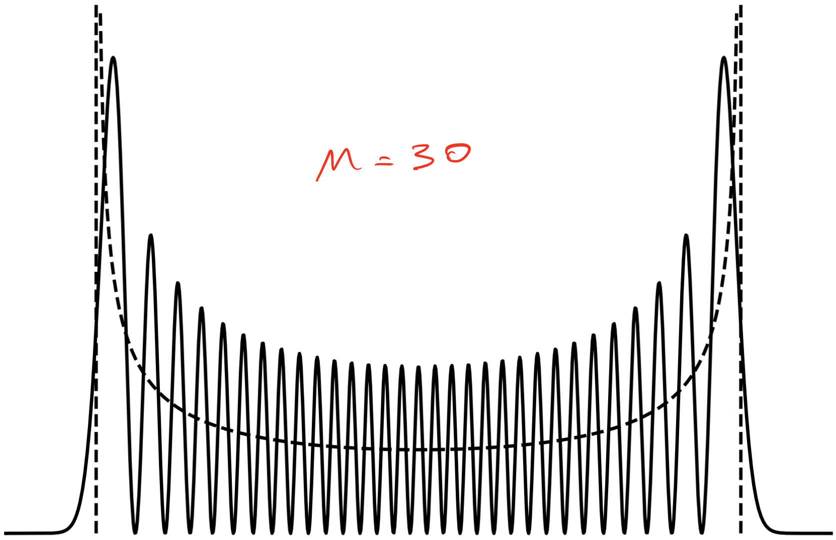
$$= \frac{2}{\omega T}\frac{1}{\sqrt{x_M^2 - x^2}} = \frac{1}{\pi}\frac{1}{\sqrt{x_M^2-x^2}}$$

O FATOR DE 2 VEM DE HAVER DUAS RAÍZES COM CONTRIBUIÇÕES IGUAIS E USAMOS QUE $\omega = \frac{2\pi}{T}$. ESSE RESULTADO PODE SER ESCRITO EM TERMOS DA ENERGIA CLÁSSICA

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

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

PODEMOS AGORA COMPARAR ESSE RESULTADO CLÁSSICO COM A PROBABILIDADE QUÂNTICA PARA $n \gg 1$



A LINHA CONTÍNUA É A DENSIDADE DE PROBABILIDADE QUÂNTICA PARA $n = 30$

$$P_n(x) = |\varphi_{n=30}(x)|^2$$

E A LINHA TRACEJADA É A PROBABILIDADE CLÁSSICA $P_{cl}(x)$ PARA $E = \hbar\omega\left(30 + \frac{1}{2}\right)$.

PODE-SE PERCEBER QUE $P(x)$ OSCILA EM TORNO DE $P_{cl}(x)$ E QUE AMBAS TEM VALORES ALTOS PRÓXIMO AOS PONTOS DE RETORNO.

DEMONSTRAÇÃO MATEMÁTICA DA RELAÇÃO ENTRE $P_{cl}(x)$ E $P_n(x)$ $(n \gg 1)$

A DENSIDADE DE PROBABILIDADE QUÂNTICA É:

$$P_n(x) = |\varphi_n(x)|^2 = \frac{1}{2^n n!} \frac{1}{\sqrt{\pi \lambda^2}} H_n^2\left(\frac{x}{\lambda}\right) e^{-x^2/\lambda^2}$$

USANDO A APROXIMAÇÃO DE STIRLING:

$$\sqrt{\pi}\, 2^n n! \underset{(n \gg 1)}{\simeq} \pi \sqrt{2n} \left(\frac{2n}{e}\right)^n$$

ALÉM DISSO, PARA $n \gg 1$:

$$H_n^2\left(\frac{x}{\lambda}\right) e^{-x^2/\lambda^2} \simeq \left(\frac{2n}{e}\right)^n 2 \cos^2\left(\frac{\sqrt{2n}\, x}{\lambda} - n\frac{\pi}{2}\right) \frac{1}{\left[1 - \frac{x^2}{\lambda^2(2n+1)}\right]^{1/2}}$$

JUNTANDO TUDO:

$$P_n(x) \simeq \frac{2}{\pi \lambda} \frac{1}{\sqrt{2n}} \cos^2\left(\frac{\sqrt{2n}\, x}{\lambda} - n\frac{\pi}{2}\right) \frac{1}{\left[1 - \frac{x^2}{\lambda^2(2n+1)}\right]^{1/2}}$$

MAS: $(2n+1)\lambda^2 = \frac{\hbar(2n+1)}{m\omega} = \frac{2\hbar\omega(n+1/2)}{m\omega^2} = \frac{2E_n}{m\omega^2}$

$$P_n(x) \simeq \frac{2}{\pi} \cos^2\left(\frac{\sqrt{2n}\, x}{\lambda} - n\frac{\pi}{2}\right) \frac{1}{\left[\frac{2E_n}{m\omega^2} - x^2\right]^{1/2}}$$

PODEMOS ESCREVER:

$$P_n(x) = P_{cl}(x)\, 2\cos^2\left(\frac{\sqrt{2n}\, x}{\lambda} - n\frac{\pi}{2}\right)$$

VEMOS, PORTANTO, QUE A DENSIDADE DE PROBABILIDADE QUÂNTICA É IGUAL À SUA CONTRAPARTIDA CLÁSSICA VEZES UMA FUNÇÃO QUE OSCILA FORTEMENTE, COM COMPRIMENTO DE ONDA:

$$\lambda_{osc} = \frac{2\pi}{\sqrt{2n}}\lambda \cong \frac{2\pi}{\sqrt{2n}}\frac{x_n}{\sqrt{2n}} = \frac{\pi}{n}x_n << x_n$$

PODEMOS TOMAR A MÉDIA DA OSCILAÇÃO NUM INTERVALO $\lambda_{osc} << \delta x << x_n$

$$\int_{x-\frac{\delta x}{2}}^{x+\frac{\delta x}{2}} P_n(x)\,dx \cong P_{cl}(x)\int_{x-\frac{\delta x}{2}}^{x+\frac{\delta x}{2}} 2\cos^2\left(\frac{2\pi x}{\lambda_{osc}} - n\frac{\pi}{2}\right)dx$$

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

EVOLUÇÃO TEMPORAL DE VALORES ESPERADOS

UM ESTADO GENÉRICO DO OH1D PODE SER ESCRITO, COMO FUNÇÃO DO TEMPO, NA BASE $\{|\varphi_n\rangle\}$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_n(0)\, e^{-iE_n t/\hbar}\, |\varphi_n\rangle$$

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

$$\boxed{|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i\omega t}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} C_n(0)\, e^{-in\omega t}\, |\varphi_n\rangle}$$

ONDE $C_n(0)$ SÃO OS COEFICIENTES DE EXPANSÃO DO ESTADO EM $t=0$.

O VALOR ESPERADO DE UM OPERADOR QUALQUER $\underline{A}$ NESSE ESTADO PODE SER ESCRITO:

$$\langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle = \sum_{m,n=0}^{\infty} C_m^*(0)\, C_n(0)\, A_{m,n}\, e^{i(m-n)\omega t}$$

ONDE: $A_{m,n} = \langle\varphi_m|A|\varphi_n\rangle$

CLARAMENTE, AS FREQUÊNCIAS DE BOHR SÃO HARMÔNICOS DA FREQUÊNCIA NATURAL:

$$\nu_{m,n} = (m-n)\frac{\omega}{2\pi}$$

A DEPENDÊNCIA TEMPORAL DE $\langle X \rangle$ E $\langle P \rangle$ PODE SER OBTIDA DIRETAMENTE DO TEOREMA DE EHRENFEST:

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{\langle P \rangle}{m}$$

$$\frac{d\langle P \rangle}{dt} = -\langle V'(x) \rangle = -m\omega^2 \langle x \rangle$$

ESSA EQUAÇÕES PODEM SER RESOLVIDAS DIRETAMENTE (LEVANDO UMA NA OUTRA):

$$\langle X \rangle(t) = \langle X \rangle(0) \cos \omega t + \frac{\langle P \rangle(0)}{m\omega} \sin \omega t$$

$$\langle P \rangle(t) = \langle P \rangle(0) \cos \omega t - m\omega \langle x \rangle(0) \sin \omega t$$

NOTEM QUE OS VALORES MÉDIOS QUÂNTICOS (PARA QUAISQUER ESTADOS) EVOLUEM NO TEMPO COMO AS VARIÁVEIS CLÁSSICAS! ESSA É UMA PROPRIEDADE ÚNICA DE POTENCIAIS $V(x) = \lambda X^n$ PARA $n = 0, 1$ OU 2 MAS NENHUM OUTRO CASO! (VER PARÁGRAFO D-1-d-γ DO CAPÍTULO 3).