O que acontece com os kets base nas duas versões?
Seja um observável A com base completa $\{|a'\rangle\}$,

$$A|a'\rangle = a'|a'\rangle \qquad |\alpha\rangle$$

Na <u>versão de Schrödinger</u>, A <u>não</u> varia no tempo, de maneira que a base dos kets $\{|a'\rangle\}$ está <u>fixa</u> (ao contrário dos kets estados, que variam no tempo).

<u>Versão de Heisenberg</u>: precisamos estudar uma equação de autovalores para um operador que depende do tempo:

$$A^{(H)}(t) = \mathcal{U}^{\dagger}(t)A(0)\,\mathcal{U}(t)$$

$A^{(H)}(t)\,|?\rangle = a'\,|?\rangle$? Tomemos a equação de autovalores acima:

$$\mathcal{U}^{\dagger}\left(A(0)\,|a'\rangle\right) = \mathcal{U}^{\dagger}\left(a'|a'\rangle\right) = a'\left(\mathcal{U}^{\dagger}|a'\rangle\right)$$
$$= (\underbrace{\mathcal{U}^{\dagger}A(0)\cdot\mathcal{U}}_{A^{(H)}})\left(\mathcal{U}^{\dagger}|a'\rangle\right)$$

Assim obtemos:

$$A^{(H)}(t)\left(\mathcal{U}^{\dagger}|a'\rangle\right) = a'\left(\mathcal{U}^{\dagger}|a'\rangle\right)$$

Se queremos manter o significado físico de autovalores e auto-kets, então $\{\mathcal{U}^{\dagger}|a'\rangle\}$ deve ser usado como a base dos kets na versão de Heisenberg. Chamamos esta base como:

$$|a',t\rangle_H = \mathcal{U}^{\dagger}(t)|a'\rangle$$

Esta base se movimenta no tempo em sentido contrário aos kets-estados da versão de Schrödinger:

$$\partial_t |a',t\rangle_H = \partial_t \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t\right)|a'\rangle \right]$$

$$= \frac{i}{\hbar}\mathcal{H}\,\mathcal{U}^{\dagger}(t)|a'\rangle = \frac{i}{\hbar}\mathcal{H}\,|a',t\rangle_H$$

$$\boxed{i\hbar\partial_t |a't\rangle_H = -\mathcal{H}\,|a't\rangle_H}$$

Os autovalores são constantes no tempo. A representação espectral para $A^{(H)}(t)$ é:

$$A^{(H)}(t) = \sum_{a'} |a',t\rangle_H\, a'\, {}_H\langle a',t|$$

$$= \sum_{a'} \mathcal{U}^{\dagger}(t)|a'\rangle a' \langle a|\,\mathcal{U}(t)$$

$$= \mathcal{U}^{\dagger}(t)\left(\sum_{a'} |a'\rangle a' \langle a'|\right)\mathcal{U}(t)$$

$$= \mathcal{U}^{\dagger}(t)\, A^{(S)}\, \mathcal{U}(t)$$

Consideremos os coeficientes lineares de um ket-estado nas duas versões:

$$|\alpha, t_0=0, t\rangle_S = \mathcal{U}(t)|\alpha\rangle$$

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle = |\alpha, t_0=0\rangle$$

$$|\alpha, t_0=0, t\rangle_S = \sum_{a'} |a'\rangle \underbrace{\langle a'|\mathcal{U}(t)|\alpha\rangle}_{C_{a'}^{(S)}(t)}$$

$$|\alpha\rangle_H = \sum_{a'} |a', t\rangle_H \, \underbrace{{}_H\langle a' t|\alpha\rangle_H}_{C_a^{(H)}(t)}$$

$$C_a^{(H)}(t) = {}_H\langle a' t|\alpha\rangle_H = \left\{\langle a'|\mathcal{U}(t)\right\}|\alpha, t_0=0\rangle$$

$$= \langle a'|\left\{\mathcal{U}(t)|\alpha, t_0=0\rangle\right\}$$

$$= \langle a'|\left\{\mathcal{U}(t)|\alpha\rangle\right\} = C_{a'}^{(S)}(t) .$$

Em particular, a função de onda

$$\psi_\alpha(\vec{x}', t) \equiv \langle \vec{x}'|\alpha, t\rangle$$

pode ser interpretada de duas maneiras:

i) versão de Schrödinger:

$$\psi_\alpha(\vec{x}, t) = \langle \vec{x}'|\left\{\mathcal{U}(t)|\alpha, t_0=0\rangle\right\}$$

ii) versão de Heisenberg:

$$\psi_\alpha(\vec{x},t) = \{\langle \vec{x}'|\,\mathcal{U}(t)\}\,|\alpha, t_0=0\rangle$$

Tabela Resumo

Objeto	Versão de Schrödinger	Versão de Heisenberg
ket-estado	móvel	estacionário
Observável	estacionário	móvel
ket-base	estacionario	móvel em sentido contrário

Amplitude de transição:

Sejam A e B dois observáveis com bases $\{|a'\rangle\}$ e $\{|b'\rangle\}$ respectivamente. Assumamos que um sistema físico é preparado inicialmente $(t=0)$ em um autoestado $|a'\rangle$ de A. O estado evolue no tempo. Qual é a amplitude de probabilidade, no tempo t, de que o sistema seja encontrado em um autoestado $|b'\rangle$ de B, com autovalor b'? ("Amplitude de transição")

i) Versão de Schrödinger: As bases $\{|a'\rangle\}$ e $\{|b'\rangle\}$ são estacionárias:

$$\Big|\underbrace{\langle b'|}_{\text{bra da base}}\,\underbrace{\{\mathcal{U}(t)|a'\rangle\}}_{\text{ket-estado}}\Big|^2 = P_{a'\to b'}(t)$$

ii) <u>Versão de Heisenberg</u>: As bases evoluem no tempo como $\{\mathcal{U}^\dagger|a'\rangle\}$ e $\{\mathcal{U}^\dagger|b'\rangle\}$. Os kets estado são estacionários

$$P_{a'\to b'} = \left|\left\{\underbrace{\langle b'|}_{\text{bra da base}}(\mathcal{U}^\dagger)^\dagger\right\}\underbrace{|a'\rangle}_{\text{ket-estado}}\right|^2$$

$$= \left|\left\{\langle b'|\mathcal{U}(t)\right\}|a'\rangle\right|^2,$$

de maneira que a "Amplitude de Transição" é a mesma nas duas versões

§ OSCILADOR HARMÔNICO

É um dos problemas mais importantes em MQ. Tem aplicações em diversos ramos da Física Moderna — espectroscopia molecular, estado sólido, óptica quântica, teoria quântica de campo, etc... Um problema importante é a quantização de um campo puro de radiação eletromagnética. O quantum, chamado fóton, foi introduzido por Einstein para explicar o efeito fotoelétrico. O problema da radiação do corpo negro foi tratado por Planck assumindo a quantização da energia de osciladores harmônicos associados com a radiação.

O problema do oscilador harmônico aparece freqüentemente em problemas de muitos corpos. Na aproximação linear ou harmônica, o problema pode ser tratado como um conjunto de osciladores desacoplados, através da transformação que leva às chamadas COORDENADAS NORMAIS.

Seja o caso unidimensional, com coordenada q e momentum p. O Hamiltoniano do Oscilador harmônico é escrito como

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2 \, , \qquad (1)$$

onde ω é a freqüência natural do oscilador e os observáveis (p, q) satisfazem a relação de comutação:

$$[q, p] = i\hbar \qquad (2)$$

É costume introduzir uma outra representação, chamada representação de NÚMERO, mediante um novo conjunto de operadores $(a, a^{\dagger})$ chamados OPERADORES de DESTRUIÇÃO e CRIAÇÃO:

$$\begin{cases} \hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}\hat{q} + i(m\hbar\omega)^{-1/2}\hat{p}\right], & (3) \\ \hat{a}^{\dagger} \equiv (\hat{a})^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}\hat{q} - i(m\hbar\omega)^{-1/2}\hat{p}\right]. & (4) \end{cases}$$

Vejamos que tipo de relações de conmutação eles satisfazem

$$[a, a^{\dagger}] = \frac{1}{2}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)[\hat{q}, \hat{p}] + \frac{1}{2}\left(\frac{i}{\hbar}\right)[\hat{p}, \hat{q}] = \frac{i}{\hbar}[\hat{p}, \hat{q}] = 1.$$

Isto é

$$[a, a^{\dagger}] = 1. \qquad (5)$$

Vejamos como pode ser escrito o Hamiltoniano em termo destes operadores

$$\hat{a} + \hat{a}^{\dagger} = \sqrt{2}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}\hat{q}, \qquad \hat{a} - \hat{a}^{\dagger} = \sqrt{2}\, i\, (m\hbar\omega)^{-1/2}\hat{p}$$

Daí as transformações inversas são

$$\begin{cases} \hat{q} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2}(\hat{a} + \hat{a}^{\dagger}), \\ \hat{p} = \frac{1}{i\sqrt{2}}(m\hbar\omega)^{1/2}(\hat{a} - \hat{a}^{\dagger}). \end{cases} \qquad (6)$$

Daí temos que

$$\hat{p}^2 = -\frac{1}{2} m\hbar\omega (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2 = -\frac{1}{2} m\hbar\omega (\hat{a}^2 - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^{\dagger 2})$$

$$m^2\omega^2 \hat{q}^2 = m^2\omega^2 \frac{1}{2} \frac{\hbar}{m\omega} (\hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + a^\dagger a + a^{\dagger 2})$$

Formando o Hamiltoniano obtemos

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \frac{1}{2} \hbar m\omega (\cancel{\hat{a}^2} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + a^\dagger a + \cancel{a^{\dagger 2}} - \cancel{\hat{a}^2} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} - \cancel{\hat{a}^{\dagger 2}})$$

$$= \frac{1}{4}\hbar\omega \; 2(\underline{a a^\dagger} + a^\dagger a)$$

Usando as relações de commutação obtemos.

$$a a^\dagger = 1 + a^\dagger a$$

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

$$\boxed{\hat{H} = \hbar\omega(\underline{a^\dagger a} + \tfrac{1}{2})} \qquad (7)$$

Ordem normal

Por razões que justificaremos depois definimos o operador NÚMERO por

Def

$$\boxed{\hat{N} \equiv a^\dagger a} \qquad (8)$$

Então
$$\hat{H} = \hbar\omega (\hat{N} + \tfrac{1}{2})$$

$$[\hat{H}, \hat{N}] = 0$$

Em vista que $\hat{H}$ e $\hat{N}$ comutam, existe um conjunto completo de funções próprias simultâneas. Chamando por $\{|\nu\rangle\}$ este conjunto, de maneira que

$$\hat{N}|\nu\rangle = \nu|\nu\rangle$$

obtemos

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

Os autovalores do Hamiltoniano são

$$\boxed{E_\nu = \hbar\omega(\nu+1/2)} \qquad (9)$$

Pergunta: Qual é a natureza do autovalor ν?

Calculemos os comutadores $[N, a]$, $[N, a^\dagger]$.

$$\left.\begin{array}{l} \text{a) } [N, a] = [a^\dagger a, a] = [a^\dagger, a]\, a = -a \,; \\ \text{b) } [N, a^\dagger] = [a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger [a, a^\dagger] = a^\dagger. \end{array}\right\} (*)$$

Vejamos o significado das relações $(*)$:

a') $N(a|\nu\rangle) = (aN - a)\,|\nu\rangle =$

$$= (\nu - 1)(a|\nu\rangle),$$

resulta que $a|\nu\rangle$ é autoket de N com autovalor $(\nu-1)$;

b') $N(a^\dagger|\nu\rangle) = (a^\dagger N + 1)|\nu\rangle = (\nu+1)(a^\dagger|\nu\rangle)$,

resulta que $a^\dagger|\nu\rangle$ é autoket de N com autovalor $(\nu+1)$.

Daí que os operadores $(a, a^\dagger)$ são chamados de operadores 'escadas' $\longrightarrow$ depois, chamaremos de 'destruição' e 'criação'.

Propriedades dos autovalores $\{\nu\}$

i) são reais não negativos, $\nu \geqslant 0$.

Dem. Seja $a|\nu\rangle \equiv |\nu'\rangle$.

Temos $\langle \nu'|\nu'\rangle \geqslant 0$, propriedade da métrica.

Obtemos

$$0 \leq \langle \nu' | \nu' \rangle = \langle \nu | a^{\dagger} a | \nu \rangle = \langle \nu | N | \nu \rangle =$$

$$= \nu \langle \nu | \nu \rangle = \nu .$$

Resultado: $\boxed{\nu \geqslant 0}$, não negativo. (10)

Falamos que o operador $N = a^{\dagger} a$ é 'positivo definido' ou nulo.

ii) O espectro de valores de ν é formado pelos números inteiros não negativos:

$$\nu = 0, 1, 2, \ldots, n, \ldots \longrightarrow \infty$$

▶ Dem Note que a seqüência sucessiva de aplicar o operador 'a' tem um limite, pois devemos respeitar o teorema $\nu \geqslant 0$, para os autovalores do operador número N:

$$a|\nu\rangle, \; a^2|\nu\rangle, \ldots, a^p|\nu\rangle .$$

Temos

$$N\left(a^p|\nu\rangle\right) = (\nu - p)\left(a^p|\nu\rangle\right)$$

A única maneira de evitar o espectro negativo é, que para algum 'p' inteiro, seja

$$\nu - p = 0 ,$$

de maneira que $\boxed{\nu = p}$, inteiro não negativo

O estado para o qual isso acontece é chamado de VÁCUO, com símbolo

$$|0\rangle ,$$

e necessariamente

$$\boxed{a|0\rangle = 0 \quad , \; N|0\rangle = 0} \; ;$$

iii) como o operador N é hermiteano, seus auto-kets são ortogonais:

seja $\nu' \neq \nu$, então:

$$\langle \nu | N | \nu' \rangle = \nu' \langle \nu | \nu' \rangle = \langle \nu | N | \nu' \rangle =$$

$$= \nu \langle \nu | \nu' \rangle$$

obtemos

$$(\nu' - \nu) \langle \nu | \nu' \rangle = 0 \, .$$

Como $\nu' \neq \nu \implies \langle \nu | \nu' \rangle = 0$

iv) Seja $a^{+}|\nu\rangle \equiv |\tilde{\nu}\rangle$. Temos:

$$a^{+}|\nu\rangle = \sqrt{\nu+1}\, |\nu+1\rangle$$

<u>Dem</u>

$$\langle \tilde{\nu} | \tilde{\nu} \rangle = \big(\langle \nu | a\big)\big(a^{+} | \nu \rangle\big) = \langle \nu | (a^{+}a + 1) | \nu \rangle$$

$$= \langle \nu | (N+1) | \nu \rangle = (\nu + 1)$$

Sabemos também que

$$N|\widetilde{\nu}\rangle = N(a^{\dagger}|\nu\rangle) = (\nu+1)|\widetilde{\nu}\rangle$$

e como $\sqrt{\langle\widetilde{\nu}|\widetilde{\nu}\rangle} = \sqrt{\nu+1}$, obtemos, exceto por uma fase que

$$|\widetilde{\nu}\rangle = a^{\dagger}|\nu\rangle = \sqrt{\nu+1}\,|\nu+1\rangle$$

A mesma demonstração se aplica para $a|\nu\rangle \equiv |\tilde{\nu}\rangle$

$$N|\tilde{\nu}\rangle = (\nu-1)|\tilde{\nu}\rangle$$

e

$$\langle\tilde{\nu}|\tilde{\nu}\rangle = \langle\nu|a^{\dagger}a|\nu\rangle = \nu \Rightarrow \sqrt{\langle\tilde{\nu}|\tilde{\nu}\rangle} = \sqrt{\nu}$$

Resulta que, exceto por uma fase:

$$a|\nu\rangle = \sqrt{\nu}\,|\nu-1\rangle.$$

Esta relação satifaz de imediato $a|0\rangle = 0$.

<u>Resumo</u>:

$$\boxed{\begin{gathered} a|\nu\rangle = \sqrt{\nu}\,|\nu-1\rangle, \\ a^{\dagger}|\nu\rangle = \sqrt{\nu+1}\,|\nu+1\rangle, \\ a|0\rangle = 0, \\ [a, a^{\dagger}] = 1. \end{gathered}} \qquad (11)$$

v) O 'vácuo' $|0\rangle$ corresponde ao estado fundamental, com energia:

$$\boxed{E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega .} \qquad (12)$$

O vácuo é caraterizado por:

$$a|0\rangle = 0 \;,\; N|0\rangle = 0 \;.$$

vi) A partir do 'vácuo' podemos construir todo o espectro, aplicando o operador de 'criação' a^+:

$$a^+|0\rangle = \sqrt{1}\;|1\rangle$$

$$a^+|1\rangle = \sqrt{2}\;|2\rangle = a^+\left(\frac{a^+}{\sqrt{1}}\;|0\rangle\right)$$

$$\Rightarrow |2\rangle = \frac{(a^+)^2}{\sqrt{1\cdot 2}}\;|0\rangle$$

Por indução obtemos:

$$(a^+)^n\,|0\rangle = \sqrt{n!}\;|n\rangle$$

Resultado:

$$\boxed{|n\rangle = \frac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}}\;|0\rangle .} \qquad (13)$$

Agora vamos enunciar um método alternativo de interpretar o problema. Da relação (9) para a energia dos estados estacionários, vemos que os níveis são equidistantes, com

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$$

sendo o espaçamento entre níveis sucessivos. Podemos então associar uma 'partícula' ao pacote de energia $\hbar\omega$. A passagem de E_n para E_{n+1} é interpretada como o processo de criação de uma partícula de energia $\hbar\omega$. Estas 'partículas fictícias' são chamadas de Excitações Elementares.

Nesta linguagem, descrevemos um estado excitado $|n\rangle$ do OH, como um sistema de $\underline{n}$ partículas idênticas criadas sobre o Vácuo:

Estado $\vert n\rangle$ do OH com energia $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$	$\Longleftrightarrow$	Sistema de $\underline{n}$ excitações elementares sobre o vácuo $\vert 0\rangle$ $E_n = E_0 + (\text{número de excitações}) \times \hbar\omega$ $= \frac{1}{2}\hbar\omega + n\hbar\omega$ $= (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$