Aula 11 — Autoestados de H na base $\{|x\rangle\}$

Começamos com o estado fundamental $|0\rangle$.

Sabemos que

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

$$\Rightarrow \quad \boxed{a|0\rangle = 0}$$

Se projetamos $a|0\rangle$ na base de posição:

$$\langle x'|a|0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\langle x'|X + \frac{iP}{m\omega}|0\rangle = 0$$

$$\Rightarrow \quad \langle x'|X|0\rangle + \frac{i}{m\omega}\langle x'|P|0\rangle = 0$$

Mas $\quad \langle x'|X = \langle x'|x'$

e também

$$\langle x'|P|0\rangle = -i\hbar\frac{d}{dx'}\langle x'|0\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{x' \langle x'|0\rangle + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d\langle x'|0\rangle}{dx'} = 0}$$

onde $\langle x'|0\rangle$ é a função de onda do estado fundamental na base $\{|x'\rangle\}$.

$$\langle x'|0\rangle = \psi_0(x')$$

$$\Rightarrow$$

$$\Rightarrow \left\{ x' \psi_0(x') + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d\psi_0(x')}{dx'} = 0 \right\}$$

Resolvendo a equação diferencial:

$$\frac{d\psi_0(x')}{dx'} = -\frac{x' \psi_0(x')}{(\hbar/m\omega)}$$

$$\Rightarrow \frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{x'}{(\hbar/m\omega)} dx'$$

$$\Rightarrow \ln \psi_0(x) = -\frac{x^2}{2(\hbar/m\omega)} + \text{constante}$$

$$\Rightarrow \quad \psi_0(x) = N\, e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}$$

onde N é uma constante de integração e definimos

$$x_0^2 \equiv \frac{\hbar}{m\omega}$$

Para obter N impomos a normalização

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0(x)|^2\, dx = 1 = |N|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{x_0^2}}\, dx$$

$$\Rightarrow \quad |N|^2 x_0 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^3}{x_0^2}}\, \frac{dx}{x_0} = |N|^2 x_0 \sqrt{\pi} = 1$$

$$\Rightarrow \quad N = \frac{1}{(\pi x_0^2)^{1/4}} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}}$$

função de onda do estado fundamental na base de posição. <u>É uma Gaussiana</u>

Para obter as funções de onda dos estados exitados lembramos que

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$$

Então

$$\langle x'|n\rangle = \langle x'|\frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\langle x'|\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{n/2}\left(X-\frac{iP}{m\omega}\right)^n|0\rangle$$

$$\langle x'|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{n/2}\langle x'|\left(X-\frac{iP}{m\omega}\right)^n|0\rangle$$

$$\langle x'|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{n/2}\left(x'-\frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx'}\right)^n\langle x'|0\rangle$$

Definindo

$$y \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x'$$

$$\Rightarrow \langle x'|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\,\frac{1}{2^{n/2}}\left(y-\frac{d}{dy}\right)^n\langle x'|0\rangle$$

onde usamos que $\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,\frac{\hbar}{m\omega}\,\frac{d}{dx'} = \frac{d}{dy}$

Então:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{2^{n/2}} \left(y - \frac{d}{dy} \right)^n \psi_0(x)$$

com $y = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x$

Lembrando $\psi_0(x)$:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{2^{n/2}} \left(y - \frac{d}{dy} \right)^n \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-y^2/2}$$

Isto pode ser rescrito em termos dos polinômios de Hermite definidos por

$$H_n(y) = e^{y^2/2} \left(y - \frac{d}{dy} \right)^n e^{-y^2/2}$$

$$\Rightarrow \psi_n(y) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{n!\,2^n}} e^{-y^2/2} H_n(y)$$

ou

$$\boxed{\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{n!\,2^n}}\, e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\, H_n\left[\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x\right]}$$

Os polinómios de Hermite satisfazem

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(y)\, H_{n'}(y)\, e^{-y^2/2}\, dy = \delta_{n,n'} \sqrt{\pi}\, 2^n\, n!$$

$\Longleftrightarrow$ ortonormalidade dos $\psi_n(x)$! (listá)

e as relações recursivas

$$\begin{cases} H_n'(y) = 2n\, H_{n-1}(y) \\ H_{n+1}(y) = 2y\, H_n(y) - 2n\, H_{n-1}(y) \end{cases}$$

Exemplos de polinómios de Hermite

$H_0(y) = 1$

$H_1(y) = 2y$

$H_2(y) = -2(1 - 2y^2)$

$H_3(y) = -12\left(y - \frac{2}{3}y^3\right)$

$H_4(y) = 12\left(1 - 4y^2 + \frac{4}{3}y^4\right)$

⋮

É interessante calcular os valores esperados de X^2 e P^2 no estado fundamental.
Isto é muito fácil no formalismo na base de autoestados de energia.

$$X^2 = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)(a^\dagger + a)^2$$

$$= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)\left\{a^\dagger a^\dagger + aa + a^\dagger a + aa^\dagger\right\}$$

MAS

$$\langle 0|X^2|0\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\langle 0|a^\dagger a^\dagger + aa + a^\dagger a + aa^\dagger|0\rangle$$

só esse contribue!

$$= \frac{\hbar}{2m\omega}\langle 0|aa^\dagger|0\rangle$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega}\langle 0|1 + a^\dagger a|0\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle X^2\rangle_0 = \frac{\hbar}{2m\omega}}$$

$$P^2 = \left(i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\right)^2 (a^\dagger - a)^2$$

$$= -\left(\frac{m\omega\hbar}{2}\right)(a^\dagger a^\dagger + aa - a^\dagger a - aa^\dagger)$$

só esse termo contribue

$$\Rightarrow \boxed{\langle 0|P^2|0\rangle = \frac{m\omega\hbar}{2} = \langle P^2\rangle_0}$$

Mas sabemos que no $|0\rangle$

$$\langle X\rangle_0 = 0 = \langle P\rangle_0$$

$$\Rightarrow \langle(\Delta X)^2\rangle_0 = \langle X^2\rangle_0 - \langle X\rangle_0^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

e

$$\langle(\Delta P)^2\rangle_0 = \langle P^2\rangle_0 - \langle P\rangle_0^2 = \frac{m\omega\hbar}{2}$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle(\Delta X)^2\rangle_0 \langle(\Delta P)^2\rangle_0 = \frac{\hbar^2}{4}}$$

$\Rightarrow |0\rangle$ é um estado de incerteza mínima

Mas isso é consistente com $\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$

que é uma Gaussiana.

Os estados excitados ($n>0$) não são Gaussianos e portanto não tem incerteza mínima. Calculando para $n>0$

$\langle n|X^2|n\rangle$, $\langle n|P^2|n\rangle$ obtemos

$$\boxed{\langle(\Delta X)^2\rangle_n \, \langle(\Delta P)^2\rangle_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)^2 \hbar^2}$$

Descrição de Schrödinger vs. Heisenberg

A evolução temporal do sistema (até agora) é dada pela evolução temporal do estado $|\psi(t)\rangle$ através da equação de Schrödinger.

Isto chama-se de <u>descrição de Schrödinger</u>

Mas é possível descrever a evolução temporal como evolução dos <u>operadores</u> e não dos estados.

Esta descrição é a de <u>Heisenberg</u>.

Para obter as relações entre elas lembramos que

$$|\psi(t)\rangle = U(t)\,|\psi(0)\rangle$$

onde o operador evolução é dado por

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t}$$

Então, se calculamos o valor esperado de um operador Θ no tempo t

$$\langle\psi(t)|\Theta|\psi(t)\rangle = \langle\Theta\rangle_{(t)}$$

Ele pode ser escrito como

$$\langle \mathcal{O} \rangle_{(t)} = \langle \psi(t) | \mathcal{O} | \psi(t) \rangle$$

$$= \langle \psi_{(0)} | U^\dagger_{(t)} \mathcal{O} \, U_{(t)} | \psi_{(0)} \rangle$$

Podemos então definir o operador na descrição de Heisenberg como uma função do tempo

$$\boxed{\mathcal{O}^{(H)}_{(t)} \equiv U^\dagger_{(t)} \, \mathcal{O}^{(S)} \, U_{(t)}}\,, \quad \mathcal{O}^{(S)}$$ operador na descrição de Schrödinger (independente de t)

Obviamente, vemos que

$$\mathcal{O}^{(H)}_{(0)} = \mathcal{O}^{(S)}$$

Evolução temporal de operadores de Heisenberg

$$\frac{d\,\mathcal{O}^{(H)}_{(t)}}{dt} = \frac{\partial U^\dagger_{(t)}}{\partial t} \mathcal{O}^{(S)} U_{(t)} + U^\dagger_{(t)} \mathcal{O}^{(S)} \frac{\partial U_{(t)}}{\partial t}$$

onde assumimos que $\mathcal{O}^{(S)}$ não depende de t explicitamente

Mas

$$\frac{\partial U_{(t)}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} e^{-\frac{i}{\hbar} H t} = -\frac{i}{\hbar} H \, U_{(t)}$$

$$\rightarrow \quad \frac{\partial U^\dagger_{(t)}}{dt} = \frac{i}{\hbar} U^\dagger_{(t)} H$$

Então temos

$$\frac{d\mathcal{O}^{(H)}_{(t)}}{dt} = \frac{i}{\hbar} U^{\dagger}_{(t)} H \mathcal{O}^{(S)} U_{(t)} - \frac{i}{\hbar} U^{\dagger}_{(t)} \mathcal{O}^{(S)} H U_{(t)}$$

$$\frac{d\mathcal{O}^{(H)}_{(t)}}{dt} = \frac{i}{\hbar} U^{\dagger}_{(t)} H U_{(t)} U^{\dagger}_{(t)} \mathcal{O}^{(S)} U_{(t)}$$

$$- \frac{i}{\hbar} U^{\dagger}_{(t)} \mathcal{O}^{(S)} U_{(t)} U^{\dagger}_{(t)} H U_{(t)}$$

Mas $U^{\dagger}_{(t)} H U_{(t)} = H$

e $U^{\dagger}_{(t)} \mathcal{O}^{(S)} U_{(t)} = \mathcal{O}^{(H)}_{(t)}$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d\mathcal{O}^{(H)}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, \mathcal{O}^{(H)}]}$$

A evolução temporal de um operador na descrição de Heisenberg é definida pelo seu comutador com o hamiltoniano.

Evolução Temporal do Oscilador Harmônico

Se X e P são dados na representação de Heisenberg:

$$\frac{dP}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, P]$$

$$= \frac{i}{\hbar}\left[\frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2, P\right]$$

$$= \frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}m\omega^2[X^2, P] = \frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}m\omega^2\left\{X[X,P] + [X,P]X\right\}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{dP}{dt} = -m\omega^2 X}$$

Do mesmo jeito,

$$\frac{dX}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, X] = \frac{i}{\hbar}\frac{1}{2m}[P^2, X] = \frac{i}{\hbar}\frac{1}{2m}\left\{P[P,X] + [P,X]P\right\}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{dX}{dt} = \frac{P}{m}}$$

$\Rightarrow$ equações de Heisenberg para X e P.

$$\frac{da}{dt} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \frac{d}{dt}\left(X + \frac{i}{m\omega} P\right)$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\frac{dX}{dt} + \frac{i}{m\omega}\frac{dP}{dt}\right)$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\frac{P}{m} - i\omega X\right)$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\frac{i}{m}\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(a^\dagger - a) - i\omega\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^\dagger + a)\right)$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(i\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2m}}(a^\dagger - a) - i\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2m}}(a^\dagger + a)\right)$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{da}{dt} = -i\omega a}$$

Analogamente, obtemos

$$\boxed{\frac{da^\dagger}{dt} = i\omega a^\dagger}$$

$$\Rightarrow \boxed{\begin{aligned} a(t) &= a(0)\, e^{-i\omega t} \\ a^\dagger(t) &= a^\dagger(0)\, e^{i\omega t} \end{aligned}}$$

Comentários

- $N = a^\dagger a$ (e ~~portanto~~ H) são mesmo operadores independentes do tempo, mesmo utilizando a representação de Heisenberg

- $X(t)$ e $P(t)$ oscilam?

Para ver isso escrevemos

$$\begin{cases} a(t) = \sqrt{\dfrac{m\omega}{2\hbar}}\left(X(t) + \dfrac{i}{m\omega}P(t)\right) = a(0)e^{-i\omega t} \\ \text{e} \\ a^\dagger(t) = \sqrt{\dfrac{m\omega}{2\hbar}}\left(X(t) - \dfrac{i}{m\omega}P(t)\right) = a^\dagger(0)e^{i\omega t} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} a(t) = \sqrt{\dfrac{m\omega}{2\hbar}}\left(X(0)e^{-i\omega t} + \dfrac{i}{m\omega}P(0)e^{-i\omega t}\right) \\ a^\dagger(t) = \sqrt{\dfrac{m\omega}{2\hbar}}\left(X(0)e^{i\omega t} - \dfrac{i}{m\omega}P(0)e^{i\omega t}\right) \end{cases}$$

o que resulta em

$$\begin{cases} X(t) = X(0)\cos\omega t + \dfrac{P(0)}{m\omega}\operatorname{sen}\omega t \\ P(t) = -m\omega X(0)\operatorname{sen}\omega t + P(0)\cos\omega t \end{cases}$$

$\Rightarrow$ Parece que $X(t)$ e $P(t)$ oscilam!

$X(t)$ e $P(t)$ oscilam como um OH clássico?

Podemos concluir que então $\langle X \rangle$ e $\langle P \rangle$ também oscilam como as variáveis clássicas x e p! Mas devemos lembrar que para autoestados de H

$$\left.\begin{aligned} \langle n|X(t)|n\rangle &= 0 \\ \langle n|P(t)|n\rangle &= 0 \end{aligned}\right] \text{ Dado que } \langle n|X(0)|n\rangle = 0 = \langle n|P(0)|n\rangle$$

Também está em acordo com o fato que o valor esperado não muda com o tempo se é calculado num estado estacionário, tal como $|n\rangle$.

Para observar oscilações similares ao oscilador clássico devemos considerar $\langle X \rangle$ e $\langle P \rangle$ numa superposição de estados estacionários

Por exemplo

$$|\alpha\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$$

$$\Rightarrow \langle \alpha|X(t)|\alpha\rangle \text{ oscila (lista)}$$