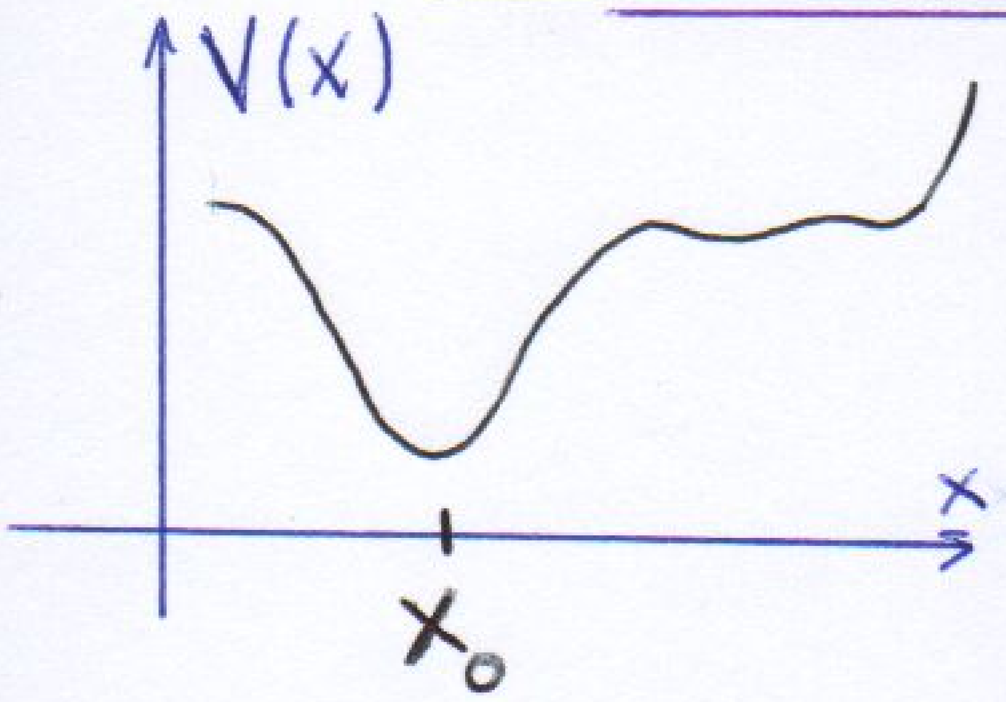
Oscilador Harmônico



p/ $x \sim x_0$

$$V(x) \simeq V(x_0) + V'(x_0)(x-x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)(x-x_0)^2 + \cdots$$

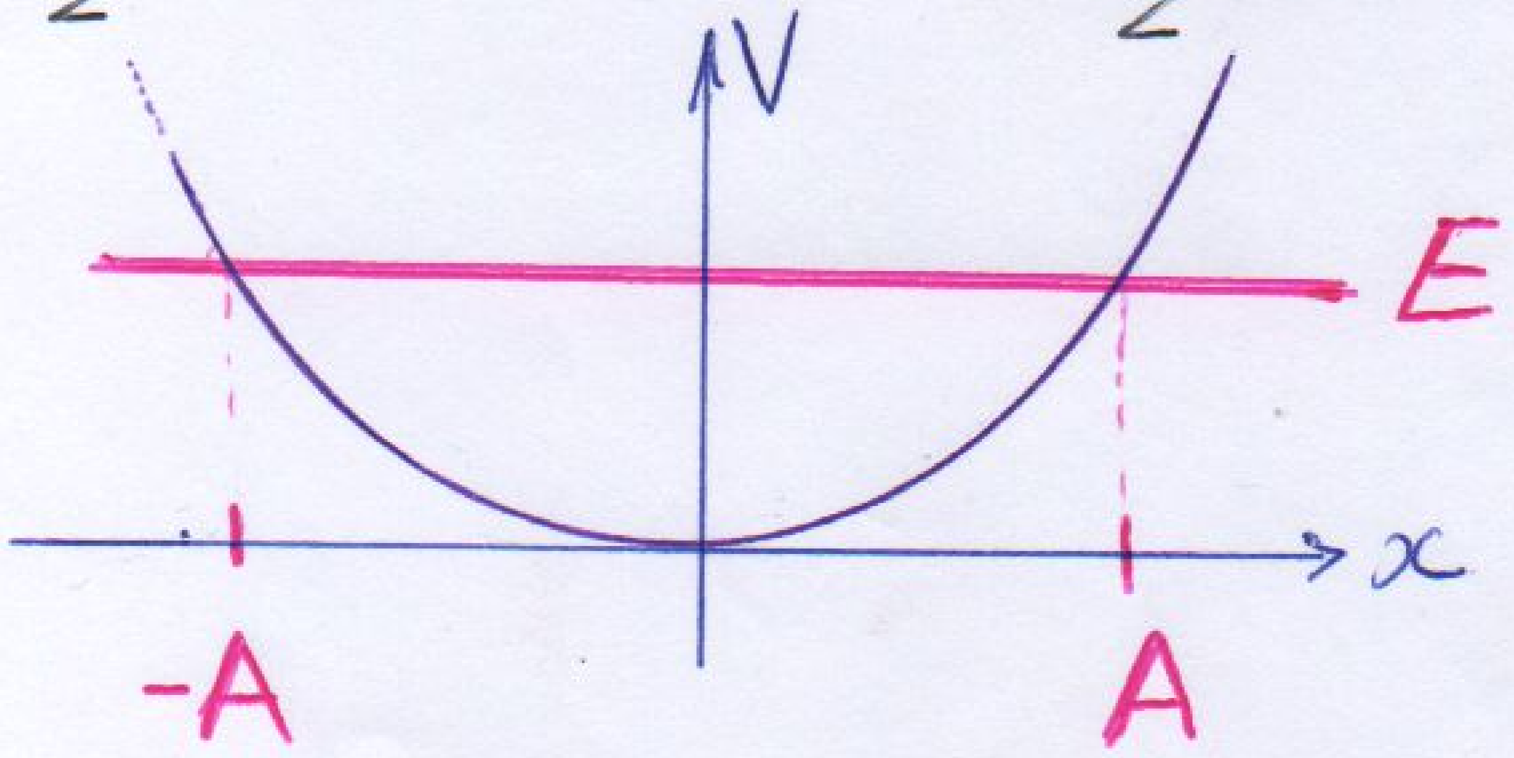
- escolho $V(x_0) = 0$
- $V'(x_0) = 0$, pois x_0 é pto de mínimo
- $V''(x_0) \equiv K$ cte da "mola"
- $x - x_0 \to x$: a "deformação"

$$V(x) = \frac{1}{2}Kx^2 \longrightarrow F = -Kx$$

- $m\ddot{x} = -Kx \Rightarrow x = A\,\text{sen}(\omega t + \phi)$,

com A amplitude e $\omega^2 \equiv K/m$.

- $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}Kx^2 = \cdots = \frac{1}{2}KA^2 \underset{\text{ou}}{=} \frac{1}{2}m\omega^2 A^2$



Classicamente a amplitude A define os os pontos de retorno da oscilação.

Quanticamente, queremos achar os estados estacionários, ou autofunções do operador H:

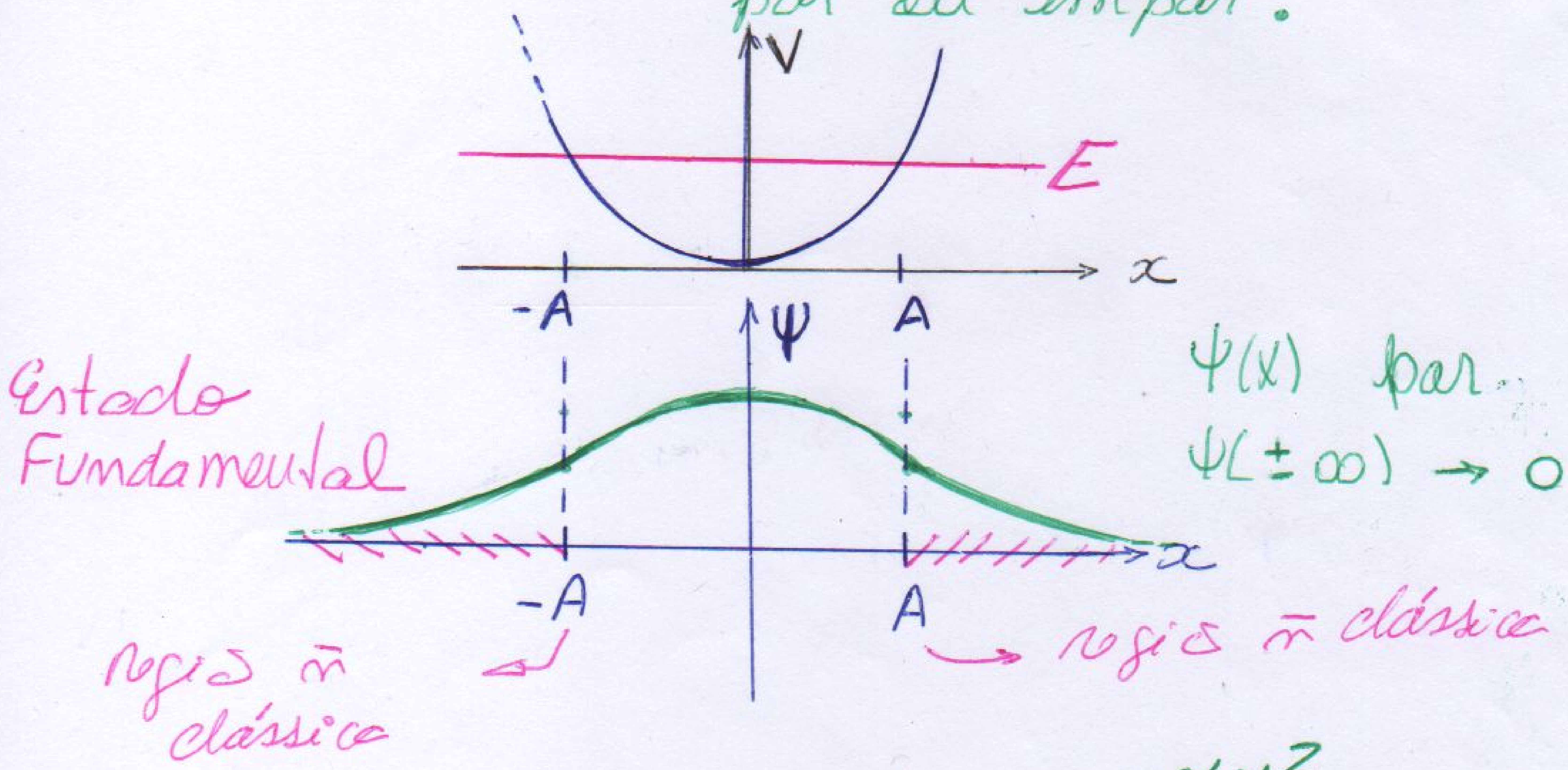
$$H\psi = E\psi \quad , \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

- Não iremos resolver essa Eq. neste momento.
- Vamos inferir algumas soluções baseados no que já aprendemos:

1) onde $E < V$, ψ cai exponencialmente.

2) p/ $E > V$, ψ oscilante e qto maior E mais zeros (ou nós).

3) $V(x) = V(-x)$, isto é, par, ψ é par ou ímpar.



proposta: $\psi = e^{-\alpha x^2}$

$$\psi' = -2\alpha x \, e^{-\alpha x^2}$$

$$\psi'' = (-2\alpha x)^2 e^{-\alpha x^2} - 2\alpha \, e^{-\alpha x^2} = (4\alpha^2 x^2 - 2\alpha)\psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(4\alpha^2 x^2 - 2\alpha)\psi + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \psi = E\psi$$

$$\left(\frac{1}{2} m\omega^2 - \frac{2\hbar^2}{m}\alpha^2\right)x^2 + \frac{\hbar^2 \alpha}{m} = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{cte}}}{E} \quad , \forall x$$

$$\Rightarrow \frac{1}{2} m\omega^2 - \frac{2\hbar^2}{m}\alpha^2 = 0 \quad \text{e} \quad E = \frac{\hbar^2 \alpha}{m}$$

$$\Downarrow$$

$$\alpha = \pm \frac{m\omega}{2\hbar} \qquad E = \frac{\hbar\omega}{2}$$

$$\psi_0 = C \, e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \quad , \quad E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0|^2 dx = 1 \quad \Rightarrow \quad C = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4}.$$

P/ esse estado o pto de retorno A_0 é

$$E_0 = \frac{1}{2} m\omega^2 A_0^2 \quad \Rightarrow \quad A_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

Probab. p/ achar oscilador com $|x| \leq A_0$:

$$P_0 = \int_{-A_0}^{A_0} |\psi_0|^2 dx = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-A_0}^{A_0} e^{-2\alpha x^2} dx = \quad \leftarrow 2\alpha x^2 \equiv y$$

$$= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^1 e^{-y^2} dy \simeq 0{,}8427$$

Até agora:

n	$E_n/\hbar\omega$	A_n/A_0
0	1/2	1
1	3/2	$\sqrt{3}$
2	5/2	$\sqrt{5}$
$\vdots$		
n	$n+1/2$	$\sqrt{2n+1}$

, $A_0 = \sqrt{\frac{3\hbar}{m\omega}}$

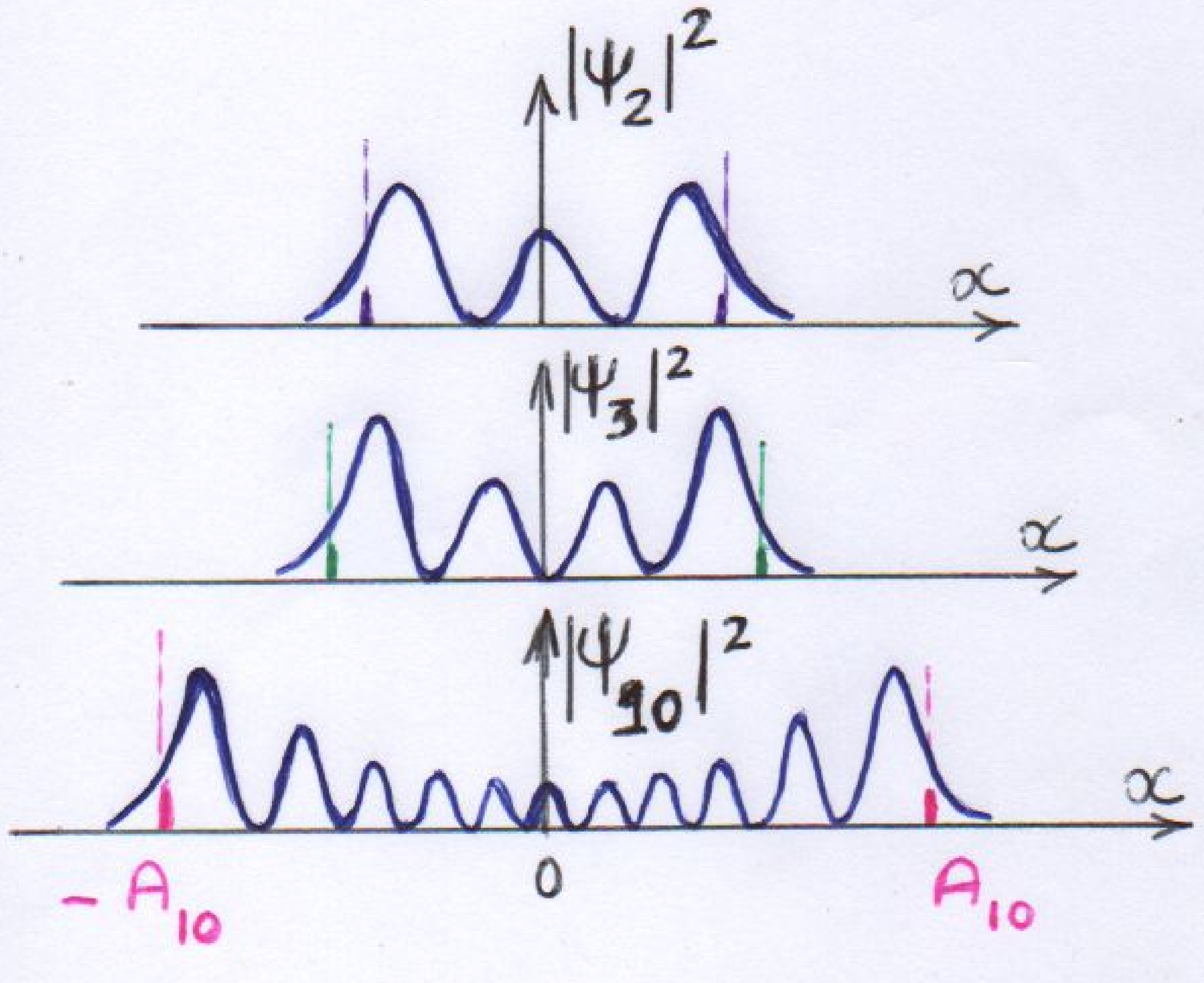
$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$$

solução geral p/ $\psi_n(x)$:

$$\psi_n(x) = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\sqrt{2\alpha}\, x)\, e^{-\alpha x^2},$$

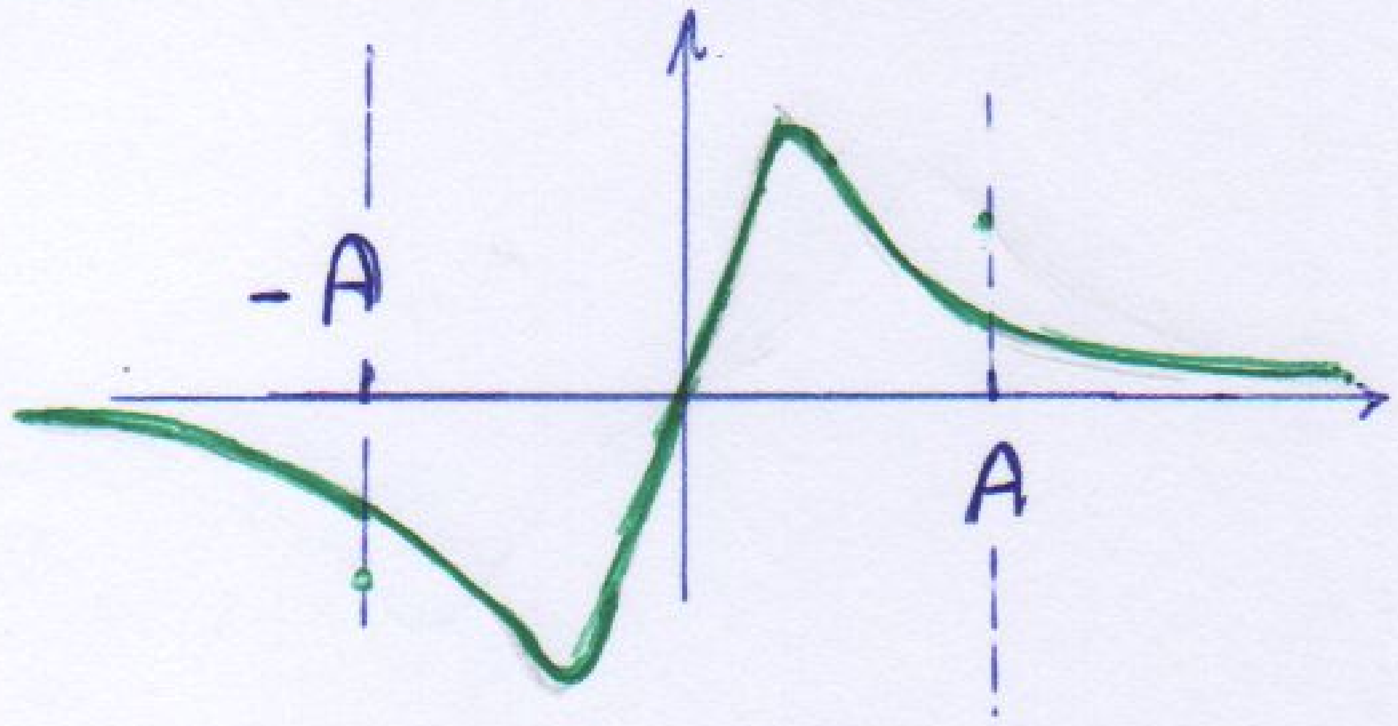
onde $H_0(\xi) = 1$, $H_1(\xi) = 2\xi$, $H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2$

são denominados Polinômios de Hermite.
sec. XIX



- p/ n gde, $|\psi_n|^2$ se assemelha à probab. clássica:
- $\frac{\Delta E_n}{E_n} \simeq \frac{1}{n}$ p/ $n \to \infty$

1º estado excitado



- $\psi_1(x)$ ímpar
- 1 zero
- $\psi_1(\pm\infty) \to 0$

proposta $\psi_1 = x\, e^{-\beta x^2}$

Substituindo encontramos

$$\beta = \alpha = \frac{m\omega}{2\hbar} \quad e \quad E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$$

$$\psi_1 = \left(\frac{32\alpha^3}{\pi}\right)^{1/4} \cdot x \cdot e^{-\alpha x^2}$$

Pto de retorno:

$$E_1 = \frac{1}{2} m\omega^2 A_1^2 \quad \Rightarrow \quad A_1 = \sqrt{\frac{3\hbar}{m\omega}} = \sqrt{3}\, A_0$$

Probab. da partícula estar c/ $|x| \leq A_1$:

$$P_1 = \int_{-A_1}^{A_1} |\psi_1|^2 dx = \left(\frac{32\alpha^3}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-A_1}^{A_1} x^2 e^{-2\alpha x^2} dx$$

$$= \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\sqrt{3}} y^2 e^{-y^2} dy \simeq 0{,}8884 .$$

Então, $\simeq 11\%$ de chance de estar na região ñ clássica.

2º estado excitado

ψ_2 par , $\psi_2(x \to \pm\infty) \to 0$

proposta $\psi_2 = e^{-\alpha x^2} + b x^2 e^{-\alpha x^2}$

Eq. Schr. $\psi'' = -\frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{1}{2} m\omega^2 x^2\right)\psi$

$$\psi'' = \left(\underline{-2\alpha} + \underline{4\alpha^2 x^2} + \underline{2b} - \underline{10 b \alpha x^2} + \underline{4 b \alpha^2 x^4}\right) e^{-\alpha x^2}$$

e

$$-\frac{2m}{\hbar^2}\left(\underline{E} + \underline{bEx^2} - \frac{1}{2}\underline{m\omega^2 x^2} - \frac{b}{2}\underline{m\omega^2 x^4}\right) e^{-\alpha x^2}$$

igualando as potências :

$$-2\alpha + 2b = -\frac{2m}{\hbar^2} E$$

$$4\alpha^2 - 10 b\alpha = -\frac{2m}{\hbar^2}\left(bE - \frac{1}{2} m\omega^2\right)$$

$$4b\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\frac{b}{2} m\omega^2 \Longrightarrow \underline{\alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}}$$

$$\underline{b = -2\frac{m\omega}{\hbar} = -4\alpha} \quad e \quad \underline{E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega}$$

$$\underline{\psi_2(x) = \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{1/4}\left(1 - 4\alpha x^2\right) e^{-\alpha x^2}}$$

$$E_2 = \frac{1}{2} m\omega^2 A_2^2 \Rightarrow A_2 = 5\frac{\hbar}{m\omega} = 5A_0$$

$$P_2 = \int_{-A_2}^{A_2} |\psi_2|^2 dx = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_0^{\sqrt{5}} (1-2y^2)^2 e^{-y^2} dy \simeq 0{,}9049$$

Valor médio ou Valor Esperado

Como $|\Psi(x,t)|^2$ é interpretado como densidade de probabilidade,

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x\,|\Psi(x,t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \cdot x \cdot \Psi \, dx$$

Em geral, $\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* f(x)\, \Psi \, dx$.

Como definir a média de um operador, por exemplo, $p = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$.

Vamos apelar p/ a relação clássica $\frac{dx}{dt} = \frac{p}{m}$:

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \frac{d}{dt}\int \Psi^* x \Psi \, dx =$$

$$= \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} x \Psi \, dx + \int \Psi^* x \frac{\partial \Psi}{\partial t} dx =$$

uso que $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi$

$$= \frac{\hbar}{2mi}\left(\int \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} x \Psi \, dx - \int \Psi^* x \frac{\partial \Psi}{\partial x^2} dx \right)$$

faço várias integrações por partes
e considero $\Psi(x \to \pm\infty, t) \to 0$

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \frac{1}{m}\int \Psi^* \underbrace{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}}_{= p} \Psi \, dx = \frac{\langle p \rangle}{m}$$

Valores médios nos autoestados do O. H.

$$\langle x \rangle_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\, x\, \psi_n(x)\, dx = 0$$

razão: $V(x)$ é par $\Rightarrow$ $\psi_n(x)$ é par ou ímpar.

$$\langle p \rangle_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \frac{\hbar}{i} \underbrace{\frac{d}{dx}\psi_n(x)}_{\text{paridade oposta a de } \psi_n(x)} dx = 0$$

Média de x^2 no estado $n = 0$

$$\langle x^2 \rangle_{n=0} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*\, x^2\, \psi_0\, dx = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2\alpha x^2} dx$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-a x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \; ; \; \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-a x^2} dx = -\frac{d}{da}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-a x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2 \cdot a^{3/2}}$$

$$\langle x^2 \rangle_{n=0} = \frac{1}{4\alpha} = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

$$\langle V(x) \rangle_{n=0} = \left\langle \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right\rangle_{n=0} = \frac{1}{4}\hbar\omega \overset{\text{ou}}{=} \frac{1}{2} E_0$$

$$\langle V(x) \rangle_{n=1} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \psi_1\, dx = \dots = \frac{1}{2} E_1$$

$$\langle V(x) \rangle_n = \frac{E_n}{2} .$$

Mas como $\langle H \rangle_n = \int \psi_n^* H \psi_n\, dx$

$$= \int \psi_n^* E_n \psi_n\, dx = E_n$$

Então, $\langle T \rangle_n = \langle H - V \rangle_n = E_n - E_n/2 = E_n/2$.

resumindo $\langle T \rangle_n = \langle V \rangle_n = \dfrac{E_n}{2}$ $\Leftarrow$ Teorema do Virial

Incertezas no oscilador

$$\Delta \hat{\theta} = \left\langle (\hat{\theta} - \langle \hat{\theta} \rangle)^2 \right\rangle^{1/2} = \left(\langle \hat{\theta}^2 \rangle - \langle \hat{\theta} \rangle^2 \right)^{1/2}$$

$$\langle V \rangle_n = \frac{E_n}{2} \Rightarrow \langle x^2 \rangle_n = \frac{\hbar}{m\omega}(n + 1/2)$$

$$\Delta x_n = \Big(\langle x^2 \rangle_n - \underbrace{\langle x \rangle_n^2}_{0} \Big)^{1/2} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \sqrt{n + 1/2}$$

$$\langle T \rangle_n = \frac{E_n}{2} \Rightarrow \langle p^2 \rangle = m\hbar\omega(n + 1/2)$$

$$\Delta p_n = \left(\langle p^2 \rangle_n - \langle p \rangle_n^2 \right)^{1/2} = \sqrt{m\hbar\omega} \sqrt{n + 1/2}$$

$$\therefore \; \Delta x_n \Delta p_n = \hbar(n + 1/2) \geq \hbar/2 \checkmark$$

Incertezas e os pt$\underline{os}$ de retorno

$$\frac{1}{2} m\omega^2 A_n^2 = E_n \Rightarrow A_n = \sqrt{2n+1}\, A_0 \; , \; A_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

$\therefore \; \Delta x_n = A_n/\sqrt{2}$ $\Rightarrow$ a incerteza em x é $\simeq$ da região classica/te permitida

Valor do momento linear no p$\underline{to}$ $x = 0$:

$$\frac{p_n^2}{2m} = E_n \Rightarrow p_n = \sqrt{2n+1}\; p_0 \; , \; p_0 = \sqrt{m\hbar\omega}$$

$\therefore \; \Delta p_n = p_n/\sqrt{2}$ $\Rightarrow$ a incerteza em p é $\simeq$ do valor clássico máximo de p.

Equações de Ehrenfest

$$m\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \langle p\rangle \quad \text{e} \quad \frac{d}{dt}\langle p\rangle = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle$$

Cuidado: x e p ñ dependem do tempo;
$\langle x\rangle$ e $\langle p\rangle$ podem depender!

$$\langle x\rangle(t) = \int \Psi^*(x,t)\, x\, \Psi(x,t)\, dx$$

Médias em estados estacionários

$$\Psi(x,t) = \psi_n(x)\, e^{i\omega t}$$

$$\langle x\rangle = \int \cancel{e^{-i\omega t}}\, \psi_n^*(x)\, x\, \psi_n(x)\, \cancel{e^{i\omega t}}\, dx$$

$$= \int \psi_n^*(x)\, x\, \psi_n(x)\, dx = \underbrace{\int x\, |\psi_n|^2 dx}_{\text{indp. do tempo}}$$

$$\langle p\rangle = \int \cancel{e^{-i\omega t}}\, \psi_n^*(x)\, \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\, \psi_n(x)\, \cancel{e^{i\omega t}}\, dx$$

$$= \int \psi_n^*(x)\, \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi_n(x)\, dx \,,$$ independente do tempo.

Em geral,

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [A,H]\rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle .$$

$[A,B] = AB - BA$: comutador

Usando Ehrenfest p/ o O.H.

$$m \frac{d}{dt}\langle x\rangle = \langle p\rangle \quad e \quad \frac{d}{dt}\langle p\rangle = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle$$

$$\Downarrow$$

$$m \frac{d^2}{dt^2}\langle x\rangle = \frac{d\langle p\rangle}{dt} = \left\langle -\frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right\rangle = -m\omega^2\langle x\rangle$$

$$\frac{d^2\langle x\rangle}{dt^2} = -\omega^2\langle x\rangle \Rightarrow \underline{\langle x\rangle = A\cos\omega t + B\sin\omega t}$$

"o Valor médio $\langle x\rangle$ segue a Eq. horária clássica; $\langle x\rangle$ tb se chama "centro do pacote"."

Isso acontece p/ $V(x) = a x^l$, p/ $l = 0, 1$ ou 2 somente