Oscilador Harmônico

Se utilizando dos princípios da mecânica quântica, podemos pensar no oscilador harmônico quântico, que analogamente a sua contra partida clássica pode servir como um modelo aproximado de fenômenos oscilatórios com respeito a uma certa posição de equilíbrio. O hamiltoneano clássico se escreve como:

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

Com ω sendo a frequência natural do oscilador. Fazendo $p \to \hat{p}$ e $x \to \hat{x}$ obtemos o operador hamiltoneano do oscilador harmônico:

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2$$

Existem a princípio duas maneiras principais de desenvolvimento: na base das energias $|E\rangle$ e na base das posições $|x\rangle$. Começando pela base das energias $|E\rangle$.

É de extrema convêniencia definir dois operadores não-hermitianos:

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right)$$ Destruição

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

Note que:

$$[a, a^\dagger] = aa^\dagger - a^\dagger a$$

$$= \frac{m\omega}{2\hbar}\left[\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}, \hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right]$$

$$= \frac{m\omega}{2\hbar}\left(\left[\hat{x}, \hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right] + \left[\frac{i}{m\omega}\hat{p}, \hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right]\right)$$

$$= \frac{m\omega}{2\hbar}\left([\hat{x},\hat{x}] - \frac{i}{m\omega}[\hat{x},\hat{p}] + \frac{i}{m\omega}\underbrace{[\hat{p},\hat{x}]}_{-[\hat{x},\hat{p}]} - \left(\frac{i}{m\omega}\right)^2[\hat{p},\hat{p}]\right)$$

$$= \frac{m\omega}{2\hbar}\left(\cancel{[\hat{x},\hat{x}]}^{0} - \frac{2i}{m\omega}\underbrace{[\hat{x},\hat{p}]}_{i\hbar} - \cancel{\left(\frac{i}{m\omega}\right)^2[\hat{p},\hat{p}]}^{0}\right)$$

$$= \frac{m\omega}{2\hbar}\cdot\frac{2}{m\omega}\cdot\hbar$$

$$\Rightarrow \quad [a, a^\dagger] = 1$$

Também podemos definir um novo operador, agora hermitiano que chamamos de número:

$$\boxed{N = a^\dagger a}$$

No entanto, note novamente; utilizando as definições de $a^\dagger$ e a temos:

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

$$= \frac{m\omega}{2\hbar}\left(\hat{x}^2 + \frac{i}{m\omega}\hat{x}\hat{p} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}\hat{x} + \frac{1}{(m\omega)^2}\hat{p}^2\right)$$

$$= \frac{m\omega}{2\hbar}\left(\hat{x}^2 + \frac{i}{m\omega}\underbrace{[\hat{x},\hat{p}]}_{i\hbar} + \frac{1}{(m\omega)^2}\hat{p}^2\right)$$

$$= \frac{m\omega}{2\hbar}\left(\hat{x}^2 - \frac{\hbar}{m\omega} + \frac{1}{(m\omega)^2}\hat{p}^2\right) = \frac{m\omega\hat{x}^2}{2\hbar} - \frac{1}{2} + \frac{1}{\hbar\omega}\cdot\frac{\hat{p}^2}{2m}$$

$$= \frac{1}{\hbar\omega}\cdot\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{\hbar\omega}\cdot\frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2} - \frac{1}{2}$$

$$= \frac{1}{\hbar\omega}\underbrace{\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}\right)}_{H} - 1/2$$

$$\Rightarrow \boxed{N = H/\hbar\omega - 1/2} \Rightarrow \boxed{H = \hbar\omega\left(N + \tfrac{1}{2}\right)}$$

$\Rightarrow$ N e H são funções lineares entre si

Como H e N são funçõ lineares entre si, <u>N pode ser diagonalizado simultaneamente com H.</u> $\Rightarrow$ <u>pois comutam por serem funçõs lineares.</u>

Autovetores de N são dados por:

$$N|n\rangle = n|n\rangle$$

Notemos primeiramente que:

$$[N,a] = [a^\dagger a, a] = a^\dagger a a - a a^\dagger a = (a^\dagger a - a a^\dagger) a = \underbrace{[a^\dagger, a]}_{-1} a$$

$$\Rightarrow \underline{[N,a] = -a}$$

Concomitantemente:

$$[N,a^\dagger] = [a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger a a^\dagger - a^\dagger a^\dagger a = a^\dagger [a a^\dagger - a^\dagger a] = a^\dagger \underbrace{[a,a^\dagger]}_{1} = a^\dagger$$

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

$$N a^\dagger = a^\dagger \cancel{+ a^\dagger N}$$

$$N a^\dagger = [N,a^\dagger] + a^\dagger N$$

$$\Rightarrow \underline{[N,a^\dagger] = a^\dagger}$$

<u>Então:</u>

$$N a^\dagger |n\rangle = \underbrace{[N,a^\dagger]}_{a^\dagger}|n\rangle + a^\dagger \underbrace{N|n\rangle}_{n|n\rangle}$$

$$\underline{N a^\dagger |n\rangle = a^\dagger |n\rangle + a^\dagger n |n\rangle = (n+1) a^\dagger |n\rangle}$$

Concomitantemente:

$$[N,a] = Na - aN = a$$
$$Na = [N,a] + aN$$

$$N a|n\rangle = \underbrace{[N,a]}_{-a}|n\rangle + a\underbrace{N|n\rangle}_{n|n\rangle}$$
$$= -a|n\rangle + n\,a|n\rangle$$

$$Na|n\rangle = (n-1)\,a|n\rangle$$

$\Rightarrow$ $\boxed{a|n\rangle \text{ e } a^{+}|n\rangle \text{ são autovetores de } N\,!}$

Com seu respectivo autovalor ($\underline{n}$) aumentado ou diminuido em 1

Com isso temos que os autovetores $a^{+}|n\rangle$ e $a|n\rangle$ são proporcionais a $|n+1\rangle$ e $|n-1\rangle$ respectivamente. Ou seja:

$$a|n\rangle = c\,|n-1\rangle$$

$\hookrightarrow$ constante determinada por normalização.

<u>O que esta acontecendo?</u> <u>Resp</u>: Por hipótese temos que $|n\rangle$ são as representações dos autovetores do operador N ($N|n\rangle = n|n\rangle$). No entanto descobrimos que ao aplicar os operadores <u>a e a^{+}</u> $^{a|n\rangle}$ obtemos outros autovetores de N; em especial obtemos o próximo autovetor ou o autovetor anterior a $|n\rangle$.

Para um melhor entendimento; dado <u>a</u> e <u>$|n\rangle$</u> temos <u>$|v\rangle = a|n\rangle$</u>

Aplicando o operador N a esse novo vetor temos:

$$N|v\rangle = Na|n\rangle = (n-1)a|n\rangle = (n-1)|v\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \underline{N|v\rangle = (n-1)|v\rangle},$$

Essa é a equação satisfeita pelo autovetor $|n-1\rangle$ de N

Logo $|v\rangle$ é um multiplo de $|n-1\rangle$:

$$\underline{|v\rangle = \alpha|n-1\rangle = a|n\rangle} \quad \alpha \in \mathbb{C}$$

Os operadores de destruição e criação ao aplicados em algum autovetor de N transitam entre os outros autovetors de N. Mas vale lembrar também que <u>os autovetors de N também se relacionam com os autovetores de H (auto energias)</u> pois:

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

se aplicarmos H a um autovetor $|n\rangle$ de N teremos:

$$H|n\rangle = \hbar\omega\left(N + \tfrac{1}{2}\right)|n\rangle$$

$$= \hbar\omega\left(\underbrace{N|n\rangle}_{n|n\rangle} + \frac{1}{2}|n\rangle\right)$$

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

$$\Rightarrow \boxed{H|n\rangle = \left(n + \tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega|n\rangle}$$

E com isso podemos fazer as identificações das autoenergias do oscilador harmônico:

$$H|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle \therefore$$

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

Autovalores da Energia

Podemos inferir com isso, que os operadores de destruição e criação se relacionam a <u>destruição ou criação de $\hbar\omega$ de energia</u> ou <u>um quantum de energia</u>.

Tendo em vista que $a|n\rangle = c|n-1\rangle$

O Adjunto fica: $\langle n|a^\dagger = \langle n-1|c^*$; logo:

$$\langle n|a^\dagger a|n\rangle = |c|^2 \underbrace{\langle n-1|n-1\rangle}_{=1 \text{ por normalização}}$$

$$\Rightarrow \langle n|\underbrace{a^\dagger a}_{N}|n\rangle = |c|^2 \Rightarrow \underline{\langle n|N|n\rangle = |c|^2};$$

Mas $N|n\rangle = n|n\rangle \Rightarrow \langle n|N|n\rangle = n\underbrace{\langle n|n\rangle}_{1 \text{ por normalização}} = |c|^2$

$$\Rightarrow |c|^2 = n$$

Fazendo por convenção que $\underline{c \in \mathbb{R}^+}$ temos: $\boxed{c = \sqrt{n}}$

Ou seja chegamos finalmente as seguintes relações:

$$\boxed{\begin{aligned} a|n\rangle &= \sqrt{n}\,|n-1\rangle \\ a^{\dagger}|n\rangle &= \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \end{aligned}}$$

Lembre que havíamos obtido que $\langle n|N|n\rangle = n = |c|^2$ podemos destrinchar isso da seguinte maneira: $\langle n|a^{\dagger}a|n\rangle = n$

$$\Rightarrow \underbrace{(\langle n|a^{\dagger})\cdot(a|n\rangle)}_{\text{norma de } a|n\rangle} = \underline{n \geq 0}$$

pela propriedade da norma de vetores!

Assim temos que o menor n possível é $\underline{n=0}$ e curiosamente não resulta em uma energia mínima nula. Lembrando que

$$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega \longrightarrow \boxed{E_0 = \hbar\omega/2}$$

↳ Estado Fundamental do Oscilador.

Obtendo o estado fundamental $|0\rangle$ p $\underline{n=0}$ podemos nos utilizar dos operadores de criação e destruição para obter os outros estados.

$$|1\rangle = a^{\dagger}|0\rangle$$

$$|2\rangle = a^{\dagger}|1\rangle = a^{\dagger}a^{\dagger}|0\rangle = \left[\frac{(a^{\dagger})^2}{\sqrt{2}}\right]|0\rangle$$

Em geral teremos:

$$\boxed{|n\rangle = \left[\frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}\right]|0\rangle}$$

Nota: $|n\rangle$ também é autovetor de H (pois H e N comutam) mas o autovalor associado a $|n\rangle$ é $E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega$.

Podemos tambem determinar os elementos de matriz dos operadores a e $a^\dagger$ na base $|n\rangle$.

Nos utilizando de $a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$ e a ortonormalidade da base $\{|n\rangle\}$ temos:

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

$$\Rightarrow \underline{\langle n'|a|n\rangle = \sqrt{n}\,\delta_{n',n-1}}$$

Concomitantemente:

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \rightarrow \langle n'|a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,\langle n'|n+1\rangle$$

$$\Rightarrow \underline{\langle n'|a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1}}$$

Podemos Reescrever $\hat{x}$ e $\hat{p}$ em função de a e $a^\dagger$:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(a+a^\dagger) \quad ; \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\,(-a+a^\dagger)$$

O que nos leva a matriz de transformação de $\hat{X}$ e $\hat{P}$ na base $|n\rangle$:

$$\langle n'|x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n}\,\delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1}\right)$$

$$\langle n'|p|n\rangle = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\left(-\sqrt{n}\,\delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1}\right)$$

Ainda podemos nos utilizar dessa dinâmica de Operadores para expressar as autoenergias na base $|x\rangle$. Sabendo que $|0\rangle$ é o estado fundamental devemos ter que ao aplicarmos $\underline{a}$ deve-se resultar em zero.

$$a|0\rangle = 0$$ projetando isso na base $|x\rangle$:

$$\langle x'|a|0\rangle = \underline{a\langle x'|0\rangle = 0}$$

$\langle x'|0\rangle \equiv$ Função de Onda da Energia no estado fundamental.

Sabemos ainda como o operador $\underline{a}$ age nesse base:

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{X} + \frac{i\,\hat{P}}{m\omega}\right)$$ onde $\hat{X} = x'$ e $\hat{P} = -i\hbar\frac{d}{dx'}$

Logo teremos:

$$\langle x'|a|0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x' + \frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx'}\right)\langle x'|0\rangle = 0$$

$$\Rightarrow \left(x' + \frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx'}\right)\langle x'|0\rangle = 0 \quad ; \quad \boxed{x_0^2 = \frac{\hbar}{m\omega}}$$

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

$\Rightarrow$ Chegamos a seguinte EDO: $\boxed{\left(x' + x_0^2\frac{d}{dx'}\right)\psi_0(x') = 0}$

Cuja solução normalizada é:

$$\boxed{\psi_0(x') = \langle x'|0\rangle = \left(\frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}}\right) e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x'}{x_0}\right)^2}}$$

Com isso, conseguimos obter as autofunções da energia para outros estados excitados na base das posições:

$$\psi_1(x') = \langle x'|1\rangle = \langle x'|a^\dagger|0\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}x_0}\right)\left(x' - x_0^2\frac{d}{dx'}\right)\psi_0(x')$$

Em geral:

$$\boxed{\psi_n(x') = \langle x'|n\rangle = \left(\frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{2^n n!}}\right)\left(\frac{1}{x_0^{n+1/2}}\right)\left(x' - x_0^2\frac{d}{dx'}\right)^n e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x'}{x_0}\right)^2}}$$

Podemos analisar tudo isso agora do ponto de vista da evolução temporal; tudo isso é válido para algum istante t_1 mas e a medida que o tempo passa?

Vamos supor que agora estamos trabalhando na visão de <u>Heisenberg</u> onde os operadores são dependentes do tempo. Estamos identificando agora um operador $A^H(t)$ como $A(t)$ por simplicidade. Sabemos que a evolução temporal de um operador é dada pela <u>Equação de Movimento de Heisenberg</u>:

$$\frac{dA}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A, H]$$

Em especial, sabemos que:

$$\frac{dp}{dt} = -m\omega^2 x$$

$$\frac{dx}{dt} = \frac{P}{m}$$

Com isso voltamos a: $a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x + \frac{iP}{m\omega}\right)$ e temos:

$$\frac{da}{dt} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\frac{dx}{dt} + \frac{i}{m\omega}\frac{dp}{dt}\right) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\frac{P}{m} - i\omega x\right)$$

$$= -i\omega \underbrace{\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\frac{iP}{m\omega} + x\right)}_{a}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{da}{dt} = -i\omega a} \rightarrow \underline{a(t) = a(0)e^{-i\omega t}}$$

Concomitantemente teremos:

$$\frac{da^\dagger}{dt} = i\omega a^\dagger \longrightarrow \underline{a^\dagger(t) = a^\dagger(0)\, e^{i\omega t}}$$

Notemos que:

$$N = a^\dagger a = a^\dagger(0) e^{i\omega t} a(0) e^{-i\omega t} = a^\dagger(0) a(0)$$

independente do tempo e portanto a Hamiltoneana também será independente do tempo.

Reescrevemos agora $a(t)$ e $a^\dagger(t)$ em termos de x e p:

$$x(t) + \frac{i p(t)}{m\omega} = x(0) e^{-i\omega t} + i \frac{p(0)}{m\omega} e^{-i\omega t}$$

$$x(t) - \frac{i p(t)}{m\omega} = x(0) e^{i\omega t} - i \frac{p(0)}{m\omega} e^{i\omega t}$$

Igualando partes Re e Im chegamos a:

$$x^H(t) = x(0) \cos\omega t + \frac{p(0)}{m\omega} \sin\omega t$$

$$p^H(t) = -m\omega x(0) \sin\omega t + p(0) \cos\omega t$$

↳ Oscilam do mesmo modo que seus análogos clássicos.

$\rightsquigarrow$ Voltando a representação de Schröedinger.

Quantização do Oscilador na base das coordenadas $|x\rangle$:

Podemos nos utilizar agora de outra maneira para a quantização do oscilador harmônico; primeiro atacamos o problema do ponto de vista da base das energias. Mas e se resolvermos diretamente na base das posições?

Sabemos que o estado do sistema evolui no tempo conforme a equação de Schröedinger:

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi\rangle = H|\psi\rangle$$

Lembrando que p/ o oscilador harmônico temos: $H = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2$

logo não depende explicitamente do tempo: Com isso;

$$|\psi\rangle = \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}}_{U(t)}|\psi(0)\rangle$$

$U(t) \rightarrow$ operador de Propagação.

Basta determinar $U(t)$. Para exponenciar o operador H precisamos primeiramente de seus autovetores e autovalores

$$H|E\rangle = E|E\rangle$$

$$\left(\frac{\hat{P}^2}{2m} + m\omega^2\hat{x}^2\right)|E\rangle = E|E\rangle$$

Como queremos resolver na base $|x\rangle$; realizamos a projeção: $\hat{x} \rightarrow x$

$\hat{P} \rightarrow -i\hbar\, d/dx$

$$\langle x | \left(\frac{1}{2m}\left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right)^2 + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) | E \rangle = \langle x | E | E \rangle$$

$$\Rightarrow \left(\frac{1}{2m}\left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right)^2 + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \langle x | E \rangle = E \langle x | E \rangle \quad \Big| \quad \boxed{\langle x | E \rangle \equiv \psi_E}$$

Autofunção

$$\Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \psi_E(x) = E\,\psi_E(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_E(x) + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\psi_E(x) - E\,\psi_E(x) = 0$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_E(x) - \frac{\omega^2 x^2}{\hbar^2} + \frac{E.2m}{\hbar^2} = 0$$

então:

$$\Rightarrow \frac{d^2}{dx^2}\psi_E(x) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right)\psi_E(x) = 0$$

Precisamos resolver a EDO para funções $\psi_E(x)$ que vivem no Espaço de Hilbert físico (quadrado integravel ~~ou~~ e normalizados a delta de dirac)

Truque: reescrever a EDO em função de variáveis adimensionais.

$$\underbrace{x}_{[L]} = \underbrace{b}_{[L]} \cdot \underbrace{y}_{\text{adimensional}}$$

jogando isso na EDO temos:

$$\frac{1}{b^2}\frac{d}{dy^2}\psi(y) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{m\omega^2 b^2 y^2}{2}\right)\psi(y) = 0$$

$$\frac{d^2}{dy^2}\psi(y) + \frac{2m}{\hbar^2}\cdot b^2 \cdot E\psi(y) - \frac{m^2\omega^2 b^4}{\hbar^2}y^2\psi(y) = 0$$

Uma possível escolha é: $b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ no termo que temos a energia

teriamos: $\frac{2mE}{\hbar^2}\cdot\frac{\hbar}{m\omega} \to \frac{2E}{\hbar\omega} \to$ outro adimensional $\epsilon = \frac{E}{\hbar\omega}$

$$\Rightarrow \quad \frac{d^2}{dy^2}\psi(y) + 2\epsilon\psi(y) - y^2\psi(y) = 0$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\frac{d^2}{dy^2}\psi + (2\epsilon - y^2)\psi = 0}$$

O que simplifica bastante na hora de resolver a EDO.

Método de resolução:

1-) Variáveis adimensionais.

2-) Comportamento Assintótico de ψ ($y \to 0$, $y \to \infty$)

3-) Solução dada pelo produto das funções que correspondem aos comportamentos assintóticos de ψ e uma função desconhecida $\underline{u}$. (Mais fácil de achar u do q ψ)

4-) Tentar uma série de potências.

2-) Comportamento Assintótico.

$y \to \infty$: $\Rightarrow$ $y^2 >> \epsilon$ logo:

$$\frac{d^2}{dy^2}\psi - y^2\psi = 0 \xrightarrow{\text{Solução}} \psi = A y^m e^{\pm y^2/2}$$

$e^{-y^2/2}$ devido ao quadrado integravel (esta no espaço de Hilbert).

$y \to 0$: $y^2 << \epsilon$ logo:

$$\frac{d^2}{dy^2}\psi + 2\epsilon\psi = 0 \to \lambda^2 + 2\epsilon = 0 \to \lambda^2 = -2\epsilon$$

$$\lambda_{1,2} = \pm i\sqrt{2\epsilon}$$

$$\Rightarrow \psi = A\cos(\sqrt{2\epsilon}\,y) + B\sin(\sqrt{2\epsilon}\,y)$$

No entanto há um detalhe de extrema relevancia: para chegar nessa EDO e consequentemente nessa solução ignoramos o termo y^2. Por questões de consistência devemos tambem abandonar os termos de ordem y^2 ou maior. Abrindo as séries de Taylor teremos então:

$$\psi_{\to 0} = A + cy + O(y^2)$$

Podemos juntar tudo da seguinte forma: podemos dizer que a solução é do tipo:

$$\psi(y) = u(y)\, e^{-y^2/2}$$

Onde $y \to 0$: $u(y) \to A + cy$; $y \to \infty$ $u \to y^m$

A fim de determinar completamente $\psi(y)$ jogamo-os novamente na EDO.

$$u'' - 2yu' + (2\epsilon - 1)u = 0$$

Que pode ser resolvida por série de Potências: ou seja:

$$\underbrace{u(y) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n y^n}$$

$$u'(y) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n n y^{n-1} \xrightarrow{n = m+1} \sum C_{m+1} (m+1) y^m$$

$$u''(y) = \sum_{n=2}^{\infty} C_n n (n-1) y^{n-2} \to \sum C_{m'+2} (m'+2)(m'+1) y^{m'}$$

$$\underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} \left[C_{n+2}(n+2)(n+1) - 2C_n n + (2\epsilon - 1) C_n \right] y^n = 0}$$

Isso só é possível se cada termo for nulo devido a independência Linear da série de potências. Logo

$$C_{n+2}(n+2)(n+1) - C_n(2n + 1 - 2\epsilon) = 0$$

$$\underbrace{C_{n+2} = C_n \frac{(2n + 1 - 2\epsilon)}{(n+2)(n+1)}}$$

Relação de Recorrência

Dado C_0 e C_1 conseguimos obter qualquer coeficiente da série.

No entanto ainda existe algo errado com nossa solução. O crescimento de C_{n+2} a medida que $y \to \infty$ é diferente do esperado de $y^m e^{-y^2}$; de fato $u(y)$ acaba crescendo como $y^m e^{y^2}$. Isso se deve ao fato que não fizemos restrições a respeito dos valores aceitos de energia:

$$\underline{\epsilon_n = n + 1/2 \; ; \; n = 0, 1, 2, \ldots}$$

Com isso; todos os coeficientes C_{n+2} irão sumir a medida que $y \to \infty$.

Dependendo da escolha $C_1 = 0$ ou $C_0 = 0$ e se n é par ou ímpar teremos:

$$\psi(y) = u(y)\, e^{-y^2/2} = \begin{Bmatrix} C_0 + C_2 y^2 + C_4 y^4 + \ldots + C_n y^n \\ C_1 y + C_3 y^3 + C_5 y^5 + \ldots + C_n y^n \end{Bmatrix} \cdot e^{-y^2/2}$$

Para cada valor diferente de $\underline{n}$ temos um certo polinomio de ordem n.

Esses são chamados os <u>Polinômios de Hermite</u>. $H_n(y)$

$$H_0(y) = 1$$

$$H_1(y) = 2y$$

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

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

Utilizando a convenção de normalização teremos então:

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

Os Polinômios de Hermite obedecem as seguintes relações importantes:

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

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

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(y)\, H_m(y)\, e^{-y^2} dy = \delta_{nm} \left(\pi^{1/2}\, 2^n\, n!\right)$$

E com isso podemos escrever o propagador da seguinte maneira:

$$U(x,t,x',t') = \left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin\omega T}\right)^{1/2} \exp\left[\frac{im\omega}{\hbar}\, \frac{(x^2+x'^2)\cos\omega T - 2xx'}{2\sin\omega T}\right]$$

$$T = t - t'$$