Aula 10: Oscilador Harmônico

Além de ser um exemplo de um sistema quântico com solução analítica, ele representa uma ferramenta utilizada para a descrição de muitos fenômenos físicos, seja como aproximação ou por analogia direta.

O hamiltoniano clássico do OH é dado por:

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

onde a frequência do oscilador é

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

e k é a constante elástica. Mas podemos fazer uso do oscilador harmônico como uma aproximação a muitos sistemas físicos.

Por exemplo se o hamiltoniano de um sistema é

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

E $V(x)$ tem um mínimo local em x_0, podemos expandir $V(x)$ arredor de x_0

$$V(x) = V(x_0) + \left.\frac{dV(x)}{dx}\right|_{x_0}(x-x_0) + \frac{1}{2!}\left.\frac{d^2V(x)}{dx^2}\right|_{x_0}(x-x_0)^2$$

$$+ \ldots$$

Mas se $V(x_0)$ é um mínimo de $V(x)$ então

$$\left.\frac{dV(x)}{dx}\right|_{x_0} = 0 \quad \left(\text{A "força" é zero}\right)$$

Se consideramos $V(x_0) = 0$ como escolha da origem arbitrária da energia potencial, então vemos que em <u>primeira ordem</u> sempre podemos aproximar um problema com um mínimo em $V(x)$ como um oscilador harmônico com

$$\left\{ \left.\frac{d^2V(x)}{dx^2}\right|_{x_0} = m\omega^2 = k \right\}$$

sempre que $x \simeq x_0$ ou que

$$x - x_0 \ll L$$

onde L é algum comprimento caraterístico do sistema.

Exemplos são:

- Oscilações (em 3D) dos átomos numa estrutura cristalina. Podemos tratar os modos normais de oscilação no cristal com o formalismo a seguir (generalizado em 3D) de 3N osciladores desacoplados.

- Descrição do campo eletromagnético como um conjunto de osciladores desacoplados (e.g. Planck e a radiação do corpo negro.

A quantização do OH pode ser feita de duas formas: na base da posição ou na base da energia. O segundo método (também chamado de método algébrico) é mais direto e, a partir dele, também poderemos derivar os resultados do primeiro.

Além disso, a descrição na base da energia é amplamente utilizada em aplicações que vão da física do estado sólido, à teoria quântica de campos, ótica quântica, etc.

Quantização do Oscilador Harmônico

Partindo do hamiltoniano (operador)

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X$$

onde P, X são os operadores momento e posição, vamos definir outros dois operadores

$$\left.\begin{aligned} a &\equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(X + \frac{iP}{m\omega}\right) \\ a^\dagger &\equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(X - \frac{iP}{m\omega}\right) \end{aligned}\right\}$$

A diferença do X e P, que são hermitianos, a e $a^\dagger$ não são.

Por razões que ficarão claras mais para frente, eles são chamados de operadores de aniquilação e criação, respectivamente.

As definições de a e $a^\dagger$ são mudanças de variáveis, de X e P para a e $a^\dagger$. A meta é escrever o hamiltoniano H em termos de a e $a^\dagger$ em lugar de X e P.

O primeiro passo é calcular o seu comutador

$$[a, a^\dagger] = \frac{m\omega}{2\hbar}\left[X, -\frac{iP}{m\omega}\right] + \frac{m\omega}{2\hbar}\left[\frac{iP}{m\omega}, X\right]$$

usando que
$$[X, P] = i\hbar$$

$$[a, a^\dagger] = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$$

$$\Rightarrow \boxed{[a, a^\dagger] = 1}$$

Também é útil definir o operador

$$N \equiv a^\dagger a$$

chamado de <u>operador número</u>, e que claramente é hermitiano.

Vemos que

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

$$\Rightarrow N = \frac{m\omega}{2\hbar}X^2 + \frac{P^2}{2m\omega\hbar} + \frac{i}{2\hbar}[X,P]$$

$$\Rightarrow N = \frac{1}{\hbar\omega}\left(\frac{1}{2}m\omega^2X^2 + \frac{P^2}{2m}\right) - \frac{1}{2}$$

$$\Rightarrow N = \frac{1}{\hbar\omega}H - \frac{1}{2}$$

então podemos escrever o operador H como

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

ou

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

O fato que H pode ser escrito como uma função linear de N implica que H e N podem ser diagonalizados simultaneamente

I.e.:

$$N|n\rangle = n|n\rangle$$ autoestados de N com autovalor N

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

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

são autoestados de H com autovalor

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

Significado Físico de $a, a^\dagger$ e N:

Para entender o significado desses operadores começamos por calcular o comutador

$$[N,a] = [a^\dagger a, a] = a^\dagger \underbrace{[a,a]}_{=0} + \underbrace{[a^\dagger,a]}_{=-1} a$$

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

Do mesmo jeito, calculamos

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

$$\Rightarrow \boxed{[N, a^\dagger] = a^\dagger} \Rightarrow Na^\dagger - a^\dagger N = a^\dagger$$

$$\Rightarrow \boxed{Na^\dagger = [N, a^\dagger] + a^\dagger N}$$

Usando esses resultados, podemos calcular

$$N a|m\rangle = ([N, a] + aN)|m\rangle = (-a + am)|m\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{N a|m\rangle = (m-1)\, a|m\rangle}$$

$\Rightarrow$ $a|m\rangle$ é um autovetor de N com autovalor $\underline{(m-1)}$!

E, por outra parte

$$N a^\dagger|m\rangle = ([N, a^\dagger] + a^\dagger N)|m\rangle$$

$$= (a^\dagger + a^\dagger m)|m\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{N a^\dagger|m\rangle = (m+1)\, a^\dagger|m\rangle}$$

$a^\dagger|m\rangle$ é autovetor do N com autovalor $\underline{(m+1)}$!

$\Rightarrow$ $\left\{ \begin{array}{l} a \text{ atuando em } |m\rangle \text{ decresce em } 1 \\ \quad \Rightarrow \text{ operador de aniquilação} \end{array} \right\}$

$\left\{ \begin{array}{l} a^\dagger \text{ atuando em } |m\rangle \text{ aumenta em } 1 \\ \quad \Rightarrow \text{ operador de criação} \end{array} \right\}$

Vamos ver que m deve ser um inteiro positivo que poderemos interpretar como o número de ocupação ou número de "quantos" no estado.

O primeiro passo é ver que os autoestados

$$a|m\rangle \quad e \quad |m-1\rangle$$

são autoestados de N com o mesmo autovalor (m-1).

Portanto devem ser "paralelos", i.e.

$$a|m\rangle = c|m-1\rangle$$

onde c é uma constante.

Para determinar c, notamos que

$$\langle m|N|m\rangle = m\,\langle m|m\rangle = m$$

$\Rightarrow$ $$\langle m|N|m\rangle = \langle m|a^\dagger a|m\rangle = m$$

Mas $$\langle m|a^\dagger a|m\rangle = |c|^2\langle m-1|m-1\rangle = |c|^2$$

$$\Rightarrow \boxed{|c|^2 = m}$$

$\Rightarrow$ Escolhendo (arbitrariamente) C real e positiva

$$\Rightarrow \boxed{c = \sqrt{m}}$$

$$\Rightarrow \boxed{a|m\rangle = \sqrt{m}\,|m-1\rangle}$$

Do mesmo jeito, usando que

$a^\dagger|m\rangle$ e $|m+1\rangle$

são autovetores de N com o mesmo autovalor $(m+1)$

$$\Rightarrow \quad a^\dagger|m\rangle = c'\,|m+1\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \langle m|a a^\dagger|m\rangle = |c'|^2 \langle m+1|m+1\rangle = |c'|^2$$

MAS

$$\langle m|a a^\dagger|m\rangle = \langle m|a^\dagger a + \overset{[a,a^\dagger]}{1}|m\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \langle m|N+1|m\rangle = |c'|^2$$

$$\Rightarrow \quad (m+1) = |c'|^2 \quad \text{ou}$$

$$c' = \sqrt{m+1}$$

$$\Rightarrow \boxed{a^\dagger|m\rangle = \sqrt{m+1}\,|m+1\rangle}$$

m não pode ser negativo

dado que
$$\langle m|N|m\rangle = m$$

e que então
$$\langle m|a^{\dagger}a|m\rangle = m$$

vemos que $\underline{\underline{m \geq 0}}$ por ser a norma do vetor
$$\underline{\underline{a|m\rangle}}$$

$$\langle m|a^{\dagger} = (a|m\rangle)^{\dagger}$$

$$\Rightarrow \quad (a|m\rangle)^{\dagger} a|m\rangle = m \geq 0$$

Se então, começando com um autoestado $|m\rangle$ fazemos aplicações sucessivas de a, i.e.

$$a|m\rangle = \sqrt{m}\,|m-1\rangle$$
$$a^2|m\rangle = \sqrt{m(m-1)}\,|m-2\rangle$$
$$a^3|m\rangle = \sqrt{m(m-1)(m-2)}\,|m-3\rangle$$
$$\vdots$$

chegará um momento em que o autoestado será
$$|0\rangle$$

dado que $m \geq 0$.

$$\Rightarrow \boxed{m \text{ deve ser um inteiro positivo (ou } \emptyset)}$$

⇒ o menor valor de m é zero

⇒ o menor autovalor da energia (do H) é então

$$\boxed{E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}} \Leftrightarrow |0\rangle$$

⇒ estado fundamental do oscilador harmônico

Energia do estado fundamental (número de ocupação igual a zero) não é zero. (MAIS sobre isso depois)

Começando com o estado fundamental $|0\rangle$ e aplicando $a^\dagger$ sucessivamente podemos gerar todos os estados.

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

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

$$|3\rangle = \frac{a^\dagger|2\rangle}{\sqrt{3}} = \frac{(a^\dagger)^2|1\rangle}{\sqrt{3.2}} = \frac{(a^\dagger)^3}{\sqrt{3.2.1}}|0\rangle$$

$$\vdots$$

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

$\Rightarrow$ $\{|n\rangle\}$ é uma base de autoestados de H e de N, com autovalores de H dados por

$$\boxed{E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)} \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

Os elementos de matriz dos operadores a e $a^\dagger$ na base $\{|n\rangle\}$ são

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

e

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

não disponíveis

Também podemos calcular os elementos de matriz de X e P na base $\{|n\rangle\}$. Para isso escrevemos

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

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

O que resulta em

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

e

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

$\Rightarrow$ X e P NÃO SÃO diagonais na base $\{|n\rangle\}$.

OK dado que NÃO comutam com N