

Capítulo 6

O Oscilador Harmônico

Um oscilador harmônico, de forma geral, é um objeto sujeito a uma força que depende linearmente do deslocamento em relação ao seu ponto de equilíbrio. O problema do potencial harmônico é de grande relevância em física, dado que qualquer mínimo de potencial local pode ser descrito por ele, desde que as perturbações no sistema impliquem sempre em valores suficientemente pequenos do deslocamento das partículas de sua condição de equilíbrio. Isto fica evidente descrevendo um mínimo de potencial genérico como expansão em série de Taylor e considerando o limite de $x \rightarrow 0$.

O hamiltoniano quântico desse problema é da forma:

$$H = \frac{P^2}{2M} + \frac{M\omega^2}{2}Q^2, \quad (6.1)$$

sendo que ω é uma constante característica do oscilador, P o operador momento e Q o operador posição. Antes de prosseguir para a solução quântica do oscilador harmônico, iremos tecer alguns comentários sobre seu análogo clássico.

Oscilador harmônico clássico: A forma do oscilador harmônico quântico (6.1) é inspirada no oscilador harmônico clássico, que é geralmente descrito pela função Lagrangiana (em uma dimensão, por simplicidade):

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x^2, \quad (6.2)$$

que considera o potencial harmônico $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$ e $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$. O método variacional (ou a solução da equação de Newton) nos dá a seguinte solução:

$$x(t) = A \cos(\omega t - \varphi), \quad (6.3)$$

para duas constantes de integração A e φ . É digno de nota que, dado um tempo t , é possível calcular o valor associado de $x(t)$. Considerando-se que A

e φ são conhecidos em $t = 0$, a equação (6.3) nos permite calcular a posição do oscilador, sua velocidade e aceleração para qualquer tempo $t > 0$, com precisão absoluta. Veremos que isso não acontece em mecânica quântica.

Outra forma de analisar o oscilador harmônico é fazer considerações de energia. Dada uma energia inicial E para o oscilador, a partícula se moverá num poço de potencial V de forma parabólica restrito aos pontos nos quais $E = V$ (ou seja, onde a energia cinética é zero, ver Fig. 6.1).

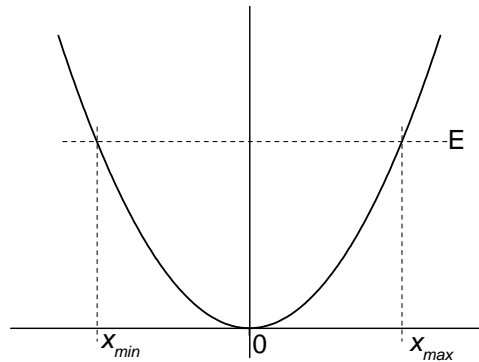


Figura 6.1: Diagrama de energia de um potencial quadrático V e a energia E de uma partícula. O movimento da partícula é periódico e restrito aos pontos x_{min} e x_{max} para os quais $E = V$ e $K = 0$.

6.1 Soluções do oscilador harmônico quântico na representação das coordenadas

Considerando o Hamiltoniano (6.1) na representação das coordenadas, a equação de Schrödinger para o oscilador harmônico unidimensional é dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{M\omega^2}{2} x^2 \psi(x) = E\psi(x). \quad (6.4)$$

que é uma equação diferencial de segunda ordem, e sua resolução nos leva às funções de onda quantizadas que são soluções permitidas para o oscilador. Para uma solução bastante detalhada desse problema, com a resolução da equação pelo método de soluções em séries de potências, indicamos a referência [?].

A solução do oscilador harmônico envolve uma função especial chamada **polinômios de Hermite**, designando o polinômio de n -ésima ordem por

$H_n(x)$. Com isso, a solução completa fica:

$$\psi_n(x) = \left[\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!} \right]^{1/2} H_n(\alpha x) e^{-\alpha^2 x^2/2}, \quad (6.5)$$

ilustradas na Fig. 6.2. $\alpha = \sqrt{M\omega/\hbar}$, que leva à energia:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (6.6)$$

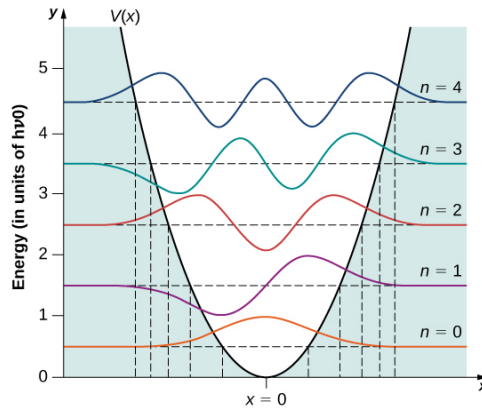


Figura 6.2: Diagrama de energia de um potencial quadrático V e a energia E de uma partícula. O movimento da partícula é periódico e restrito aos pontos x_{min} e x_{max} para os quais $E = V$ e $K = 0$.

Portanto, em um oscilador harmônico quântico, as energias são quantizadas, definidas pelo número quântico n . De fato, todo sistema periódico no tempo tem sua distribuição de energias quantizada. E a probabilidade de se encontrar a partícula em uma posição x é dada por $|\psi_n(x)|^2$.

6.2 Solução algébrica na estrutura da segunda quantização

Um procedimento de grande valor em mecânica quântica é a chamada segunda quantização. Para isto, deve-se buscar colocar o Hamiltoniano do problema na forma

$$H = V^\dagger V + \#, \quad (6.7)$$

sendo $\#$ um deslocamento em energia e, como veremos mais a frente, os operadores V^\dagger e V serão operadores de criação e aniquilação de um quantum de excitação do campo. Se estivemos falando do campo eletromagnético, teremos operadores de criação e aniquilação de fótons; se estivermos tratando de vibrações de uma rede atômica, falaremos de fônons, e etc., o procedimento podendo ser utilizado para magnons, plasmons, excitons, elétrons, férmions, bósons, pares de Cooper, etc., dependendo do Hamiltoniano em questão. Note que V^\dagger e V não precisam ser Hermitianos, ou seja, não são observáveis, mas H sim, considerando $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$.

Neste capítulo estamos falando de quanta de oscilações de um oscilador harmônico, e para colocar o Hamiltoniano (6.1) na forma desejada (6.7), definimos ($V = Q + iP/M\omega$) e, conseqüentemente, ($V^\dagger = Q - iP/M\omega$), considerando que $Q^\dagger = Q$ e $P^\dagger = P$, de forma que

$$H = \frac{1}{2}M\omega^2 V^\dagger V + \frac{1}{2}\hbar\omega. \quad (6.8)$$

Por fim, pela relação canônica de comutação, $[Q, P] = i\hbar$, notamos que o comutador $[V, V^\dagger] = \frac{2\hbar}{M\omega}$ e, para trabalharmos com uma equação de operadores unidimensionais, definimos os novos operadores ($a = \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}}V$) e ($a^\dagger = \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}}V^\dagger$), de forma que $[a, a^\dagger] = 1$. Desta forma, o Hamiltoniano torna-se

$$H = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right). \quad (6.9)$$

Equivalência com tratamento usual: O Hamiltoniano (6.9) é aquele obtido usualmente nos livros texto sobre o oscilador harmônico quantizado onde, para resolver o problema, é comum iniciar definindo os operadores adimensionais:

$$q = \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}}Q, \quad p = \sqrt{\frac{1}{M\hbar\omega}}P. \quad (6.10)$$

Pela relação canônica de comutação, $[Q, P] = i\hbar$, encontra-se:

$$[q, p] = i, \quad (6.11)$$

de forma que o hamiltoniano (6.1) pode ser reescrito como sendo:

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega (q^2 + p^2). \quad (6.12)$$

Na seqüência, introduz-se os operadores a e a^\dagger :

$$a = \frac{q + ip}{\sqrt{2}}, \quad a^\dagger = \frac{q - ip}{\sqrt{2}}. \quad (6.13)$$

6.2. SOLUÇÃO ALGÉBRICA NA ESTRUTURA DA SEGUNDA QUANTIZAÇÃO 109

Calculemos:

$$\begin{aligned} [a, a^\dagger] &= \frac{1}{2} [(q + ip), (q - ip)] = \frac{1}{2} [(q^2 - iqp + ipq + p^2) - (q^2 + iqp - ipq + p^2)] \\ &= \frac{1}{2} i (2pq - 2qp) = i [p, q] = 1. \end{aligned} \quad (6.14)$$

A equação (6.12) pode ser invertida para encontrar:

$$p = \frac{i}{\sqrt{2}} (a^\dagger - a), \quad q = \frac{1}{\sqrt{2}} (a^\dagger + a). \quad (6.15)$$

Com as definições de p e q em função de a e a^\dagger , pode-se reescrever o hamiltoniano (6.12) em termos desses novos operadores:

$$H = \frac{1}{2} \hbar \omega (aa^\dagger + a^\dagger a). \quad (6.16)$$

E usando a relação de comutação (6.14):

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad \Rightarrow \quad a^\dagger a = aa^\dagger - 1, \quad (6.17)$$

temos que:

$$H = \hbar \omega \left(aa^\dagger - \frac{1}{2} \right) = \hbar \omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right), \quad (6.18)$$

sendo que o último termo dessa expressão é a forma mais usual do hamiltoniano do operador harmônico em termos de a e a^\dagger , idêntica à forma encontrada em (6.9).

\Rightarrow Resolva o exercício 5.1.

6.2.1 Os operadores criação, aniquilação e número

Definindo o operador $N = a^\dagger a$ podemos escrever:

$$H = \hbar \omega \left(N + \frac{1}{2} \right). \quad (6.19)$$

Note que encontrar o espectro do hamiltoniano do oscilador harmônico (e, portanto, resolver o problema quântico) é matematicamente equivalente a encontrar o espectro do operador N . Esse operador satisfaz às seguintes relações de comutação:

$$[N, a] = -a, \quad [N, a^\dagger] = a^\dagger. \quad (6.20)$$

\Rightarrow Resolva o exercício 6.2.

Consideremos que:

$$N|\nu\rangle = \nu|\nu\rangle, \text{ com } \langle\nu|\nu\rangle \neq 0, \quad (6.21)$$

calculemos:

$$[N, a]|\nu\rangle = Na|\nu\rangle - aN|\nu\rangle = -a|\nu\rangle \quad (6.22)$$

em que usamos a primeira relação de comutação de (6.20). Com isso encontramos:

$$Na|\nu\rangle = aN|\nu\rangle - a|\nu\rangle = a(N-1)|\nu\rangle, \quad (6.23)$$

com isso, vemos que $(a|\nu\rangle)$ é autovetor de N com autovalor $(\nu-1)$:

$$N(a|\nu\rangle) = (\nu-1)a|\nu\rangle. \quad (6.24)$$

Calculemos, agora:

$$|a|\nu\rangle|^2 = \langle\nu|a^\dagger a|\nu\rangle = \langle\nu|N|\nu\rangle = \nu\langle\nu|\nu\rangle. \quad (6.25)$$

Como a norma do vetor deve ser não-negativa, e $\langle\nu|\nu\rangle \neq 0$, temos que $\nu \geq 0$, ou seja, o autovalor de N não pode ser negativo.

Podemos seguir esse procedimento recursivamente ao aplicar N em $(a^i|\nu\rangle)$ ¹, com $i = 1, 2, 3, \dots$. Isso nos levará para os autovalores sucessivos $(\nu-i)$ de N nos seus autovetores $(a^i|\nu\rangle)$, até o primeiro autovalor negativo (para $i > \nu$), o que seria conflitante. Portanto, essa sequência de aplicações sucessivas do operador a em $|\nu\rangle$ tem que terminar quando o autovalor de N chegar a zero. Matematicamente escrevemos esse estado como sendo $|\nu\rangle = |0\rangle$, tal que:

$$a|0\rangle \equiv 0. \quad (6.26)$$

Ou seja, neste caso, a operação do operador a não gera um vetor.

Uma outra forma de ver essa limitação é buscando o valor esperado da energia

$$\begin{aligned} \langle\psi|H|\psi\rangle &= \langle\psi|\hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)|\psi\rangle \\ &= \hbar\omega\left(\langle\psi|a^\dagger a|\psi\rangle + \frac{1}{2}\langle\psi|\psi\rangle\right) \\ &= \hbar\omega\left(|a|\nu\rangle|^2 + \frac{1}{2}\right), \end{aligned} \quad (6.27)$$

que é um número que não pode ser negativo. Ou seja, o oscilador harmônico quântico não permite soluções de energia negativa.

¹Note que $a^3|\nu\rangle = aaa|\nu\rangle$, e assim para qualquer valor de i .

6.2. SOLUÇÃO ALGÉBRICA NA ESTRUTURA DA SEGUNDA QUANTIZAÇÃO 111

Repetiremos o mesmo procedimento iniciado em (6.22) usando agora o operador a^\dagger :

$$[N, a^\dagger] |\nu\rangle = Na^\dagger |\nu\rangle - a^\dagger N |\nu\rangle = a^\dagger |\nu\rangle, \quad (6.28)$$

onde utilizamos a segunda relação de comutação de (6.20). Com isso encontramos:

$$Na^\dagger |\nu\rangle = a^\dagger N |\nu\rangle + a^\dagger |\nu\rangle = a^\dagger (N + 1) |\nu\rangle. \quad (6.29)$$

Com isso vemos que $(a^\dagger |\nu\rangle)$ é autovetor de N com autovalor $(\nu + 1)$:

$$N (a^\dagger |\nu\rangle) = (\nu + 1) a^\dagger |\nu\rangle. \quad (6.30)$$

Calculemos, agora:

$$|a^\dagger |\nu\rangle|^2 = \langle \nu | aa^\dagger | \nu \rangle = \langle \nu | N + 1 | \nu \rangle = (\nu + 1) \langle \nu | \nu \rangle, \quad (6.31)$$

essa sequência não zera nunca pois $\nu \geq 0$. Isso significa que podemos aplicar a^\dagger sucessivamente para gerarmos os autovalores $\nu + 1$, $\nu + 2$, etc. Por isso podemos concluir que o espectro de N corresponde a inteiros não-negativos:

$$N |n\rangle = n |n\rangle. \quad (6.32)$$

Estamos, agora, interessados em descobrir como a e a^\dagger atuam em $|n\rangle$. As equações (6.24) e (6.30) mostram que as atuações de a e a^\dagger em $|n\rangle$ levam a autovetores de N com autovalores $(n - 1)$ e $(n + 1)$, respectivamente. Podemos, então, escrever:

$$a^\dagger |n\rangle = c_n |n + 1\rangle, \quad (6.33)$$

e a condição de normalização exige:

$$|c_n|^2 = (\langle n | a) (a^\dagger |n\rangle) = \langle n | N + 1 |n\rangle = n + 1, \quad (6.34)$$

logo, exigimos que $c_n = \sqrt{n + 1}$, de forma que:

$$a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n + 1} |n + 1\rangle. \quad (6.35)$$

Note que utilizando a^\dagger recursivamente a partir do estado $|0\rangle$, podemos gerar qualquer estado $|n\rangle$ da seguinte forma:

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{n!} |0\rangle. \quad (6.36)$$

Repetindo um procedimento semelhante para a , encontramos:

$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n - 1\rangle, \quad (6.37)$$

que vale para $n > 0$. Para $n = 0$, vale a equação (6.26).

Na base dos autoestados de N , os elementos de matrizes de a e a^\dagger são dados por²:

$$a^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad a = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (6.38)$$

Retornando ao operador hamiltoniano (6.19) e buscando a solução da equação de Schrödinger utilizando o autovetor de N , $|n\rangle$, temos:

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle = \hbar\omega\left(N + \frac{1}{2}\right)|n\rangle = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)|n\rangle, \quad (6.39)$$

e encontramos:

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (6.40)$$

Como $n = 0, 1, 2, \dots$, as variações de energia em um oscilador harmônico são quantizadas. O estado de menor energia não corresponde a um oscilador parado, com energia nula, mas sim um estado fundamental com energia de ponto zero $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$.

Por ter a característica de aumentar a energia, levando $|n\rangle \rightarrow |n+1\rangle$, chamamos a^\dagger de **operador criação**, e seu adjunto, a , de **operador aniquilação (ou destruição)**. Em outras palavras, estes operadores criam e destroem um quantum de energia $\hbar\omega$.

Já o operador N é chamado de **operador número**. Ele é Hermitiano, e mede o número de quanta de energia no sistema, ou seja, o número de quanta de osciladores harmônicos.

6.2.2 Funções de onda através do operador aniquilação

As soluções para as funções de onda do oscilador harmônico apresentadas em §6.1 (Fig. 6.1) advém de uma equação diferencial de segunda ordem que pode ser significativamente simplificada utilizando-se a equação (6.26). Tem-se que:

$$a|0\rangle = \left(Q + \frac{iP}{M\omega}\right)|0\rangle = 0, \quad (6.41)$$

²Basta calcular $\langle n'|a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{n',n+1}$ e o equivalente para a .

que na representação de coordenadas fica

$$\left(x + \frac{\hbar}{M\omega} \frac{d}{dx}\right) \psi_0(x) = 0. \quad (6.42)$$

Esta é uma equação de primeira ordem, cuja solução é

$$\psi_0(x) = \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{M\omega}{2\hbar}x^2}, \quad (6.43)$$

que equivale à solução da equação (6.5) para $n = 0$ ³. As outras funções $\psi_n(x)$ podem ser obtidas por equações diferenciais de primeira ordem geradas pela aplicação do operador criação $a^\dagger = (Q - \frac{iP}{M\omega}) = \left(x - \frac{\hbar}{M\omega} \frac{d}{dx}\right)$ em $\psi_{n-1}(x)$, recursivamente para $n = 1, 2, \dots$, conforme (6.36).

6.3 Solução na representação de H

Em §6.1 e §6.2.2, usamos a representação de coordenadas:

$$\psi_n(x) = \langle x | n \rangle, \quad (6.44)$$

que é uma função de x para um valor n fixo. Entretanto, ao invés de calcular o espectro de H na representação que diagonaliza Q , pode-se calcular o espectro de Q na representação que diagonaliza H . Ou seja, buscamos agora, o contrário, $\langle n | x \rangle$. De (6.13) e (6.15) temos

$$Q = \left(\frac{\hbar}{2M\omega}\right) (a + a^\dagger). \quad (6.45)$$

De (6.38) podemos construir a matriz que representa Q na base dos autovetores de H :

$$\langle n' | Q | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \sqrt{4} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (6.46)$$

daí a equação de autovalores para Q , $Q|x\rangle = x|x\rangle$ toma a seguinte forma nessa representação:

$$\sum_n \langle n' | Q | n \rangle \langle n | x \rangle = x \langle n' | x \rangle, \quad (6.47)$$

³O polinômio de Hermite $H_0(x) = 1$.

tal que usando a matriz da equação (6.46) encontramos:

$$\sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}} \left[\sqrt{n'} \langle n' - 1 | x \rangle + \sqrt{n' + 1} \langle n' + 1 | x \rangle \right] = x \langle n' | x \rangle. \quad (6.48)$$

Essa equação pode ser usada recursivamente para obter, a partir do estado fundamental $\langle 0 | x \rangle$, todos os estados excitados: $\langle 1 | x \rangle$, $\langle 2 | x \rangle$, etc. Portanto, conhecendo a função de onda do estado fundamental, é possível reproduzir os demais estados excitados. A consistência entre as soluções nas representações de coordenadas e de H pode ser demonstrada substituindo-se (6.5) em (6.48). O resultado será uma identidade sabidamente satisfeita pelos polinômios de Hermite.

6.4 Exercícios

Exercício 6.1 *Prove que o hamiltoniano dado pela equação (6.12) usando a transformação (6.13) pode ser posto na forma da equação (6.16).*

Exercício 6.2 *Prove que $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$ e demonstre as equações (6.20).*

Exercício 6.3 *Resolva os exercícios do livro do Ballentine [?].*