

# Mecânica Quântica

## Oscilador Harmônico Quântico

Autor: José Renato Alcarás

### Sumário

1. Consideração Inicial
2. Motivação: Oscilador Harmônico Clássico
  - a) Aplicações
  - b) Abordagem Matemática
  - c) Potenciais complicados
3. O Oscilador Harmônico Quântico
  - a) Construção
  - b) Propriedades de  $\mathbb{H}$
  - c) Os operadores  $\hat{H}$ ,  $\hat{p}$  e  $\hat{x}$
  - d) Os operadores  $a^\dagger$ ,  $a$  e  $\mathbb{N}$
  - e) Entendendo  $a$  e  $a^\dagger$
  - f) Resumo: as relações entre  $a$ ,  $a^\dagger$ ,  $\hat{H}$  e  $\mathbb{H}$
4. A função de onda do OHQ
  - a) Os kets  $|\varphi_n\rangle$
  - b) A representação matricial de  $a$  e  $a^\dagger$
  - c) O estado fundamental  $\varphi_0(x)$
  - d) Os estados excitados  $\varphi_n(x)$ ,  $n > 0$
5. Resumo
6. Oscilador Harmônico Quântico em 3 dimensões
  - a) Caso I: as frequências angulares dependem da direção
  - b) Caso II: existe uma única frequência de oscilação
7. Oscilador Harmônico Quântico na presença de um campo elétrico
8. Considerações Finais

## 1. Consideração Inicial

A maior parte desse trabalho encontra-se no livro “Quantum Mechanics”, dos autores Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu e Franck Laloë, traduzido para o inglês do francês por Susan Reid Hemley, Nicole Ostrowsky e Dan Ostrowsky. Meu trabalho aqui foi o de traduzir e sumarizar as informações do capítulo 5, *The one-dimensional harmonic oscillator*. Constantes referências a esse capítulo serão feitas no texto.

## 2. Motivação: Oscilador Harmônico Clássico

### a) Aplicações

O estudo do oscilador harmônico se faz necessário tendo em vista a tamanha utilidade de sua ideologia. Qualquer sistema físico que oscile em torno de um ponto de equilíbrio estável pode ser razoavelmente aproximado por um oscilador harmônico nas vizinhanças desse ponto de equilíbrio. Dessa forma, a aplicabilidade desse sistema físico é tão ampla quanto se possa imaginar: cinética de moléculas estáveis, vibrações em estruturas cristalinas, oscilações torcionais de moléculas, oscilações em cavidades ópticas, etc.

### b) Abordagem matemática

O oscilador harmônico clássico surge de um sistema físico onde uma massa  $m$  está sujeita a uma força restauradora que atua proporcionalmente a sua posição: supondo que o equilíbrio da partícula encontra-se na posição  $x = 0$ , então a força restauradora tenta fazer com que  $m$  retorne a esse ponto, atuando como:

$$F = -kx \quad (2.1)$$

Onde  $k$  indica a proporcionalidade da força com a posição da partícula. A generalização dessa força, considerando o ponto de equilíbrio sendo  $x = x_0$  é dada por  $F = -k(x - x_0)$ , para futuras referências. Tratando o caso simples, onde  $x_0 = 0$ , podemos partir para o estudo da energia potencial do sistema. A energia potencial diz respeito à capacidade do sistema em oscilar e está diretamente relacionada à força atuante sobre ele por:

$$F = -\frac{dV}{dx} \quad (2.2)$$

(Ou, no caso tridimensional,  $\vec{F} = -\vec{\nabla}V$ ). De 2.2, usando 2.1, podemos obter o potencial do sistema como:

$$V(x) = V_0 + \frac{kx^2}{2}$$

Onde  $V_0$  é o potencial da partícula no estado de equilíbrio. Por conveniência, podemos simplificar o problema e supor que o potencial mínimo da partícula é 0, originando

$$\boxed{V(x) = \frac{1}{2}kx^2} \quad (2.3)$$

Esse é o **potencial do oscilador harmônico unidimensional**. A frequência angular de oscilação,  $\omega$ , é dada por:

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (2.4)$$

A equação do movimento (2ª lei de Newton) para esse sistema unidimensional é

$$F = ma$$

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -kx$$

$$\boxed{\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2x = 0} \quad (2.4)$$

Essa equação diferencial linear de segunda ordem tem como solução várias combinações de funções. Simplificando ao máximo, podemos dizer que:

$$x(t) = x_M \cos(\omega t - \varphi) \quad (2.5)$$

Onde  $x_M$  é a posição extrema da partícula (a distância máxima partindo de 0 que a partícula atinge) e  $\varphi$  uma fase da oscilação (essas duas constantes aparecem na solução da equação diferencial por conta da mesma ser uma equação de segunda ordem e necessitar de, portanto, duas constantes de integração).

Essa solução permite que compreendamos a posição do oscilador harmônico como composto de oscilações cossenoidais ao redor do ponto de equilíbrio, de acordo com uma frequência angular  $\omega$ . A energia cinética  $T$  do oscilador é:

$$T = \frac{1}{2}m \left(\frac{dx}{dt}\right)^2 = \frac{p^2}{2m}$$

Onde  $p = m \frac{dx}{dt}$  é o momento linear da partícula. A energia total  $E$  do sistema é a soma da energia cinética  $T$  com a energia potencial  $V$ , sendo nesse caso:

$$\boxed{E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2} \quad (2.6)$$

### c) Potenciais complicados

Vamos supor um potencial geral que possui um conjunto de mínimos locais. Um desses mínimos locais é  $x = x_0$ . Expandindo o potencial  $V(x)$  numa série de Taylor ao redor do ponto  $x_0$ , temos:

$$V(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n V}{dx^n}(x_0)(x - x_0)^n = V(x_0) + \left. \frac{dV}{dx} \right|_{x=x_0} (x - x_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2V}{dx^2} \right|_{x=x_0} (x - x_0)^2 + \dots$$

Mas se  $x_0$  é mínimo local,  $\frac{dV}{dx}\Big|_{x=x_0} = 0$  e  $\frac{d^2V}{dx^2}\Big|_{x=x_0} > 0$ . Além disso, se a expansão é feita para vizinhanças suficientemente pequenas de  $x_0$ , os termos  $(x - x_0)^3, (x - x_0)^4, \dots$ , são muito pequenos se comparados a  $(x - x_0)^2$ , de forma que podemos aproximar:

$$V(x) \approx V(x_0) + \frac{1}{2}k(x - x_0)^2 \quad (2.7)$$

Onde  $k = \frac{d^2V}{dx^2}\Big|_{x=x_0} > 0$ . Esse potencial é igual ao caso mais geral do potencial harmônico. Por isso, podemos **sempre** aproximar um potencial complicado por um potencial harmônico nas vizinhanças de um ponto de equilíbrio estável. Daí a importância do oscilador.

### 3. O Oscilador Harmônico Quântico

#### a) Construção

Partindo das quantidades clássicas  $x$  e  $p$ , podemos construir os observáveis  $\mathbb{x}$  e  $\mathbb{p}_x$  (iremos omitir o índice do operador momento porque aqui iremos lidar apenas em uma dimensão). Esses operadores, atuantes sobre a base das posições, originam as seguintes relações:

$$\mathbb{x}|x\rangle = x|x\rangle \quad (3.1)$$

$$\mathbb{p}|x\rangle = i\hbar \frac{d}{dx}|x\rangle \quad (3.2)$$

Vale lembrar que essas relações são válidas em casos unidimensionais. O comutador entre  $\mathbb{x}$  e  $\mathbb{p}$ ,  $[\mathbb{x}, \mathbb{p}]$ , pode ser calculado aplicando-o num ket  $|\varphi\rangle$  aleatório do espaço de Hilbert:

$$[\mathbb{x}, \mathbb{p}]|\varphi\rangle = \mathbb{x}\mathbb{p}|\varphi\rangle - \mathbb{p}\mathbb{x}|\varphi\rangle$$

Projetando sobre a base das posições,  $|x\rangle$ , temos:

$$\langle x|[\mathbb{x}, \mathbb{p}]|\varphi\rangle = \langle x|\mathbb{x}\mathbb{p}|\varphi\rangle - \langle x|\mathbb{p}\mathbb{x}|\varphi\rangle$$

Usando 3.1 e 3.2, temos:

$$\langle x|[\mathbb{x}, \mathbb{p}]|\varphi\rangle = \langle x|x\mathbb{p}|\varphi\rangle - \langle x| -i\hbar \frac{d}{dx}\mathbb{x}|\varphi\rangle$$

Jogando as constantes pra fora:

$$\langle x|[\mathbb{x}, \mathbb{p}]|\varphi\rangle = x\langle x|\mathbb{p}|\varphi\rangle + i\hbar \frac{d}{dx}\langle x|\mathbb{x}|\varphi\rangle$$

Novamente, usando 3.1 e 3.2, temos:

$$\langle x|[\mathbb{x}, \mathbb{p}]|\varphi\rangle = x\left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right)\langle x|\varphi\rangle + \left(i\hbar \frac{d}{dx}\right)x\langle x|\varphi\rangle$$

Usando a regra da cadeia no segundo termo:

$$\langle x | [\mathbb{X}, \mathbb{P}] | \varphi \rangle = -x \left( i\hbar \frac{d}{dx} \right) \langle x | \varphi \rangle + (i\hbar) \left[ \langle x | \varphi \rangle + x \frac{d}{dx} \langle x | \varphi \rangle \right]$$

Que nos deixa com

$$\langle x | [\mathbb{X}, \mathbb{P}] | \varphi \rangle = \langle x | i\hbar | \varphi \rangle$$

Logo,

$$\boxed{[\mathbb{X}, \mathbb{P}] = i\hbar} \quad (3.3)$$

A dedução desse comutador foi feita por ser de fundamental importância no tratamento do oscilador harmônico. O procedimento de transição da situação clássica para a quântica se dá pela promoção da energia total do sistema clássico,  $E = T + V$ , no hamiltoniano do sistema quântico,  $\mathbb{H} = \mathbb{T} + \mathbb{V}$ . Nesse caso, temos:

$$\mathbb{T} = \frac{\mathbb{p}^2}{2m}$$

E

$$\mathbb{V}(\mathbb{x}) = \frac{1}{2} k \mathbb{x}^2$$

Para que a notação seja simplificada, vamos escrever  $k = m\omega^2$ , de forma que:

$$\mathbb{V}(\mathbb{x}) = \frac{1}{2} m\omega^2 \mathbb{x}^2$$

Assim, o hamiltoniano  $\mathbb{H}$  do sistema se torna:

$$\mathbb{H} = \frac{\mathbb{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \mathbb{x}^2 \quad (3.4)$$

Como ele é independente do tempo, podemos dizer que a função de onda  $\Psi(x, t)$  é composta por um produto da dependência temporal  $e^{iEt/\hbar}$  com uma função de onda dependente unicamente da posição,  $\varphi(x)$ . Ou seja,

$$\Psi(x, t) = e^{\frac{iEt}{\hbar}} \varphi(x)$$

Na notação de kets e bras,

$$\langle x | \Psi(t) \rangle = e^{\frac{iEt}{\hbar}} \langle x | \varphi \rangle$$

Isso implica que o problema do oscilador harmônico quântico se resume a resolver a equação de autovalores e autovetores:

$$\mathbb{H} | \varphi \rangle = E | \varphi \rangle$$

Projetando sobre a base das posições, ficamos com:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right] \varphi(x) = E \varphi(x) \quad (3.5)$$

Essa equação diferencial é de difícil resolução. Por tanto, iremos introduzir novos conceitos matemáticos para resolver esse problema. Antes disso, irei enunciar algumas propriedades do hamiltoniano do oscilador harmônico quântico.

## b) Propriedades de $\mathbb{H}$

(i) Os autovalores de  $\mathbb{H}$  são positivos.

Essa propriedade pode ser facilmente demonstrada. Tome a equação de Schrödinger independente do tempo no caso mais geral onde o potencial é  $V(x)$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} + V(x) \varphi(x) = E \varphi(x)$$

Multiplique-a toda por  $\varphi^*(x)$  e integre ambos os lados em todo o domínio:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi^*(x) \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) + \int_{-\infty}^{\infty} dx V(x) |\varphi(x)|^2 = E \int_{-\infty}^{\infty} dx |\varphi(x)|^2$$

Para uma função de onda normalizada,  $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\varphi(x)|^2 = 1$ , o que nos leva a escrever:

$$\langle V \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx V(x) |\varphi(x)|^2 = \langle \varphi | \mathbb{V}(\mathbf{x}) | \varphi \rangle$$

E

$$\langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi^*(x) \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x)$$

Essa expressão pode ser trabalhada da seguinte forma: tome  $u = \varphi^*(x)$  e  $dv = \frac{d^2 \varphi}{dx^2} dx$  e realize uma integração por partes:

$$\langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \underbrace{\left( \varphi^* \frac{d\varphi}{dx} \right)_{-\infty}^{\infty}}_{=0} - \int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{d\varphi}{dx} \right|^2 dx \right] = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{d\varphi}{dx} \right|^2 dx$$

Logo, podemos dizer que:

$$\langle T \rangle > 0$$

E

$$\langle V \rangle \geq V_0$$

Onde  $V_0$  é o mínimo do potencial. Dessa forma,  $E > V_0$  e, portanto, os autovalores de  $\mathbb{H}$  (ou seja,  $E$ ) são sempre positivos (mesmo se tomamos  $V_0 = 0$ ).

(ii) O espectro de energias é discreto e não degenerado.

A demonstração desse fato é um pouco longa e não será feita, por não ter muita relevância (o fato do espectro ser não degenerado e discreto é **fundamental**, mas sua demonstração é que não tem muito propósito aqui). Nós ainda iremos obter quais são os valores das energias, mas é importante ter em mente que esses valores serão discretos e para um dado índice  $n$ , a energia  $E_n$  do estado estará exclusivamente relacionada a uma única autofunção  $|\varphi_n\rangle$ .

### c) Os operadores $\hat{\mathbb{H}}$ , $\hat{\mathbb{p}}$ e $\hat{\mathbb{x}}$

No caso do oscilador harmônico quântico, a equação 3.5 é muito difícil de ser resolvida. Precisamos de algumas modificações matemáticas que a torne mais conveniente. Vamos tomar a equação de autovalores e autovetores explicitando  $\mathbb{H}$ :

$$\left[ \frac{\mathbb{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \mathbb{x}^2 \right] |\varphi\rangle = E |\varphi\rangle$$

Dividindo os dois lados da equação por  $\hbar\omega$ , temos:

$$\left[ \frac{\mathbb{p}^2}{2m\hbar\omega} + \frac{m\omega}{2\hbar} \mathbb{x}^2 \right] |\varphi\rangle = \frac{E}{\hbar\omega} |\varphi\rangle$$

Note que o lado direito da equação foi tornado adimensional. Dessa forma, o lado esquerdo **também deve ser adimensional**. Ou seja, vamos definir novos operadores adimensionais especiais:

$$\hat{\mathbb{p}} = \frac{\mathbb{p}}{\sqrt{m\hbar\omega}}$$

E

$$\hat{\mathbb{x}} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \mathbb{x}$$

De tal forma que obtenhamos:

$$\frac{1}{2} [\hat{\mathbb{p}}^2 + \hat{\mathbb{x}}^2] |\varphi\rangle = \frac{E}{\hbar\omega} |\varphi\rangle$$

Ou seja, o lado esquerdo da expressão mostra um **operador hamiltoniano adimensional**  $\hat{\mathbb{H}} = \frac{1}{2} [\hat{\mathbb{p}}^2 + \hat{\mathbb{x}}^2]$  atuando sobre um autoestado  $|\varphi\rangle$  e retornando um autovalor adimensional  $\frac{E}{\hbar\omega}$ :

$$\hat{\mathbb{H}} |\varphi\rangle = \frac{E}{\hbar\omega} |\varphi\rangle$$

A relação entre o hamiltoniano  $\mathbb{H}$  e seu adimensional é:

$$\mathbb{H} = \hbar\omega \hat{\mathbb{H}}$$

Esses operadores adimensionais ainda são de difícil trabalho. No entanto, faremos uso de seu comutador mais adiante. Fica a cargo do leitor a demonstração de que (de forma análoga a  $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ ):

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i \quad (3.6)$$

#### d) Os operadores $a^\dagger$ , $a$ e $\mathbb{N}$

A real simplificação da equação de Schrödinger reside não somente na adimensionalidade da mesma, mas na combinação conveniente de operadores. De fato, podemos tomar um par de operadores muito convenientes para trabalhar. Isso se dará da seguinte forma: note que poderíamos escrever  $\hat{p}^2 + \hat{x}^2 = (\hat{x} - i\hat{p})(\hat{x} + i\hat{p})$ , **se esses operadores comutassem** (ou se fossem números complexos). Mas a equação que temos até agora é:

$$\frac{1}{2} [\hat{p}^2 + \hat{x}^2] |\varphi\rangle = \frac{E}{\hbar\omega} |\varphi\rangle$$

Ou seja, vamos criar dois operadores que multiplicados “originem” o operador do lado esquerdo da equação. Definem-se

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} + i\hat{p}) \quad (3.7)$$

E

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} - i\hat{p}) \quad (3.8)$$

São esses operadores que iremos usar para tratar o problema do oscilador harmônico. Vamos inverter as relações 3.7 e 3.8 para exibir  $\hat{x}$  e  $\hat{p}$  em termos de  $a$  e  $a^\dagger$ :

$$\hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2}} (a^\dagger + a) \quad (3.9)$$

$$\hat{p} = \frac{1}{\sqrt{2}} (a^\dagger - a) \quad (3.10)$$

Essas relações são fundamentais e precisam ser memorizadas. Vamos trabalhar um pouco com  $a^\dagger$  e  $a$ : inicialmente, vamos encontrar seu comutador.

$$[a, a^\dagger] = \frac{1}{2} [\hat{x} + i\hat{p}, \hat{x} - i\hat{p}] = \frac{i}{2} \left\{ \underbrace{[\hat{p}, \hat{x}]}_{=-i} - \underbrace{[\hat{x}, \hat{p}]}_{=i} \right\} = 1$$

Ou seja,  $[a, a^\dagger] = 1$ . Essa comutação é consequência direta de  $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ , calculado anteriormente. Como  $a$  e  $a^\dagger$  não comutam, fica claro que  $a^\dagger a$  não terá a mesma aplicação que  $\frac{1}{2}[\hat{p}^2 + \hat{x}^2]$ , como gostaríamos. No entanto, ainda assim, eles são úteis. Vamos exibir  $a^\dagger a$ :

$$\begin{aligned} a^\dagger a &= \frac{1}{2}(\hat{x} - i\hat{p})(\hat{x} + i\hat{p}) \\ &= \frac{1}{2}(\hat{x}^2 + \hat{p}^2 + i\hat{x}\hat{p} - i\hat{p}\hat{x}) \\ &= \frac{1}{2}\left(\hat{x}^2 + \hat{p}^2 + i\underbrace{[\hat{x}, \hat{p}]}_{=i}\right) \\ &= \frac{1}{2}(\hat{x}^2 + \hat{p}^2 - 1) = \frac{1}{2}(\hat{x}^2 + \hat{p}^2) - \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Tínhamos definido  $\hat{\mathbb{H}} = \frac{1}{2}(\hat{x}^2 + \hat{p}^2)$ . Logo, temos que:

$$\hat{\mathbb{H}} = a^\dagger a + \frac{1}{2} \quad (3.11)$$

De forma análoga, mostra-se que:

$$\hat{\mathbb{H}} = a a^\dagger - \frac{1}{2} \quad (3.12)$$

(De fato, basta usar que  $[a, a^\dagger] = a a^\dagger - a^\dagger a = 1$  que 3.11 origina 3.12 de imediato).

Daremos um nome ao operador  $a^\dagger a$ : define-se o operador **número**  $\mathbb{N}$  como sendo

$$\mathbb{N} = a^\dagger a \quad (3.13)$$

Esse operador é claramente hermitiano, pois:

$$\mathbb{N}^\dagger = (a^\dagger a)^\dagger = a^\dagger a = \mathbb{N}$$

(Lembre-se que o conjugado hermitiano de uma expressão é sempre feito invertendo a ordem da expressão e tomando o conjugado hermitiano de cada um dos componentes).

Além disso, podemos relacionar  $\hat{\mathbb{H}}$  com  $\mathbb{N}$  como:

$$\hat{\mathbb{H}} = \mathbb{N} + \frac{1}{2} \quad (3.14)$$

Qual é a funcionalidade desse operador? Por que tivemos todo esse trabalho para escrevê-lo? Note o seguinte:

$$\hat{\mathbb{H}}|\varphi\rangle = \frac{E}{\hbar\omega}|\varphi\rangle$$

Substituindo o operador  $\hat{\mathbb{H}}$  por  $\mathbb{N} + \frac{1}{2}$ , temos:

$$\mathbb{N}|\varphi\rangle + \frac{1}{2}|\varphi\rangle = \frac{E}{\hbar\omega}|\varphi\rangle$$

$$\therefore \mathbb{N}|\varphi\rangle = \left(\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}\right)|\varphi\rangle$$

Perceba que a quantidade entre parênteses é um **número**, que iremos denotar por  $n$ . Esse número poderia ser qualquer valor real se a energia  $E$  fosse contínua. No entanto, expusemos que o espectro de energias é discreto, ou seja, as energias só assumem valores bem definidos  $E_n$ , de forma que  $n$  é inteiro. Ou seja,

$$\mathbb{N}|\varphi_n\rangle = n|\varphi_n\rangle \quad (3.15)$$

Essa equação de autovalores e autovetores é o motivo pelo qual iremos trabalhar usando os operadores  $a$ ,  $a^\dagger$  e  $\mathbb{N}$ : para cada autofunção  $|\varphi_n\rangle$ , apenas um único autoestado  $n$  existe e ele define a energia do sistema como  $E_n$ . O espectro de autovetores de  $\hat{\mathbb{H}}$  é igual ao de  $\mathbb{N}$ , de forma que **todo autovetor de  $\mathbb{N}$  é autovetor de  $\hat{\mathbb{H}}$**  e, portanto, **é autovetor de  $\mathbb{H}$**  a menos de uma constante multiplicativa. O espectro de autovalores também tem a mesma relação entre esses operadores.

### e) Entendendo $a$ e $a^\dagger$

Qual é a atuação de  $a$  e  $a^\dagger$  sobre os autovetores do hamiltoniano,  $|\varphi_n\rangle$ ? Suponha que  $|\varphi_n\rangle$  seja um autovetor de  $\mathbb{N}$  com autovalor  $n$ . Ou seja,

$$\mathbb{N}|\varphi_n\rangle = n|\varphi_n\rangle$$

Vamos aplicar o comutador  $[\mathbb{N}, a]$  sobre  $|\varphi_n\rangle$ . Para isso, precisamos inicialmente calcular quanto vale esse comutador:

$$\begin{aligned} [\mathbb{N}, a] &= [a^\dagger a, a] = a^\dagger a a - \underbrace{a a^\dagger}_{=a^\dagger a + [a, a^\dagger]} a = a^\dagger a a - (a a^\dagger + 1)a \\ \therefore [\mathbb{N}, a] &= -a \quad (3.16) \end{aligned}$$

Com esse resultado, façamos:

$$[\mathbb{N}, a]|\varphi_n\rangle = -a|\varphi_n\rangle$$

Podemos reescrever o lado esquerdo como:

$$\begin{aligned} \mathbb{N}(a|\varphi_n\rangle) - a(\mathbb{N}|\varphi_n\rangle) &= -a|\varphi_n\rangle \\ \mathbb{N}(a|\varphi_n\rangle) - n(a|\varphi_n\rangle) &= -a|\varphi_n\rangle \\ \therefore \mathbb{N}(a|\varphi_n\rangle) &= (n-1)(a|\varphi_n\rangle) \end{aligned}$$

Ou seja,  $a|\varphi_n\rangle$  é um autovetor de  $n$  com autovalor  $n-1$ . **Atuar  $a$  sobre um estado  $n$  leva a um estado um nível abaixo de  $n$ .** Por isso, o operador  $a$  recebe o nome de **operador destruição** ou **operador abaixamento**.

De forma análoga, vamos atuar  $[\mathbb{N}, a^\dagger]$  sobre  $|\varphi_n\rangle$ . Pra começar, calculemos o comutador:

$$\begin{aligned} [\mathbb{N}, a^\dagger] &= [a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger a a^\dagger - a^\dagger \underbrace{a^\dagger a}_{=a a^\dagger - [a, a^\dagger]} = a^\dagger a a^\dagger - a^\dagger(a a^\dagger - 1) \\ \therefore [\mathbb{N}, a^\dagger] &= a^\dagger \quad (3.17) \end{aligned}$$

Aplicando esse resultado:

$$[\mathbb{N}, a^\dagger]|\varphi_n\rangle = a^\dagger|\varphi_n\rangle$$

Reescrevendo o lado esquerdo:

$$\begin{aligned}\mathbb{N}(a^\dagger|\varphi_n\rangle) - a^\dagger(\mathbb{N}|\varphi_n\rangle) &= a^\dagger|\varphi_n\rangle \\ \mathbb{N}(a^\dagger|\varphi_n\rangle) - n(a^\dagger|\varphi_n\rangle) &= a^\dagger|\varphi_n\rangle \\ \therefore \mathbb{N}(a^\dagger|\varphi_n\rangle) &= (n+1)(a^\dagger|\varphi_n\rangle)\end{aligned}$$

Ou seja,  $a^\dagger|\varphi_n\rangle$  é um autovetor de  $\mathbb{N}$  com autovalor  $n+1$ . **Atuar  $a^\dagger$  sobre  $|\varphi_n\rangle$  o leva para um estado uma unidade acima de  $n$ .** Por isso, o operador  $a^\dagger$  recebe o nome de **operador criação** ou **operador levantamento**.

### f) Resumo: as relações entre $a$ , $a^\dagger$ , $\hat{\mathbb{H}}$ e $\mathbb{H}$

Com tudo que foi discutido até aqui, podemos resumir o problema do oscilador harmônico da seguinte forma: o espectro de energias do hamiltoniano  $\mathbb{H}$  é discreto. Como a relação entre  $\mathbb{H}$  e  $\hat{\mathbb{H}}$  é conhecida, podemos relacionar seus autovalores: as autoenergias de  $\mathbb{H}$  serão os autovalores de  $\hat{\mathbb{H}}$  multiplicados por  $\hbar\omega$ .

Os autovalores de  $\hat{\mathbb{H}}$  são obtidos dos autovalores do operador número,  $\mathbb{N}$ . Como a relação entre  $\hat{\mathbb{H}}$  e  $\mathbb{N}$  é conhecida (3.14), podemos dizer que os autovalores de  $\hat{\mathbb{H}}$  serão iguais aos autovalores de  $\mathbb{N}$  acrescidos de  $\frac{1}{2}$ . Dessa forma, podemos escrever as energias possíveis do oscilador harmônico quântico em função do número  $n$  correspondente ao autoestado do oscilador:

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

É importante ressaltar que  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Chamamos de **estado fundamental** o estado descrito por  $|\varphi_0\rangle$ . Note que ele não possui nenhuma analogia clássica, o estado fundamental do oscilador harmônico quântico **possui energia**, enquanto o estado fundamental do oscilador harmônico clássico seria o mesmo parado na posição de equilíbrio, **sem energia cinética ou potencial**.

Note que, até o momento, não encontramos uma sequer função de onda do oscilador harmônico quântico: apenas mudamos o tratamento com a notação de Dirac e obtivemos propriedades em relação à energia do oscilador e ainda fomos capazes de obter um par de operadores que nos servirá da seguinte forma: não existe nenhum estado do oscilador que seja inferior a  $|\varphi_0\rangle$ ; ou seja, não há formas do operador abaixamento atuar sobre ele e retornar outra coisa que não zero. Assim, seremos capazes de encontrar o estado fundamental do oscilador. Qualquer estado excitado pode ser obtido pela atuação do operador levantamento sobre o estado anterior e seremos capazes de, recursivamente, obter todos os estados quânticos do oscilador.

## 4. A função de onda do OHQ

Aqui, iremos obter a função de onda que descreve um oscilador harmônico quântico. Inicialmente, vamos abordar a construção da base  $\{|\varphi_n\rangle\}$ , ou seja, como expressar qualquer ket  $|\varphi_n\rangle$  em termos dos outros.

### a) Os kets $|\varphi_n\rangle$

A atuação do operador  $a$  sobre  $|\varphi_0\rangle$  **tem** de resultar em zero, pois não há formas de obter um estado que possua energia menor do que a do estado fundamental. Dessa forma,

$$a|\varphi_0\rangle = 0$$

O ket  $|\varphi_1\rangle$  é aquele que possui energia do estado fundamental acrescida de uma unidade. Ou seja, ele deve ser proporcional à atuação do operador levantamento sobre  $|\varphi_0\rangle$ :

$$|\varphi_1\rangle = c_1 a^\dagger |\varphi_0\rangle$$

A constante de proporcionalidade se dá pela exigência de que  $|\varphi_1\rangle$  seja normalizado (ainda, vamos definir  $|\varphi_0\rangle$  como sendo normalizado também):

$$\langle\varphi_1|\varphi_1\rangle = |c_1|^2 \langle\varphi_0|aa^\dagger|\varphi_0\rangle$$

Mas  $aa^\dagger = a^\dagger a + 1$ , graças a 3.11. Logo,

$$\langle\varphi_1|\varphi_1\rangle = |c_1|^2 \langle\varphi_0|a^\dagger a + 1|\varphi_0\rangle = |c_1|^2 \left[ \underbrace{\langle\varphi_0|N|\varphi_0\rangle}_{=0} + \underbrace{\langle\varphi_0|\varphi_0\rangle}_{=1} \right]$$

$$\therefore \langle\varphi_1|\varphi_1\rangle = |c_1|^2 = 1$$

$$\therefore c_1 = 1$$

Dessa forma,  $|\varphi_1\rangle = a^\dagger |\varphi_0\rangle$ . Vamos usar novamente esse processo recursivo para encontrar  $|\varphi_2\rangle = c_2 a^\dagger |\varphi_1\rangle$  e depois reescrevê-lo em termos de  $|\varphi_0\rangle$ .

$$\langle\varphi_2|\varphi_2\rangle = |c_2|^2 \langle\varphi_1|aa^\dagger|\varphi_1\rangle = |c_2|^2 \left[ \underbrace{\langle\varphi_1|N|\varphi_1\rangle}_{=1} + \underbrace{\langle\varphi_1|\varphi_1\rangle}_{=1} \right]$$

$$\langle\varphi_2|\varphi_2\rangle = 2|c_2|^2 = 1$$

$$\therefore c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Assim,  $|\varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} a^\dagger |\varphi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (a^\dagger)^2 |\varphi_0\rangle$ . Dessa forma, reproduzindo esse algoritmo, podemos escrever que qualquer ket  $|\varphi_n\rangle$  por recorrência de  $|\varphi_{n-1}\rangle$  ou  $|\varphi_0\rangle$ :

$$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} a^\dagger |\varphi_{n-1}\rangle$$

$$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |\varphi_0\rangle \quad (4.1)$$

Com essa relação, podemos ver claramente a atuação dos operadores  $a$  e  $a^\dagger$  sobre os autoestados  $|\varphi_n\rangle$ :

$$a|\varphi_n\rangle = a \frac{1}{\sqrt{n}} a^\dagger |\varphi_{n-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \left( \underbrace{a^\dagger a}_{=N} + 1 \right) |\varphi_{n-1}\rangle = \sqrt{n} |\varphi_{n-1}\rangle$$

$$\therefore a|\varphi_n\rangle = \sqrt{n} |\varphi_{n-1}\rangle \quad (4.2)$$

E

$$a^\dagger |\varphi_n\rangle = a^\dagger \frac{1}{\sqrt{n}} a |\varphi_{n+1}\rangle = \frac{n+1}{\sqrt{n}} |\varphi_{n+1}\rangle = \sqrt{n+1} |\varphi_{n+1}\rangle$$

$$\therefore a^\dagger |\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1} |\varphi_{n+1}\rangle \quad (4.3)$$

As equações 4.2 e 4.3 permitem que obtenhamos qualquer autoket do operador  $\mathbb{H}$  utilizando recursivamente os operadores  $a$  e  $a^\dagger$ .

### **b) A representação matricial de $a$ e $a^\dagger$**

Das equações deduzidas acima, somos capazes de escrever as matrizes que simbolizam  $a$  e  $a^\dagger$  na base dos autokets  $\{|\varphi_n\rangle\}$ . Para  $a$ , projetemos 4.2 sobre o ket  $|\varphi_{n-1}\rangle$ :

$$\langle \varphi_{n-1} | a | \varphi_n \rangle = \sqrt{n}$$

Isso indica que o elemento de matriz da linha  $(n-1)$  e coluna  $n$  será  $\sqrt{n}$  e será 0 se for de alguma outra combinação de linhas e colunas. Ou seja,

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

$a$ , na base dos  $\{|\varphi_n\rangle\}$  é, portanto, uma matriz de “diagonal deslocada para cima”, com seus elementos iguais a  $\sqrt{n}$ , onde  $n$  é o número da linha. Irei representar, por dificuldade de notação, apenas uma matriz  $4 \times 4$ :

$$a_{4 \times 4} = \begin{bmatrix} 0\sqrt{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

A representação matricial de  $a^\dagger$  se dá com a projeção de 4.3 sobre o ket  $|\varphi_{n+1}\rangle$ :

$$\langle \varphi_{n+1} | a^\dagger | \varphi_n \rangle = \sqrt{n+1}$$

Ou seja,

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

Sendo assim uma matriz de “diagonal deslocada para baixo”.

### c) O estado fundamental $\varphi_0(x)$

Para encontrar o estado fundamental do oscilador harmônico quântico, note que

$$a|\varphi_0\rangle = 0$$

É necessário, pois não há nenhum estado abaixo do fundamental. Projetando essa expressão na base das posições, temos:

$$\langle x|a|\varphi_0\rangle = 0$$

Usando 3.7 que exhibe  $a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} + i\hat{p})$  e as relações entre os operadores chapéu e sem chapéu, temos:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left\langle x \left| \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{m\omega\hbar}} \hat{p} \right| \varphi_0 \right\rangle = 0$$

Separando em duas estruturas:

$$\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \langle x|\hat{x}|\varphi_0\rangle + \frac{i}{\sqrt{m\omega\hbar}} \langle x|\hat{p}|\varphi_0\rangle = 0$$

O que resulta em, lembrando que  $\varphi_0(x) = \langle x|\varphi_0\rangle$ ,

$$\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\varphi_0(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{m\omega\hbar}} \frac{d}{dx}\varphi_0(x) = 0$$

Reescrevendo de uma forma mais conveniente:

$$\frac{d\varphi_0}{dx} + \frac{m\omega}{\hbar} x\varphi_0 = 0$$

Usando o fator integrante  $\mu(x) = e^{\int \frac{m\omega}{\hbar} x dx} = e^{\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$ :

$$\frac{d}{dx} \left( e^{\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \varphi_0 \right) = 0$$

$$\therefore \varphi_0(x) = A e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \quad (4.4)$$

Precisamos normalizar a função de onda, ou seja, integrar seu quadrado no espaço todo e exigir que ele seja igual a um:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi_0(x)|^2 dx = 1$$

$$A^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} dx}_{=I} = 1$$

A integral  $I$  é complicada. No entanto, seu quadrado é facilmente integrável em coordenadas polares: chamando de  $\gamma = \frac{m\omega}{\hbar}$ ,

$$\begin{aligned} I^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\gamma(x^2+y^2)} dx dy = \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} e^{-\gamma r^2} r dr d\theta \\ &= 2\pi \int_0^{\infty} \underbrace{r e^{-\gamma r^2}}_{\substack{u=-\gamma r^2 \\ du=-2\gamma r dr}} dr = \frac{2\pi}{-2\gamma} \int_0^{-\infty} e^u du = -\frac{\pi}{\gamma} [e^{-\infty} - 1] = \frac{\pi}{\gamma} \end{aligned}$$

Portanto,  $I = \sqrt{\frac{\pi}{\gamma}} = \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}}$ . Logo,

$$A^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}$$

$$\therefore A = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$$

O que escreve a função de onda do estado fundamental 4.4 normalizada como:

$$\boxed{\varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}} \quad (4.5)$$

#### d) Os estados excitados $\varphi_n(x)$ , $n > 0$ .

Como é de se supor, encontrar qualquer  $\varphi_n(x)$  partindo do estado fundamental  $\varphi_0(x)$  será dado pela projeção da equação 4.1 na base das posições:

$$\langle x|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle x|(a^\dagger)^n|\varphi_0\rangle$$

A atuação de  $a^\dagger$  na base das posições pode ser vista pela sua definição em 3.8, de forma que:

$$\langle x|a^\dagger = \langle x|\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} - i\hat{p}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \langle x| - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \langle x| \right]$$

Portanto,

$$\langle x|(a^\dagger)^n = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \left[ \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right]^n \langle x|$$

De forma que:

$$\langle x|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{\sqrt{2^n}} \left[ \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right]^n \langle x|\varphi_0\rangle$$

Como  $\langle x|\varphi_0\rangle = \varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$ , temos:

$$\varphi_n(x) = \left[ \frac{1}{2^n n!} \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{n}{2}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \left[ \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right]^n e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \right] \quad (4.6)$$

Essa equação dá a forma geral das funções de onda. Ela pode ser reescrita de forma mais elegante usando os chamados **polinômios de Hermite**.

**Definição:** Um polinômio de Hermite de grau  $n$ ,  $H_n(z)$ , é definido como:

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2} \quad (4.7)$$

Sua formulação permite que possamos escrever qualquer função de onda  $\varphi_n(x)$  dos estados do oscilador harmônico como:

$$\varphi_n(x) = C_n H_n(x) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \quad (4.8)$$

Onde  $C_n$  são constantes de normalização para cada  $\varphi_n$ .

## 5. Resumo

Essa sessão tenta resumir tudo o que foi visto ao longo do estudo do oscilador harmônico quântico.

- Todo sistema físico sujeito a um potencial  $V(x)$  que possua mínimos locais, ou seja, que possua regiões de equilíbrio estável **pode ser aproximado** por um oscilador harmônico nas regiões de  $x$  próximas aos pontos de equilíbrio estável.

- O operador potencial no caso do oscilador harmônico quântico pode ser escrito como:

$$V(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} m\omega^2 \mathbf{x}^2$$

- O operador hamiltoniano do oscilador harmônico quântico é função somente da posição e do momento (é independente do tempo):

$$\mathbb{H} = \frac{\mathbb{P}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \mathbf{x}^2$$

- Dada a independência temporal do hamiltoniano, podemos resumir o problema para encontrar os autokets  $|\varphi_n\rangle$  em:

$$\mathbb{H}|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$$

- A simplicidade na resolução do problema reside em tornar a equação acima adimensional: definir  $\hat{\mathbb{H}} = \frac{\mathbb{H}}{\hbar\omega}$  e ficar com

$$\hat{\mathbb{H}}|\varphi_n\rangle = \frac{E_n}{\hbar\omega}|\varphi_n\rangle$$

- O uso dos operadores  $\hat{x}$  e  $\hat{p}$ , definidos como:

$$\hat{p} = \frac{\mathbb{P}}{\sqrt{m\hbar\omega}} \quad \hat{x} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\mathbb{X}$$

Originalmente  $\hat{\mathbb{H}} = \frac{1}{2}(\hat{p}^2 + \hat{x}^2)$ .

- Definem-se  $a$  e  $a^\dagger$  como:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} + i\hat{p}) \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} - i\hat{p})$$

Bem como seu produto  $\mathbb{N} = a^\dagger a$ .

- Os comutadores de interesse do problema são:

$$[\mathbb{X}, \mathbb{P}] = i\hbar \quad [\hat{x}, \hat{p}] = i \quad [a, a^\dagger] = 1 \quad [\mathbb{N}, a] = -a \quad [\mathbb{N}, a^\dagger] = a^\dagger$$

- O operador  $a$  é chamado de **operador destruição** ou **operador abaixamento**. Sua ação sobre um autoestado  $|\varphi_n\rangle$  de energia  $E_n$  é de levar a partícula ao estado de energia  $E_{n-1}$ , a menos de uma constante multiplicativa.

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

- O operador  $a^\dagger$  é chamado de **operador criação** ou **operador levantamento**. Sua ação sobre um autoestado  $|\varphi_n\rangle$  de energia  $E_n$  é de levar a partícula ao estado de energia  $E_{n+1}$ , a menos de uma constante multiplicativa.

$$a^\dagger|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle$$

- A relação entre o operador número ( $\mathbb{N}$ ) e o hamiltoniano do sistema ( $\mathbb{H}$ ) é:

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

- A relação entre as autoenergias de  $\mathbb{H}$  e os autovalores de  $\mathbb{N}$  é:

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

- O estado quântico de menor energia,  $|\varphi_0\rangle$ , **não possui energia zero**, mas sim  $\frac{\hbar\omega}{2}$ . Essa característica é puramente quântica, não possuindo analogia clássica.

- A função de onda do estado fundamental do oscilador pode ser obtida pela projeção  $\langle x|\varphi_0\rangle$  e o fato de que não é possível abaixar mais o nível de energia de  $|\varphi_0\rangle$ , ou seja,

$$a|\varphi_0\rangle = 0$$

Projetando sobre  $|x\rangle$  e resolvendo a equação diferencial resultante, obtemos:

$$\varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

- Qualquer estado excitado pode ser obtido pela equação de  $a^\dagger$  no estado anterior, de forma que podemos escrever em geral que

$$\varphi_n(x) = C_n H_n(x) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

Onde  $C_n$  são constantes de normalização para cada estado de energia  $n$  e  $H_n(x)$  são os polinômios de Hermite.

## 6. Oscilador Harmônico Quântico em 3 dimensões

### a) Caso I: as frequências angulares dependem da direção

Nesse caso,  $\omega_x \neq \omega_y \neq \omega_z$ . Assim, o hamiltoniano do sistema se escreve como:

$$\mathbb{H} = \frac{1}{2m} (\mathbb{p}_x^2 + \mathbb{p}_y^2 + \mathbb{p}_z^2) + \frac{1}{2} m (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2)$$

Isto é,

$$\mathbb{H} = \mathbb{H}_x + \mathbb{H}_y + \mathbb{H}_z$$

Com

$$\mathbb{H}_i = \frac{1}{2m} \mathbb{p}_i^2 + \frac{1}{2} m \omega_i^2 i^2, i = x, y, z$$

Esses hamiltonianos são completamente independentes entre si, portanto comutam entre si e com sua soma. Dessa forma, podemos tratar o problema como se 3 hamiltonianos unidimensionais do oscilador harmônico agissem sobre o corpo de massa  $m$ . Sabemos que, para cada dimensão,:

$$\mathbb{H}_x |\varphi_{n_x}\rangle = \left(n_x + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_x |\varphi_{n_x}\rangle$$

$$\mathbb{H}_y |\varphi_{n_y}\rangle = \left(n_y + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_y |\varphi_{n_y}\rangle$$

$$\mathbb{H}_z |\varphi_{n_z}\rangle = \left(n_z + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_z |\varphi_{n_z}\rangle$$

Assim, escrevemos:

$$\mathbb{H} |\varphi_{n_x, n_y, n_z}\rangle = E_n |\varphi_{n_x, n_y, n_z}\rangle$$

Com:

$$|\varphi_{n_x, n_y, n_z}\rangle = |\varphi_{n_x}\rangle |\varphi_{n_y}\rangle |\varphi_{n_z}\rangle$$

E

$$E_n = \hbar \left[ \left( n_x + \frac{1}{2} \right) \omega_x + \left( n_y + \frac{1}{2} \right) \omega_y + \left( n_z + \frac{1}{2} \right) \omega_z \right]$$

As funções de onda serão obtidas certamente como:

$$\langle \vec{r} | \varphi_{n_x, n_y, n_z} \rangle = \langle \vec{r} | \varphi_{n_x} \rangle \langle \vec{r} | \varphi_{n_y} \rangle \langle \vec{r} | \varphi_{n_z} \rangle$$

Ou seja,

$$\varphi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = \varphi_{n_x}(x, y, z) \varphi_{n_y}(x, y, z) \varphi_{n_z}(x, y, z)$$

Existem estados degenerados nesse caso: todos aqueles em que  $\hbar \left[ \left( n_x + \frac{1}{2} \right) \omega_x + \left( n_y + \frac{1}{2} \right) \omega_y + \left( n_z + \frac{1}{2} \right) \omega_z \right]$  produzem um mesmo valor de energia  $E_n$ . No entanto, não são simples de serem calculados. Irei me restringir a calcular no caso II.

### a) Caso II: existe uma única frequência de oscilação

Esse problema modela o caso em que existe uma força restauradora na direção radial do problema, ou seja, isotrópica. Isso simplifica muito as expressões acima. Observe:

$$\mathbb{H} = \frac{1}{2m} (\mathbb{P}_x^2 + \mathbb{P}_y^2 + \mathbb{P}_z^2) + \frac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2 + z^2)$$

De forma que:

$$\mathbb{H} = \mathbb{H}_x + \mathbb{H}_y + \mathbb{H}_z$$

Com

$$\mathbb{H}_i = \frac{1}{2m} \mathbb{P}_i^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 i^2, i = x, y, z$$

Resolvendo uma direção por vez, obteremos também:

$$\mathbb{H}_x |\varphi_{n_x}\rangle = \left( n_x + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega |\varphi_{n_x}\rangle$$

$$\mathbb{H}_y |\varphi_{n_y}\rangle = \left( n_y + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega |\varphi_{n_y}\rangle$$

$$\mathbb{H}_z |\varphi_{n_z}\rangle = \left( n_z + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega |\varphi_{n_z}\rangle$$

Assim, escrevemos:

$$\mathbb{H} \left| \varphi_{n_x, n_y, n_z} \right\rangle = E_n \left| \varphi_{n_x, n_y, n_z} \right\rangle$$

Com:

$$\left| \varphi_{n_x, n_y, n_z} \right\rangle = \left| \varphi_{n_x} \right\rangle \left| \varphi_{n_y} \right\rangle \left| \varphi_{n_z} \right\rangle$$

A ausência de índices nas frequências exhibe sua facilidade no cálculo das autoenergias:

$$E_n = \hbar\omega \left( n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right)$$

De forma que podemos admitir um único  $n = n_x + n_y + n_z$  e escrever:

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{3}{2} \right)$$

Claramente, existem estados degenerados: aqueles em que  $n_x + n_y + n_z$  originam um mesmo  $n$ . No entanto, para esse caso, somos capazes de calcular a degenerescência de um estado  $n$ .

Suponha que, para um  $n$  fixo, saibamos que  $n_x$  pode variar discretamente de 0 até  $n$ , ou seja,

$$n_x = 0, 1, 2, \dots, n$$

Sabemos ainda que:

$$n = n_x + n_y + n_z$$

Ou seja,

$$n_y + n_z = n - n_x$$

Dados os possíveis valores que  $n_x$  pode assumir, o par  $\{n_y, n_z\}$  pode assumir valores como:

$$\{n_y, n_z\} = \{0, n - n_x\}, \{1, n - n_x - 1\}, \dots, \{n - n_x, 0\}$$

Ou seja, existem  $n - n_x + 1$  pares possíveis que  $\{n_y, n_z\}$  pode assumir. Portanto, a degenerescência de um estado de energia  $n$ ,  $g_n$ , é dada pela soma de todos esses possíveis valores que  $n_x$  pode assumir. Ou seja,

$$g_n = \sum_{n_x=0}^n (n - n_x + 1)$$

Essa soma pode ser calculada da seguinte forma: lembre-se de que  $\sum_{k=0}^m k = \frac{m}{2}(m+1)$  e de que  $\sum_{k=0}^m 1 = m+1$ .

$$\begin{aligned}
 g_n &= \sum_{n_x=0}^n (n - n_x + 1) = \sum_{n_x=0}^n (n+1) - \sum_{n_x=0}^n n_x \\
 &= (n+1) \sum_{n_x=0}^n 1 - \frac{1}{2}n(n+1) \\
 &= (n+1)^2 - \frac{n^2+n}{2} \\
 &= \frac{2n^2 + 2n + 2 - n^2 - n}{2} = \frac{n^2 + n + 2}{2} \\
 &= \frac{(n+1)(n+2)}{2}
 \end{aligned}$$

Dessa dedução, observa-se que a o único estado não degenerado é o estado fundamental do oscilador tridimensional, com  $E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega$ .

## 7. Oscilador Harmônico Quântico na presença de um campo elétrico

Considere um oscilador harmônico quântico unidimensional de carga  $q$  e massa  $m$  sujeito a ação de um campo elétrico em seu eixo de oscilação,  $E = E_0\hat{x}$ . Vamos mostrar que a atuação desse campo sobre o oscilador causa um deslocamento na posição de repouso da oscilação e gera um shift de energia igual para todos os estados.

Se o campo elétrico atuante sobre a partícula é constante e igual a  $E_0$ , então a força que esse campo gera sobre uma carga  $q$  é  $F = qE_0$ . Dessa forma, o potencial  $V_E(x)$  associado a essa força é  $V_E(x) = -qE_0x$ , de forma que  $F = -\frac{dV}{dx}$ . Promovendo esse potencial clássico a um operador quântico,

$$\mathbb{V}_E(\mathbb{x}) = -qE_0\mathbb{x}$$

De forma que o oscilador harmônico quântico no eixo  $x$  tem seu hamiltoniano  $\mathbb{H}'$  dado por:

$$\mathbb{H}' = \underbrace{\frac{\mathbb{p}^2}{2m}}_{\mathbb{T}} + \underbrace{\frac{1}{2}m\omega^2\mathbb{x}^2}_{\mathbb{V}_{harm}} - \underbrace{qE_0\mathbb{x}}_{\mathbb{V}_E}$$

Os autovetores  $|\varphi'\rangle$  de  $\mathbb{H}'$  são tais que:

$$\mathbb{H}'|\varphi'\rangle = E'|\varphi'\rangle$$

Explicitando  $\mathbb{H}'$ :

$$\left[ \frac{\mathbb{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\mathbb{x}^2 - qE_0\mathbb{x} \right] |\varphi'\rangle = E'|\varphi'\rangle$$

Na base das posições,

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 - q E_0 x \right] \varphi'(x) = E' \varphi'(x)$$

Completando o quadrado a respeito de  $x$  nos colchetes, ficamos com:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 \left( x - \frac{q E_0}{m \omega^2} \right)^2 - \frac{q^2 E_0^2}{2 m \omega^2} \right] \varphi'(x) = E' \varphi'(x)$$

Basta que façamos uma mudança de variável  $u = x - \frac{q E_0}{m \omega^2}$ , podendo sempre escrever  $x$  em termos de  $u$ , ficamos com:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 u^2 \right] \varphi' \left( u + \frac{q E_0}{m \omega^2} \right) = \left( E' + \frac{q^2 E_0^2}{2 m \omega^2} \right) \varphi' \left( u + \frac{q E_0}{m \omega^2} \right)$$

Como  $\varphi' \left( u + \frac{q E_0}{m \omega^2} \right) = \varphi'(u)$ , para resumo de notação, podemos reescrever  $E'' = E' + \frac{q^2 E_0^2}{2 m \omega^2}$  e ficamos com:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 u^2 \right] \varphi'(u) = E'' \varphi'(u)$$

Que é a equação do oscilador harmônico que conhecemos. Ou seja, **o campo elétrico constante no eixo de oscilação não altera a natureza harmônica do movimento, apenas altera sua energia e seu ponto de equilíbrio**. A nova energia é dada por:

$$E''_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

Exatamente como num oscilador. No entanto, como sabemos que essa energia é a soma de uma porção oscilatória subtraída de um shift do campo elétrico, ficamos com as autoenergias do operador  $\mathbb{H}'$  como sendo:

$$E'_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega - \frac{q^2 E_0^2}{2 m \omega^2}$$

As funções de onda nada mudam das  $\varphi_n$  que calculamos, apenas devem ser calculadas no ponto  $u$ , ou seja, em  $x - \frac{q E_0}{m \omega^2}$ :

$$\varphi'_n(x) = \varphi_n \left( x - \frac{q E_0}{m \omega^2} \right)$$

Essa translação das funções é resultado da ação da força elétrica sobre a carga  $q$ .

Fica a cargo do leitor a generalização do que foi visto acima para um potencial geral da forma  $\mathbb{V}(\mathbf{x}) = \beta \mathbf{x}$  e concluir que tal potencial não afeta o sistema a menos de um deslocamento da posição de repouso.

## **8. Considerações Finais**

Espero que o trabalho aqui exibido tenha ajudado o leitor a compreender melhor o oscilador harmônico quântico. Uma abordagem mais completa do que foi tratado aqui pode ser visto no livro de MQ do Cohen, base para esse estudo.