Mecânica Quântica — 7600022 — 21/4/2017

Oscilador harmônico

I. HAMILTONIANO

O Hamiltoniano do oscilador harmônico quântico é obtido diretamente do Hamiltoniano clássico:

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

onde P e X são operadores, que correpondem às grandezas físicas momento e posição, respectivamente.

O lado direito da Eq. (1) depende da frequência ω. Esta última grandeza tem grande importância física, porque o produto $\hbar\omega$ tem dimensão de energia. Significa que o oscilador harmônico possui uma escala absoluta de energias: se o oscilador tiver energia muito maior do que $\hbar\omega$, por exemplo, ele será muito energético. Na mecânica clássica, não existe escala absoluta, e a energia de um oscilador harmônico pode parecer grande ou pequena, dependendo do padrão de quem a mede.

Para realçar essa propriedade do oscilador quântico, vamos dividir os dois lados da Eq. (1) por $\hbar\omega$. Com isso, os dois lados se tornarão adimensionais:

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

Se X e P fossem números, e não operadores, poderíamos reescrever a Eq. (2) na forma de um produto:

$$\frac{1}{\hbar\omega}H = \Big(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X - i\frac{P}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\Big)\Big(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X + i\frac{P}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\Big) \qquad \text{(se } P \text{ e } X \text{ fossem números).} \tag{3}$$

Uma vez que X e P são operadores, precisamos de mais cuidado ao computar o lado direito da Eq. (3):

$$\Big(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X - i\frac{P}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\Big)\Big(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X + i\frac{P}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\Big) = \frac{P^2}{2m\hbar\omega} + \frac{m\omega X^2}{2\hbar} + \frac{i}{2\hbar}(XP - PX), \tag{4}$$

onde tomamos cuidado para não cancelar XP com $-PX$, porque operadores nem sempre possuem a propriedade comutativa.

II. COMUTADORES

Para verificar se XP é o mesmo que PX, precisamos calcular o *comutador* entre os dois operadores, que é definido pela igualdade

$$[X, P] \equiv XP - PX. \tag{5}$$

O último termo à direita na Eq. (4) é portanto proporcional ao comutador entre X e P.

Para calcular o comutador, é prático computar o seu elemento de matriz

$$\langle\phi|[X,P]|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x)\left(x\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} - \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}x\right)\psi(x)\,\mathrm{d}x, \tag{6}$$

ou seja,

$$\langle\phi|[X,P]|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x)\left(x\frac{d}{dx}\psi(x) - \frac{d}{dx}\Big(x\psi(x)\Big)\right)\mathrm{d}x. \tag{7}$$

O segundo termo dentro dos parênteses maiores no integrando à direita é a derivada de um produto. Calculada essa derivada, vemos que uma das parcelas resultantes cancela o primeiro termo dentro dos parênteses maiores. Resulta que

$$\langle\phi|[X,P]|\psi\rangle = -\frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x)\psi(x)\,\mathrm{d}x, \tag{8}$$

que também pode ser escrito na forma

$$\langle\phi|[X,P]|\psi\rangle = \langle\phi|i\hbar|\psi\rangle, \tag{9}$$

para mostrar que

$$[X,P] = i\hbar. \tag{10}$$

Alternativamente, podemos dizer que

$$[P,X] = \frac{\hbar}{i}. \tag{11}$$

De uma maneira ou de outra, vemos que XP não é o mesmo que PX. O produto dos dois operadores não é comutativo.

III. OPERADORES DE CRIAÇÃO E ANIQUILAÇÃO

Se substituirmos o termo entre parênteses na última parcela à direita na Eq. (4) pelo lado direito da Eq. (10), obteremos o resultado

$$\Big(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X - i\frac{P}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\Big)\Big(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X + i\frac{P}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\Big) = \frac{P^2}{2m\hbar\omega} + \frac{m\omega X^2}{2\hbar} + \frac{i}{2\hbar}i\hbar, \tag{12}$$

e como a soma das duas primeiras parcelas à direita equivale ao Hamiltoniano do oscilador, dividido por $\hbar\omega$, podemos ver que

$$\frac{1}{\hbar\omega}H = \Big(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X - i\frac{P}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\Big)\Big(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X + i\frac{P}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\Big) + \frac{1}{2}. \tag{13}$$

Essa equação sugere que definamos o operador

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X + i\frac{P}{\sqrt{2m\hbar\omega}}. \tag{14}$$

O operador a é conhecido como *operador de aniquilação*, por razão que entenderemos abaixo. Ele é adimensional. Não é Hermitiano. De fato, uma vez que X e P são Hermitianos, vemos imediatamente que o Hermitiano conjugado de a é o *operador de criação*

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X - i\frac{P}{\sqrt{2m\hbar\omega}}. \tag{15}$$

Com isso, podemos reescrever a Eq. (13) na forma compacta

$$\frac{1}{\hbar\omega}H = a^\dagger a + \frac{1}{2}. \tag{16}$$

IV. COMUTADOR ENTRE a E $a^\dagger$

Os operadores de criação e aniquilação são combinações lineares dos operadores X e P. Preferiremos trabalhar com a e $a^\dagger$ do que com X e P, porque a Eq. (16) é mais simples do que a Eq. (1). Antes de deixar de lado os operadores de posição e momento, porém, precisamos calcular o comutador entre a e $a^\dagger$, que serão tão úteis quanto foi o comutador $[X,P]$ na passagem entre as Eqs. (4) e (16). Das definições (14) e (15), temos que

$$[a,a^\dagger] = [\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X + i\frac{P}{\sqrt{2m\hbar\omega}}, \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X - i\frac{P}{\sqrt{2m\hbar\omega}}]. \tag{17}$$

O comutador entre dois operadores, por definição, é uma diferença: $[A,B] = AB - BA$. Por isso, ele possui a propriedade distributiva. Aplicada essa propriedade ao lado direito da Eq. (17), segue imediatamente que

$$[a, a^\dagger] = \frac{m\omega}{2\hbar}[X,X] - \frac{i}{2\hbar}[X,P] + \frac{i}{2\hbar}[P,X] + \frac{1}{2m\hbar\omega}[P,P]. \tag{18}$$

O primeiro e o último comutadores do lado direito são nulos, e os outros dois são dados pelas Eqs. (10) e (11). Resulta então a expressão simples

$$[a, a^\dagger] = 1. \tag{19}$$

A Eq. (19) pode também ser escrita de duas maneiras alternativas, que convém escrever aqui:

$$aa^\dagger = a^\dagger a + 1 \tag{20}$$

ou

$$a^\dagger a = aa^\dagger - 1. \tag{21}$$

Esta última igualdade permite reescrever a Eq. (16) na forma

$$\frac{1}{\hbar\omega}H = aa^\dagger - \frac{1}{2}. \tag{22}$$

V. OPERADOR NÚMERO

Queremos diagonalizar (isto é, achar os autovalores e autovetores de) o Hamiltoniano. Uma vez que a última parcela à direita na Eq. (16) é uma constante, 1/2, diagonalizar H é equivalente a diagonalizar o operador

$$\mathcal{N} \equiv a^\dagger a, \tag{23}$$

que é conhecido como *operador número*.

A diagonalização de $\mathcal{N}$ se apoia em duas noções facilmente demonstráveis. A primeira afirma que, se $|\varphi_\nu\rangle$ for um auto-estado de $\mathcal{N}$ com autovalor ν, isto é, se

$$\mathcal{N}|\varphi_\nu\rangle = \nu|\varphi_\nu\rangle, \tag{24}$$

então $a|\varphi_\nu\rangle$ também é autovetor de $\mathcal{N}$, com autovalor $\nu - 1$. A segunda afirma que $a^\dagger|\varphi_\nu\rangle$ também é autovetor de $\mathcal{N}$, com autovalor $\nu + 1$. Vamos demonstrar a primeira, porque a prova da segunda é análoga.

A demonstração se reduz a uma verificação. Vejamos. Da definição de $\mathcal{N}$, temos que

$$\mathcal{N}a|\varphi_\nu\rangle = (a^\dagger a)a|\varphi_\nu\rangle. \tag{25}$$

Com ajuda da Eq. (21), podemos reescrever o produto entre parênteses no lado direito da Eq. (25). Resulta que

$$\mathcal{N}a|\varphi_\nu\rangle = (aa^\dagger - 1)a|\varphi_\nu\rangle, \tag{26}$$

que pode ser escrita como

$$\mathcal{N}a|\varphi_\nu\rangle = aa^\dagger a|\varphi_\nu\rangle - a|\varphi_\nu\rangle, \tag{27}$$

ou seja

$$\mathcal{N}a|\varphi_\nu\rangle = a\mathcal{N}|\varphi_\nu\rangle - a|\varphi_\nu\rangle. \tag{28}$$

A Eq. (24) permite agora simplificar o primeiro termo à direita, e chegamos ao resultado que queríamos demonstrar:

$$\mathcal{N}(a|\varphi_\nu\rangle) = (\nu - 1)(a|\varphi_\nu\rangle). \tag{29}$$

O operador número tem outra propriedade importante: seus autovalores não podem ser negativos. Para demonstrar, temos que computar o elemento de matriz

$$\langle\varphi_\nu|\mathcal{N}|\varphi_\nu\rangle = \nu\langle\varphi_\nu|\varphi_\nu\rangle, \tag{30}$$

visto que $|\varphi_\nu\rangle$ é autovetor de $\mathcal{N}$ com autovalor ν.

Se admitirmos que $|\varphi_\nu\rangle$ já foi normalizado, segue da Eq. (29) que

$$\langle\varphi_\nu|\mathcal{N}|\varphi_\nu\rangle = \nu. \tag{31}$$

Por outro lado, sabemos que $\mathcal{N} \equiv a^\dagger a$. Assim, podemos reescrevera Eq. (31) de outra forma:

$$\langle\varphi_\nu|a^\dagger a|\varphi_\nu\rangle = \nu. \tag{32}$$

O lado esquerdo, porém, é o produto escalar do estado $a|\varphi_\nu\rangle$ por si mesmo. Em outras palavras, o lado esquerdo é a norma do estado $a|\varphi_\nu\rangle$ elevada ao quadrado. Vemos assim que

$$\nu = ||a|\varphi_\nu\rangle||^2. \tag{33}$$

Como a norma é sempre positiva ou nula, concluímos que $\nu \geq 0$.

VI. AUTOVALORES DO OPERADOR NÚMERO

Estamos agora prontos para encontrar os autovalores do operador número. Para isso, precisamos apenas notar, da Eq. (29), que dado um autovalor ν, poderemos sempre encontrar um autovalor inferior, a menos que

$$a|\varphi_\mu\rangle = 0, \tag{34}$$

para algum autovalor μ.

Para provar, vamos supor o contrário. Suporemos que a Eq. (33) nunca se verifique, para nenhum μ. Poderemos então sempre partir de um autovalor ν dado e aplicar sucessivamente a Eq. (29) para obter os autovalores $\nu-1, \nu-2, \ldots$ até encontrar um autovalor negativo, o que seria incompatível com a condição que encontramos na Seção V (os autovalores de $\mathcal{N}$ são estritamente não-negativos).

A Eq. (34) tem portanto de prevalecer para algum autovalor μ. É fácil ver que esse autovalor é zero. Para isso, basta aplicar o operador $a^\dagger$ aos dois lados da igualdade. Resulta que

$$a^\dagger a|\varphi_\mu\rangle = 0, \tag{35}$$

ou seja

$$\mathcal{N}|\varphi_\mu\rangle = 0. \tag{36}$$

A comparação com a Eq. (24) mostra então que $\mu = 0$, de forma que a Eq. (34) pode ser reescrita como

$$a|\varphi_0\rangle = 0. \tag{37}$$

Como o operador a é conhecido [Eq. (14), essa igualdade determina o auto-estado $|\varphi_0\rangle$. Mais ainda, ela nos diz que o menor autovalor ν de $\mathcal{N}$ é zero. Os demais autovalores são obtidos por sucessivas aplicações do operador $a^\dagger$ a partir do auto-estado $|\varphi_0\rangle$. Como cada aplicação aumenta o autovalor de um, vemos que os autovalores de $\mathcal{N}$ são $0, 1, 2, \ldots$. Por isso, o operador é chamado de *número*.

Isso constatado, é costume denotar n $(n = 0, 1, 2, \ldots)$ (e não ν) os autovalores de $\mathcal{N}$. Em lugar da Eq. (24) escrevemos que

$$\mathcal{N}|\varphi_n\rangle = n|\varphi_n\rangle, \qquad (n = 0, 1, \ldots). \tag{38}$$

VII. ENERGIAS

Conhecidos os autovalores de $\mathcal{N}$, podemos agora determinar os autovalores do Hamiltoniano. A Eq. (16) nos permite dizer que

$$H = \hbar\omega(\mathcal{N} + \frac{1}{2}). \tag{39}$$

Segue daí que os autovetores φ_n são também autovetores de H, pois

$$H|\varphi_n\rangle = \hbar\omega(\mathcal{N}|\varphi_n\rangle + \frac{1}{2}|\varphi_n\rangle), \tag{40}$$

e portanto

$$H|\varphi_n\rangle = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})|\varphi_n\rangle \qquad (n = 0, 1, 2, \ldots). \tag{41}$$

A Eq. (41) nada mais é do que a equação de Schrödinger independente do tempo, com energias

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \qquad (n = 0, 1, 2, \ldots). \tag{42}$$

Concluímos que

1. As energias do oscilador harmônico quântico são discretas;
2. A menor energia é positiva
$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega. \tag{43}$$
3. A separação entre duas energias consecutivas é constante:
$$\Delta E = \hbar\omega. \tag{44}$$
4. O autovetor $|\varphi_0\rangle$ pode ser obtido da Eq. (37). Os demais autovetores são obtidos por sucessivas aplicações do operador $a^\dagger$.

Interpreta-se n como o grau de excitação do oscilador. Quando está no estado fundamental (menor energia), o oscilador tem energia E_0. Ele pode adquirir energia, em unidades de $\hbar\omega$. Aplicado a um auto-estado com energia E_n, o operador a reduz sua energia para $E_{n-1} = E_n - \hbar\omega$. Dizemos que ele aniquilou um quantum de energia $\hbar\omega$. De forma análoga, o operador $a^\dagger$ cria um quantum de energia e promove o auto-estado da energia E_n para $E_n + \hbar\omega$.