

Mecânica Quântica — 7600022

Oscilador harmônico

I. HAMILTONIANO

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

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

onde P e X são operadores, que correspondem 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:

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

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

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

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

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

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

$$[X, P] \equiv XP - PX. \quad (5)$$

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

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

ou seja,

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

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

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

que também pode ser escrito na forma

$$\langle \phi | [X, P] | \psi \rangle = \langle \phi | i\hbar | \psi \rangle, \quad (9)$$

para mostrar que

$$[X, P] = i\hbar. \quad (10)$$

Alternativamente, podemos dizer que

$$[P, X] = \frac{\hbar}{i}. \quad (11)$$

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

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

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

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

Essa equação sugere que definamos o operador

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

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*

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

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

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

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

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

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

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

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

$$[a, a^\dagger] = 1. \quad (19)$$

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

$$aa^\dagger = a^\dagger a + 1 \quad (20)$$

ou

$$a^\dagger a = aa^\dagger - 1. \quad (21)$$

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

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

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

$$\mathcal{N} \equiv a^\dagger a, \quad (23)$$

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

$$\mathcal{N}|\varphi_\nu\rangle = \nu|\varphi_\nu\rangle, \quad (24)$$

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

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

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

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

que pode ser escrita como

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

ou seja

$$\mathcal{N}a|\varphi_\nu\rangle = a\mathcal{N}|\varphi_\nu\rangle - a|\varphi_\nu\rangle. \quad (28)$$

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

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

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

$$\langle \varphi_\nu | \mathcal{N} | \varphi_\nu \rangle = \nu \langle \varphi_\nu | \varphi_\nu \rangle, \quad (30)$$

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

$$\langle \varphi_\nu | \mathcal{N} | \varphi_\nu \rangle = \nu. \quad (31)$$

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

$$\langle \varphi_\nu | a^\dagger a | \varphi_\nu \rangle = \nu. \quad (32)$$

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

$$\nu = \|a|\varphi_\nu\rangle\|^2. \quad (33)$$

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

$$a|\varphi_\mu\rangle = 0, \quad (34)$$

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 $\nu-1, \nu-2, \dots$ 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

$$a^\dagger a |\varphi_\mu\rangle = 0, \quad (35)$$

ou seja

$$\mathcal{N} |\varphi_\mu\rangle = 0. \quad (36)$$

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

$$a |\varphi_0\rangle = 0. \quad (37)$$

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 $0, 1, 2, \dots$. Por isso, o operador é chamado de *número*.

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

$$\mathcal{N} |\varphi_n\rangle = n |\varphi_n\rangle, \quad (n = 0, 1, \dots). \quad (38)$$

VII. ENERGIAS

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

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

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

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

e portanto

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

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

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (42)$$

Concluimos que

1. As energias do oscilador harmônico quântico são discretas;
2. A menor energia é positiva

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega. \quad (43)$$

3. A separação entre duas energias consecutivas é constante:

$$\Delta E = \hbar\omega. \quad (44)$$

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 $E_n + \hbar\omega$.