AULA 11

Mecânica Quântica I

AULA 11

Oscilador Harmônico

O oscilador harmônico é um sistema de grande importância pois descreve em muito boa aproximação sistemas físicos próximos de sua posição de equilíbrio. O espectro vibracional de moléculas, por exemplo, se deve em grande parte às oscilações harmônicas dos núcleos em torno de posições fixas. Em sólidos cristalinos, os desvios do cristal estático são, em boa aproximação harmônicas.

Mas o exemplo mais importante é de fato fornecido pelo campo eletromagnético pois as equações de Maxwell no vácuo, quando analisadas em modos de Fourier, se transformam em equação de movimento para um conjunto infinito de osciladores harmônicos acoplados. O oscilador harmônico é assim a base da quantização do campo eletromagnético

(a) Equação de Movimento

Sejam $\hat{p}$ e $\hat{q}$ os operadores de mom. e coord. canônicos de uma partícula de massa m movendo-se em 1D

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar I \quad (1)$$

sob ação de uma força restauradora linear estática de forma que possa ser descrita pelo Hamiltoniano

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{q}^2 \quad (2)$$

Na descrição de Heisenberg as equações de movimento para $\hat{q}(t)$ e $\hat{p}(t)$ são:

$$i\hbar\, \dot{\hat{p}}(t') = [\hat{p}(t'), \hat{H}] = -i\hbar \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{q}} = -i\hbar\, m\omega^2 \hat{q}(t') \quad (3a)$$

$$i\hbar\, \dot{\hat{q}}(t') = [\hat{q}(t'), \hat{H}] = i\hbar \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}} = i\hbar \frac{\hat{p}}{m}(t') \quad (3b)$$

Definimos as quantidades adimensionais:

$$\tilde{H} = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega} \quad (4a) \qquad \tilde{q} = \hat{q}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} \quad (4b)$$

$$\tilde{p} = \frac{\hat{p}}{(m\omega\hbar)^{1/2}} \quad (4c) \qquad t = t'\omega \quad (4d)$$

de forma que

$$\frac{\hat{H}}{\hbar\omega} = \frac{\hat{p}^2}{2m\hbar\omega} + \frac{1}{2}\frac{m\omega^2\hat{q}^2}{\hbar\omega}$$

$$\downarrow$$

$$\tilde{H} = \frac{\tilde{p}^2}{2} + \frac{\tilde{q}^2}{2} \quad (5a) \qquad [\tilde{q}, \tilde{p}] = i \quad (5b)$$

<u>Definição</u>: operadores de abaixamento e levantamento (aniquilação e criação): a e a^+

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} (\tilde{q} + i \tilde{p}) \qquad (6a)$$

(não hermitianos)

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (\tilde{q} - i \tilde{p}) \qquad (6b)$$

de forma que

$$\tilde{q} = \frac{1}{\sqrt{2}} (a + a^+) \qquad (7a)$$

$$\tilde{p} = \frac{i}{\sqrt{2}} (a^+ - a) \qquad (7b)$$

$$[a, a^+] = -i [\tilde{q}, \tilde{p}] = 1 \qquad (7c)$$

$$\tilde{H} = \frac{1}{4} (a + a^+)^2 - \frac{1}{4} (a^+ - a)^2 = \frac{1}{4} (\cancel{a^2} + a a^+ + a^+ a + \cancel{a^{+2}}$$

$$- \cancel{a^{+2}} - \cancel{a^2} + a a^+ + a^+ a) = \frac{1}{2} (a a^+ + a^+ a)$$

$$\tilde{H} = \frac{1}{2} (a a^+ + a^+ a) = a^+ a + \frac{1}{2} \qquad (7d)$$

<u>Definição</u>: operador de número

$$\hat{N} = a^+ a \qquad (8)$$

Podemos escrever as equações de Heisenberg para $\underline{\underline{a}}$:

$$i\,\dot{a}(t) = [a(t), \tilde{H}] = U^+[a, \hat{H}]\,U = U^+[a, a^+a]\,U$$
$$= U^+(a\,a^+a - a^+a\,a)\,U = U^+[a, a^+]\,a\,U = U^+a\,U$$
$$= a(t)$$

$$a(t) = a(0)\,e^{-it} \quad (9a)$$

$$a^+(t) = a^+(0)\,e^{it} \quad (9b)$$

podemos escrever também em termos da evolução de $\tilde{q}(t)$ e $\tilde{p}(t)$

$$\tilde{q}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}[a(t) + a^+(t)] = \frac{1}{\sqrt{2}}[a(0)\,e^{-it} + a^+(0)\,e^{it}]$$
$$= \frac{1}{2}(\tilde{q}(0) + i\,\tilde{p}(0))\,e^{-it} + \frac{1}{2}(\tilde{q}(0) - i\,\tilde{p}(0))\,e^{it}$$
$$= \tilde{q}(0)\cos t + \tilde{p}(0)\,\text{sen}\,t \quad (10a)$$

$$\tilde{p}(t) = \tilde{p}(0)\cos t - \tilde{q}(0)\,\text{sen}\,t \quad (10b)$$

a diferença crucial da relação clássica é

$$[\tilde{q}(t), \tilde{q}(0)] = -i\,\text{sen}\,t \quad (10c)$$

$$[\hat{q}(t'), \hat{q}(0)] = \frac{-i\hbar}{m\omega}\,\text{sen}\,\omega t' \quad \left[\begin{array}{l}\text{colocando as}\\ \text{unidades de}\\ \text{volta!}\end{array}\right]$$

(b) Autovalores e Autofunções

$N = a^+ a \qquad N^+ = N \qquad \langle N \rangle \geq 0$ positivo definido

$\tilde{H} = N + 1/2$

o espectro de energia tem limite inferior $1/2$

seja $|n\rangle$ um autovetor de N com autovalor n:

$$\langle n|N|n\rangle = n \geq 0 \quad (11)$$

$$[N,a] = [a^+a, a] = a^+aa - aa^+a = [a^+,a]a = -a \quad (12a)$$

$$[N,a^+] = [a^+a, a^+] = a^+aa^+ - a^+a^+a = a^+[a,a^+] = a^+ \quad (12b)$$

---

se $[A,B] = \lambda B$ e $(A-\alpha)|\alpha\rangle = 0$

$B(A-\alpha)|\alpha\rangle = 0 \implies AB|\alpha\rangle - \lambda B|\alpha\rangle - B\alpha|\alpha\rangle = 0$

$A\,B|\alpha\rangle = (\alpha+\lambda)\,B|\alpha\rangle \implies B|\alpha\rangle = \text{const}\ |\alpha+\lambda\rangle$

$a^+|n\rangle \propto |n+1\rangle \qquad a|n\rangle \propto |n-1\rangle$

a norma de $a|n\rangle$: $\langle n|a^+a|n\rangle = n$

se $\langle n|n\rangle = 1$. Escolhendo a fase arbitrária real

$$a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \quad (13a)$$

$$a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \quad (13b)$$

a^m abaixa o auto-valor n por m unidades (valor inteiro), logo se n não for inteiro isso gerará autovalores negativos violando $n \geq 0$.

Se $n=0$ é um autovalor $a|0\rangle = 0$, o espectro de energia $\tilde{E}_n = n + 1/2 \quad n = 0, 1, 2, \ldots \quad (E_n = \hbar\omega\,(n+1)\,)$ (14)

Note: Na aplicação do oscilador harmônico ao campo e.m. a^+ adiciona a subtrai um fóton pela emissão ou absorção i.e. criando ou destruindo um γ.

Os elementos de matriz não nulos são

$$\langle n|a^+|n'\rangle = \sqrt{n}\;\delta_{n,n'+1} \quad (15a)$$

$$\langle n|a|n'\rangle = \sqrt{n+1}\;\delta_{n,n'-1} \quad (15b)$$

para os observáveis canônicos

$$\langle n|\tilde{q}|n'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{n}\;\delta_{n,n'+1} + \sqrt{n+1}\;\delta_{n,n'-1}\right) \quad (16a)$$

$$\langle n|\tilde{p}|n'\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{n}\;\delta_{n,n'+1} - \sqrt{n+1}\;\delta_{n,n'-1}\right) \quad (16b)$$

O valor esperado de $\tilde{p}^2$ e $\tilde{q}^2$ segue da observação que $\tilde{H}$ (veja 5a) é simétrico em $\tilde{q}$ e $\tilde{p}$ de forma que p/ qualquer estado

$$\langle \tilde{q}^2 \rangle = \langle \tilde{p}^2 \rangle = \langle \tilde{H} \rangle \quad (6)$$

Nessa base de autoestados de energia $\tilde{p}$ e $\tilde{q}$ não tem elementos diagonais (veja 16a e 16b) e logo $\langle\tilde{q}\rangle = \langle\tilde{p}\rangle = 0$. Assim

$$\Delta\tilde{q} = \sqrt{\langle\tilde{q}^2 - \langle\tilde{q}\rangle^2\rangle} = \sqrt{\langle\tilde{q}^2\rangle} = \Delta\tilde{p} = \sqrt{\langle\tilde{p}^2\rangle} = \sqrt{n+1/2}$$

$$\Longrightarrow \boxed{\Delta\tilde{q}\ \ \Delta\tilde{p} = n+1/2} \quad (17) \qquad \Delta\hat{q}\,\Delta\hat{p} = \hbar\,(n+1/2)$$

para um estado estacionário qualquer.

$\Rightarrow$ o estado fundamental o valor mínimo permitido
pelo princípio da incerteza é $\frac{1}{2}\hbar$ é alcançado.
Esse é chamado de <u>estado</u> <u>coerente</u> pois preserva a forma
e a largura de função de onda correspondente na
representação de coord ou momento. Assim um estado
inicialmente coerente continua sempre coerente ao
decorrer do tempo. Vamos discutir isso em mais detalhe

mais adiante.

Vamos agora encontrar as funções de onda. Seja u o autovalor do operador de coord. Definimos a função de onda de um estado de energia n

$$\varphi_n(u) = \langle u|n\rangle \quad (18a)$$

$$0 = \langle u|a|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle u|\tilde{q} + i\tilde{p}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(u + \frac{d}{du}\right)\langle u|0\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(u + \frac{d}{du}\right)\varphi_0(u)$$ cuja solução é

$$\Longrightarrow \varphi_0(u) = \pi^{-1/4}\, e^{-\frac{1}{2}u^2} \quad (18b)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} du\, |\varphi_0(u)|^2 = 1$$ (normalizada)

Essa solução é única o que mostra que os autovalores de série

$|0\rangle, (a^+)^1|0\rangle, (a^+)^2|0\rangle, \dots, (a^+)^n|0\rangle$

são não degenerados. É imediato verificar também que

$$\langle u|\tilde{H}|0\rangle = \langle u|\frac{q^2}{2}|0\rangle + \langle u|\frac{p^2}{2}|0\rangle$$

$$= \frac{u^2}{2}\langle u|0\rangle - \frac{d^2}{du^2}\langle u|0\rangle = E_0\langle u|0\rangle = \frac{1}{2}\langle u|0\rangle$$

[valor esperado da energia desse estado.]

$$\therefore \left[u^2 - \frac{d^2}{du^2}\right]\varphi_0(u) = \varphi_0(u) \quad (18c)$$

Usando

$$(a^+)^n|0\rangle = c_n|n\rangle \quad \text{e} \quad a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$$

obtemos

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n|0\rangle \quad (19)$$

de maneira que

$$\langle u|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle u|(a^+)^n|0\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n!}} 2^{-n/2} \langle u|(\tilde{q}-i\tilde{p})^n|0\rangle$$

$$\varphi_n(u) = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{2^n n!}} \left(u - \frac{d}{du}\right)^n e^{-\frac{1}{2}u^2} \qquad (20)$$

$$= \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{2^n n!}} e^{-u^2/2} \mathcal{H}_n(u)$$

onde

$\mathcal{H}_n(u)$ ~~são~~ os chamados <u>polinômios</u> <u>de</u> <u>Hermite</u>

$\mathcal{H}_0(u) = 1$ $\qquad$ $\mathcal{H}_2(u) = 4u^2 - 2$

$\mathcal{H}_1(u) = 2u$ $\qquad$ $\mathcal{H}_3(u) = 8u^3 - 12u$ $\quad$ etc.

$\varphi_n(u)$ $\left\{\begin{array}{l}\text{são pares para } n \text{ par} \\ \text{são ímpares para } n \text{ ímpar}\end{array}\right.$ (pela troca $u \to -u$)

$\tilde{H}$ é invariante por reflexão espacial $\Rightarrow$ energia e paridade podem ser especificados simultaneamente

Em 1D auto-estados de energia são automaticamente auto-estados de paridade com paridade $(-1)^n$.

(c) Oscilador Forçado

Consideremos agora um oscilador sujeito a uma força dependente do tempo. Quando consideramos as oscilações de um sistema pequeno massivo, como por exemplo, uma molécula, a força pode ser aproximada como constante sobre as dimensões da molécula, ou seja, sobre as dimensões do movimento não forçado e podemos descrever o movimento do sistema adicionando ao potencial um termo:

$$f(t)\,\tilde{q}.$$

No caso da radiação, as oscilações não forçadas são aquelas dos modos do campo e.m. livre, enquanto que as fontes responsáveis por emissão e absorção de radiação adicionam um termo $\vec{J}\cdot\vec{A}$ ao Hamiltoniano livre, após análise de Fourier, esse termo é responsável pelo termo $f(t)\,\tilde{q}$ adicionado a cada modo do oscilador.

Assim

$$\tilde{H}_F(t) = \frac{1}{2}\left(\tilde{p}^2 + \tilde{q}^2\right) + f(t)\,\tilde{q} \qquad (21)$$

$$i\,\dot{a}(t) = a(t) + \frac{f(t)}{\sqrt{2}} \qquad (22)$$

Consideremos o Ansatz:

$$\underline{a(t) = a(0)\, e^{-it} + s(t)} \quad (23) \qquad \text{subs. em } (22)$$

temos:

$$i\left[a(0)\left(-i\, e^{-it}\right) + \frac{ds}{dt}(t)\right] = a(0)\, e^{-it} + s(t) + \frac{1}{\sqrt{2}} f(t)$$

$$\left(i\frac{d}{dt} - 1\right) s(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} f(t) \quad (24)$$

$s(t)$ não é um operador e esse é uma equação diferencial convencional, logo usando a condição inicial que $s(0)=0$

$$s(t) = \frac{-i}{\sqrt{2}}\, e^{-it} \int_0^t dt'\, e^{it'} f(t') \quad (25)$$

Assim, lembrando que

$$\tilde{q}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(a(t) + a^{+}(t)\right)$$

$$a(t) = a(0)\, e^{-it} + s(t) \qquad a^{+}(t) = a^{+}(0)\, e^{it} + s^{+}(t)$$

$$\tilde{q}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(a(0)\, e^{-it} + a^{+}(0)\, e^{it}\right) + \frac{1}{\sqrt{2}}\left(s(t) + s^{+}(t)\right)$$

$$= \tilde{q}_0(t) - \frac{i}{2}\, e^{-it}\int_0^t dt'\, e^{it'} f(t') + \frac{i}{2}\, e^{it}\int_0^t dt'\, e^{-it'} f(t') \quad (11)$$

$$\tilde{q}(t) = \tilde{q}_0(t) + \frac{i}{2}\int_0^t dt' \left(e^{i(t-t')} - e^{-i(t-t')} \right) f(t')$$

$$= \tilde{q}_0(t) - \int_0^t dt' \,\mathrm{sen}(t-t') f(t') \quad (26)$$

A evolução do estado sob ação da força aplicada é determinada pelo operador unitário $U(t, t_0)$ que leva os operadores da descrição de Schrödinger p/ a descrição de Heisenberg e t_0 é o tempo em que as duas descrições coincidem. A condição inicial $s(0) = 0$ é a escolha de $t_0 = 0$, $U(t) \equiv U(t, 0)$

e $\boxed{U^{+}(t)\, a\, U(t) = a(t) = a(0)\, e^{-it} + s(t)}$ (27)

Lembremos que produzimos uma translação especial de $\hat{x} \longrightarrow \hat{x} + a$ usando o operador unitário $e^{-i\hat{p}a/\hbar}$, i.e. é gerado pelo operador canônico conjugado da coordenada. Poderíamos pensar que a translação (27) pudesse ser gerada pelo operador a^{+}. Mas esses operadores não são Hermitianos e a sua exponenciação não produz operadores unitários!

Consideremos o <u>operador</u> <u>deslocamento</u>, definido

por

$$D(z) \equiv \exp\left[z a^{+} - z^{*} a\right] \quad (28) \quad z \in \mathbb{C}$$

$$D^{+}(z) = \exp\left[z^{*} a - z a^{+}\right] = \exp\left[-(z a^{+} - z^{*} a)\right] \quad (29)$$
$$= D(-z) \quad \text{é unitário!}$$

Lembrando que:

$$e^{A} e^{B} = e^{A+B} e^{\frac{1}{2}[A,B]} \quad \text{se } [[A,B],A] = [[A,B],B] = 0$$

então:

$$D(z) \equiv e^{z a^{+} - z^{*} a} = e^{-\frac{1}{2}[-z^{*} a, z a^{+}]} e^{-z^{*} a} e^{z a^{+}}$$
$$= e^{\frac{1}{2}|z|^{2}} e^{-z^{*} a} e^{z a^{+}} = e^{-\frac{1}{2}|z|^{2}} e^{z a^{+}} e^{-z^{*} a} \quad (30)$$

$$[z^{*} a, z a^{+}] = -[z a^{+}, z^{*} a] = |z|^{2} [a, a^{+}] = |z|^{2}$$

$$D^{+}(z) = e^{-\frac{1}{2}|z|^{2}} e^{z^{*} a} e^{-z a^{+}} = e^{\frac{1}{2}|z|^{2}} e^{-z a^{+}} e^{z^{*} a} \quad (31)$$

se $\tilde{p}$ e $\tilde{q}$ satisfazem as regras de comutação

canônicas vimos que

$$[\tilde{p}, F(\tilde{q})] = -i \frac{\partial F(\tilde{q})}{\partial \tilde{q}}$$

$F(\tilde{q}), G(\tilde{p})$ podendo ter forma polinomial

$$[\tilde{q}, G(\tilde{p})] = i \frac{\partial G(\tilde{p})}{\partial \tilde{p}}$$

o mesmo argumento leva às identidades.

$$[a, \phi(a^+)] = \frac{\partial \phi(a^+)}{\partial a^+} \qquad (32a)$$

$$[a^+, \psi(a)] = -\frac{\partial \psi(a)}{\partial a} \qquad (32b)$$

logo

$$D^+(z)\, a\, D(z) = D^+(z) D(z) a + D^+(z)\, [a, D(z)]$$

$$= a + D^+(z) . z D^+(z) = a + z \qquad (33)$$

$$\therefore U(t) = D(s(t))\, e^{-iH_0 t} \qquad (34)$$

que determina $U(t)$ a menos de um fator de fase numérico

$$\alpha = \frac{-i}{\sqrt{2}} \int_0^t dt' \, f(t') \, Re\,(s(t'))$$

i.e. $U(t) = e^{i\alpha(t)} D(s(t))\ e^{-iH_0 t}$ (Lista)

Nota: esse fator não influencia os resultados que veremos aqui, mas tem significado na QED.

$$U^+(t)\ a\ U(t) = a(0)\, e^{-it} + s(t)$$

como qualquer estado $|\psi\rangle$ evolui como $U(t)|\psi\rangle$ gostaríamos de avaliar

$$U(t)|0\rangle$$

Vamos escrever $U(t)$ colocando todos os operadores de destruição à direita

$$U(t) = e^{i\alpha(t)}\ e^{-\frac{1}{2}|z|^2}\ e^{za^+}\ e^{-z^*a}\quad e^{-iH_0 t} \quad ; z = s(t)$$

mas

só sobre esse termo

$$e^{-z^*a} = 1 - z^*a + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-z^*a)^n}{n!}$$

$$|t;0\rangle = U(t)|0\rangle = e^{i\alpha(t)}\, e^{-\frac{1}{2}|z|^2}\, e^{-\frac{i}{2}t} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(za^+)^n}{n!}|0\rangle$$

$$= e^{i\alpha(t)}\, e^{-\frac{i}{2}t}\, e^{-\frac{1}{2}|z|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle ; \quad z = s(t)$$

essa é uma superposição coerente de todos os autoestados de energia. Podemos calcular a amplitude $A_0(t)$ de encontrar o sistema no estado fundamental em t se estava originalmente no estado fundamental em $t=0$:

$$A_0(t) = \langle t;0|0\rangle = e^{-i\alpha(t)}\, e^{\frac{i}{2}t}\, e^{-\frac{1}{2}|z|^2}$$

a parte a fase $e^{-i\alpha(t)}\, e^{\frac{i}{2}t}$ essa amplitude é

$$A_0(t) = \exp\left(-\frac{1}{2}\,\frac{-i}{\sqrt{2}}\int_0^t dt'\, e^{-i(t-t')} f(t')\,\frac{i}{\sqrt{2}}\int_0^t dt''\, e^{i(t-t'')} f(t'')\right) = \exp\left(-\frac{1}{4}\int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2\, e^{i(t_1-t_2)} f(t_1) f(t_2)\right)$$

$$= \exp\left(-\frac{1}{2}\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2\, e^{i(t_1-t_2)} f(t_1) f(t_2)\right) \quad t_1 > t_2$$

Qual a probabilidade de encontrar o oscilador forçado no n-ésimo estado excitado dado que estava no estado fundamental em $t=0$?

$$p_n(t) = e^{-|s(t)|^2}\,\frac{|s(t)|^{2n}}{n!}$$

Que é uma distribuição de Poisson!

$\langle n\rangle = |s(t)|^2$ média $\qquad \Delta n = |s(t)|$ dispersão