

Notas de Aula - SFI 5774

June 18, 2020

1 Oscilador harmônico

1.1 Método analítico

Partindo da equação de Schrödinger independente do tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi = E\psi$$

e definindo os parâmetros adimensionais

$$u = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad \varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

a eq. de Schrödinger pode ser reescrita como

$$\frac{d^2\psi}{du^2} + (\varepsilon - u^2) \psi = 0$$

onde, agora, $\psi = \psi(u)$.

Soluções para esta equação podem ser obtidas usando o método de série de potências ([Frobenius](#)), que levam a uma equação diferencial conhecida como equação de [Hermite](#), e cuja as soluções são polinômios.

O resultado final, portanto, leva a um produto de polinômios por uma função exponencial (gaussiana), na forma

$$\psi_n(u) = H_n(u)e^{-u^2/2}.$$

Em termos da posição, a solução final é dada por

$$\psi_n(x) = A_n H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) e^{-m\omega x^2/2\hbar}$$

onde A_n é um coef. de normalização. Os polinômios de Hermite podem ser gerados a partir da fórmula

$$H_n(u) = (-1)^n e^{u^2} \frac{d^n}{du^n} e^{-u^2}$$

e têm certas relações de recursão, como

$$H_{n+1}(u) = 2uH_n(u) - 2nH_{n-1}(u)$$

$$\frac{dH_n}{du} = 2nH_{n-1}(u)$$

Essas relações são úteis para calcular os polinômios de ordem superior e suas derivadas.

Os primeiros polinômios de Hermite são dados por

$$H_0(u) = 1$$

$$H_1(u) = 2u$$

$$H_2(u) = 4u^2 - 2$$

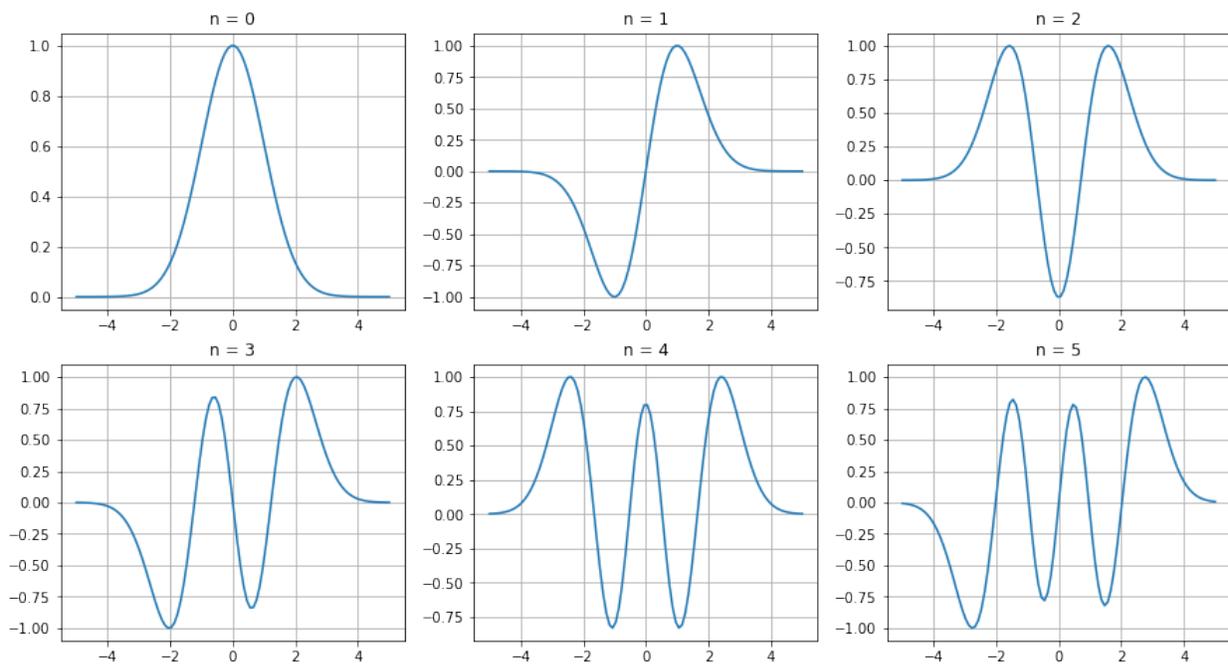
$$H_3(u) = 8u^3 - 12u$$

$$H_4(u) = 16u^4 - 48u^2 + 12$$

$$H_5(u) = 32u^5 - 160u^3 + 120u$$

$$H_6(u) = 64u^6 - 480u^4 + 720u^2 - 120$$

Os polinômios de Hermite, assim com outras funções especiais, estão definidas em vários programas de computação simbólica e numérica, como nas bibliotecas *Sympy*, *Scipy* da linguagem Python.



Normalização da função de onda

A normalização das funções das ondas vem dos polinômios Hermite, que são funções ortogonais

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(u)H_n(u)e^{-u^2} du = \sqrt{\pi}2^n n! \delta_{mn}$$

Usando essa relação, podemos normalizar as funções de onda integrando com a constante de normalização

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} A_n^2 \psi_n^2 du &= A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(u) e^{-u^2} du \\ &= A_n^2 \left(\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \right) \int_{-\infty}^{\infty} H_n^2 \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-m\omega x^2 / \hbar} dx \\ &= A_n^2 \left(\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \right) \sqrt{\pi} 2^n n! = 1 \end{aligned}$$

portanto

$$A_n^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi} 2^n n!} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}, \quad \Rightarrow A_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}}$$

Finalmente, podemos reescrever a função de onda normalizada

$$\psi_n(u) = \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(u) e^{-u^2/2}$$

ou, em termos da coordenada de posição

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-m\omega x^2 / 2\hbar}$$

A energia é determinada usando a solução na forma de série de potências aplicada à equação de Schrödinger. Levando em conta o comportamento assintótico da função de onda, para que essa faça sentido físico, conclui-se que é necessário que a série seja finita. Essa condição determina a energia do estado n , dada por

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

1.2 Método algébrico

É possível resolver o problema do oscilador harmônico usando um método totalmente diferente, baseado apenas em operadores e a álgebra de operadores que discutimos até agora no nosso curso. Esse método é mais simples que o método analítico e vale a pena aprendê-lo, pois é usado em vários outros casos, como veremos adiante.

Partindo da forma geral do Hamiltoniano

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

Definimos os seguintes operadores em termos de operadores de posição e momento

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{ip}{m\omega} \right)$$

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{ip}{m\omega} \right)$$

Podemos reescrever o Hamiltoniano usando esses operadores e resolver a equação de autovalores de maneira algébrica.

Para isso, escrevemos os operadores de posição e momento em termos dos novos operadores

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger)$$

$$p = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (a - a^\dagger)$$

Cuidado deve ser tomado na hora de calcular os quadrados dos operadores

$$x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} (a + a^\dagger)^2 = +\frac{\hbar}{2m\omega} (a^2 + aa^\dagger + a^\dagger a + (a^\dagger)^2)$$

$$p^2 = -\frac{\hbar m\omega}{2} (a - a^\dagger)^2 = -\frac{\hbar m\omega}{2} (a^2 - aa^\dagger - a^\dagger a + (a^\dagger)^2)$$

Substituindo no Hamiltoniano, temos

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

$$= -\frac{\hbar\omega}{4} [a^2 - aa^\dagger - a^\dagger a + (a^\dagger)^2] + \frac{m\omega^2}{2} \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right) [a^2 + aa^\dagger + a^\dagger a + (a^\dagger)^2]$$

Note que

$$\frac{m\omega^2}{2} \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right) = \frac{\hbar\omega}{4}$$

Portanto, os termos $a^2, (a^\dagger)^2$ se cancelam.

$$H = \frac{\hbar\omega}{4}(2aa^\dagger + 2a^\dagger a) = \frac{\hbar\omega}{2}(aa^\dagger + a^\dagger a)$$

Observe que os termos dentro do parêntese sugerem usarmos o comutador

$$\begin{aligned} [a, a^\dagger] &= aa^\dagger - a^\dagger a = 1 \\ aa^\dagger &= 1 + a^\dagger a \end{aligned}$$

de modo que a ter

$$H = \frac{\hbar\omega}{4} [1 + 2a^\dagger a] = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right)$$

Outras relações de comutação que serão úteis são

$$[H, a] = -\hbar\omega a, \quad [H, a^\dagger] = \hbar\omega a$$

1.3 Operadores de criação e destruição

Antes de seguir com a resolução do problema original, vale fazer um breve desvio que nos será muito útil depois. Vamos considerar, por um momento, um problema matemático simples e explorar o que aprendemos sobre operadores no espaço vetorial de Hilbert.

Suponha um operador a que satisfaz a relação de comutação

$$[a, a^\dagger] = 1$$

queremos encontrar os autovalores e autovetores do operador $a^\dagger a$, tal que

$$a^\dagger a |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle.$$

Se o vetor $|\alpha\rangle$ for normalizado, temos que

$$\alpha = \langle \alpha | a^\dagger a | \alpha \rangle = \|a|\alpha\rangle\|^2 \geq 0$$

Portanto, sabemos que os autovalores são todos reais e não negativos.

Usando a identidade $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$, vemos que

$$\begin{aligned} [a^\dagger a, a] &= [a^\dagger, a] a = -a \\ [a^\dagger a, a^\dagger] &= a^\dagger [a, a^\dagger] = a^\dagger \end{aligned}$$

ou, equivalentemente,

$$\begin{aligned}(a^\dagger a) a &= a (a^\dagger a - 1) \\ (a^\dagger a) a^\dagger &= a^\dagger (a^\dagger a + 1)\end{aligned}$$

Usando o primeiro resultado aplicado ao vetor $|\alpha\rangle$

$$(a^\dagger a) a|\alpha\rangle = a (a^\dagger a - 1) |\alpha\rangle = a(\alpha - 1)|\alpha\rangle = (\alpha - 1)a|\alpha\rangle$$

observa-se que $a|\alpha\rangle$ é um autovetor com autovalor $\alpha - 1$, a menos que $a|\alpha\rangle = 0$.

Da mesma forma, pode-se verificar que $a^\dagger|\alpha\rangle$ também é autovalor, com autovalor $\alpha + 1$, exceto quando $a^\dagger|\alpha\rangle = 0$.

A norma de $a|\alpha\rangle$ já foi determinada (acima) e podemos facilmente encontrar a norma de $a^\dagger|\alpha\rangle$, seguindo um procedimento parecido, de modo que as normas (tamanhos) dos autovetores são

$$\begin{aligned}\|a|\alpha\rangle\| &= \sqrt{\alpha} \\ \|a^\dagger|\alpha\rangle\| &= \sqrt{\alpha + 1}\end{aligned}$$

Supondo que $a^n|\alpha\rangle \neq 0$, pode-se mostrar que $a^n|\alpha\rangle$ é autovetor de $a^\dagger a$ com valor $(\alpha - n)$. Porém, isso leva a uma contradição para valores grandes de n , pois $\alpha - n < 0$, não satisfazendo a condição de autovalores positivos. Para evitar isso, devemos ter um limite de aplicações do operador a no estado $|\alpha\rangle$, dependendo do valor de α , tal que

$$a^n|\alpha\rangle \neq 0 \quad \text{mas} \quad a^{n+1}|\alpha\rangle = 0.$$

Em outras palavras, há um número máximo de aplicações sucessivas do operador a , num dado estado. Além disso, como o rótulo α é um número (dadas as relações acima), pode-se observar que este número deve ser um inteiro não negativo.

Para ver isso, considere um vetor qualquer $|\alpha - n\rangle$ e note que as relações anteriores mostram que $\|a|\alpha - n\rangle\| = \sqrt{\alpha - n}$. Assim, se α for um número inteiro, quando $\alpha = n$, teremos automaticamente a condição desejada, $a|0\rangle = 0$.

Deste modo, temos que os autovalores de $(a^\dagger a)$ devem ser números inteiros não negativos, e que há um estado especial $|0\rangle$, tal que

$$a|0\rangle = 0$$

chamamos esse estado de estado fundamental, por razões que ficarão claras logo mais.

Observando a ação do operador a^\dagger no estado $|0\rangle$, nos dá a pista que faltava para resolver o problema. Note que $a^\dagger|0\rangle$ tem norma unitária, pois $\|a^\dagger|0\rangle\| = \sqrt{0 + 1}$, sugerindo que a ação desse vetor em $|0\rangle$ é produzir o vetor $|1\rangle$, de modo que $\|a|1\rangle\| = \sqrt{1} = 1$.

Em geral, temos

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

gerando um conjunto $\{|n\rangle\}$ ortonormal que satisfaz

$$\begin{aligned} a^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle \\ a|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle \\ a^\dagger a|n\rangle &= n|n\rangle \end{aligned}$$

Essas equações resumem a resposta do problema proposto. Em particular, vemos que o operador $a^\dagger a$ age como um contador do número do estado. Por isso, esse operador recebe o nome de operador número, definido por $\hat{N} = a^\dagger a$, e os estados $|n\rangle$ são chamados de estados de número, ou estados de Fock.

1.4 Energia do oscilador harmônico

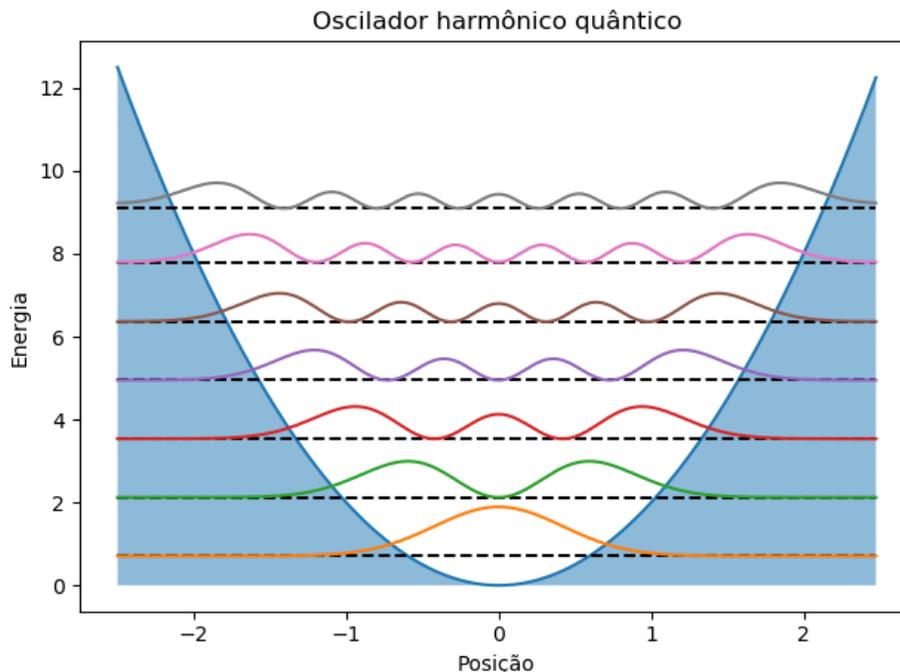
Retornando agora ao problema original, podemos resolver facilmente a ação do operador Hamiltoniano. Isto é, determinar as energias dos autoestados do sistema.

Usando os resultados da última seção, é fácil ver que o operador Hamiltoniano está expresso na forma de um operador número, multiplicado por constante com dimensão de energia.

$$\begin{aligned} H|n\rangle &= \hbar\omega \left(a^\dagger a + 1/2 \right) |n\rangle \\ &= \hbar\omega(n + 1/2)|n\rangle. \end{aligned}$$

Portanto, as energias quantizadas do sistema são dadas por

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2).$$



Isso nos fornece imediatamente uma interpretação interessante e esclarecedora para os operadores que foram definidos antes e os autoestados do operado Hamiltoniano:

- O estado $|0\rangle$ é o estado de menor energia, portanto, o estado fundamental do sistema, com energia $E_0 = \hbar\omega/2$.
- O operador a^\dagger é chamado de operador de criação, pois “cria” uma excitação no sistema, com *quanta* de energia $\epsilon = \hbar\omega$, levando a um estado excitado (de número maior) a partir do estado fundamental. Portanto, o estado $|n\rangle$ é produzido por múltiplas aplicações do operador a^\dagger , com a devida normalização.
- O operador a é chamado de operador de destruição, pois “destrói” uma excitação do sistema, baixo-o para um nível de energia menor, exatamente pelo menos *quanta* de energia ϵ , até chegar no estado fundamental, que é o último estado (mais baixo) do sistema.

A partir dos autoestados de número, é possível escrever as correspondentes funções de onda, em termos das coordenadas, seguindo o procedimento padrão $\psi_n(x) = \langle x|n\rangle$. Para determinar essas funções, basta fazer a aplicação no estado fundamental e usar as relações anteriores, para chegar numa equação diferencial simples (de primeira ordem) para determinar $\psi_0 = \langle x|0\rangle$.

De forma explícita, temos

$$\langle x|a|0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left\langle x \left| \left(\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right) \right| 0 \right\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{i}{m\omega} \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi_0$$

sabemos que

$$a|0\rangle = 0$$

portanto, a equação se reduz a equação trivial

$$\frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar} x \psi_0$$

onde agora x é um número (coordenada de posição), e não mais um operador. A solução pode ser obtida por integração direta

$$\psi_0(x) = A e^{-(m\omega/2\hbar)x^2}$$

onde A é uma constante, determinada da condição de normalização

$$\begin{aligned} \langle 0|0\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle 0|x\rangle \langle x|0\rangle dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(m\omega/\hbar)x^2} dx \\ &= |A|^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} = 1 \end{aligned}$$

portanto

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

Assim, finalmente, temos a função do estado fundamental

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-(m\omega/2\hbar)x^2}.$$

Para encontrar os outros estados, pode-se usar a^\dagger , sucessivamente, de acordo com a equação

$$\psi_n(x) = \langle x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle x|(a^\dagger)^n|0\rangle$$

isso leva naturalmente aos polinômios de Hermite, tomando-se derivadas sucessivas de $\psi_0(x)$, que é essencialmente uma função gaussiana, sem jamais resolver explicitamente a equação de Schrödinger para $\psi_n(x)$.