Universidade Estadual de Campinas

Oscilador Harmônico Isotrópico

Willian Vieira dos Santos – RA: 086202
Professor: Dr. Marco Aurélio Pinheiro Lima

FI001 – Mecânica Quântica

03/06/2020

Introdução

- A motivação é abordar o Oscilador Harmônico usando simetria esférica e momento angular

- Determinar os autoestados de energia com abordagem esférica (coordenada radial)

Desenvolvimento

- Relembrando a equação radial da aula 20[1] slide 11

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)+\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}+V(r)\right]R_{E,\ell}(r)=ER_{E,\ell}(r)$$

onde $V(r) = \frac{1}{2} m\omega^2 r^2$

- Utilizando energia adimensional e coordenada radial

$$E = \frac{1}{2}\hbar\omega\lambda \qquad r = \left[\frac{\hbar}{m\omega}\right]^{\frac{1}{2}}\rho$$

sendo λ uma constante que ajudará a satisfazer uma condição de normalização

---

[1] https://www.ifi.unicamp.br/~maplima/fi001/2020/aula20.pdf

- Elevando os termo ao quadrado

$$r^2 = \frac{\hbar}{m\omega}\rho^2 \qquad dr^2 = \frac{\hbar}{m\omega}d\rho^2$$

- Substituindo a energia adimensional e a coordenada radial na equação radial obtemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{m\omega}{\hbar}\right]\frac{d^2u}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2 m\omega}{2m\hbar\rho^2}u(\rho) + \frac{m\omega^2\hbar\rho^2}{2m\omega}u(\rho) = \left(\frac{1}{2}\hbar\omega\lambda\right)u(\rho)$$

- Multiplicando por (-2) temos

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}u(\rho) + (\lambda - \rho^2)u(\rho) = 0$$

- Uma solução para autofunção em termos de ρ é

$$u(\rho) = \rho^{l+1}e^{-\rho^2/2}f(\rho)$$

- Derivando em relação a ρ efetuamos a regra do produto em 3 termos

$$\frac{d^2u(\rho)}{d\rho^2} = \frac{d^2(\rho^{l+1}e^{-\rho^2/2}f(\rho))}{d\rho^2}$$

$$\frac{d}{d\rho}\left[(e^{-\rho^2/2}f(\rho))\frac{d(\rho^{l+1})}{d\rho} + (\rho^{l+1}f(\rho))\frac{d(e^{-\rho^2/2})}{d\rho} + (\rho^{l+1}e^{-\rho^2/2})\frac{df(\rho)}{d\rho}\right]$$

- Durante o desenvolvimento, cortamos o termo exponencial em evidência e obtemos a equação diferencial

$$\rho\frac{d^2f}{d\rho^2} + 2[(l+1) - \rho^2]\frac{df}{d\rho} + [\lambda - (2l+3)]\rho f(\rho) = 0$$

- A função f(ρ) pode ser expandida em termos de polinômios

$$f(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty}(a_n\rho^n)$$

- As derivadas de 1ª e 2ª ordem em relação a ρ

$$\frac{d}{d\rho}f(\rho) = n\sum_{n=0}^{\infty}(a_n\rho^{n-1}) \qquad \frac{d^2}{d\rho^2}f(\rho) = n(n-1)\sum_{n=0}^{\infty}(a_n\rho^{n-2})$$

- A equação diferencial pode ser expandida para

$$\sum_{n=0}^{\infty} \mathrm{n}(\mathrm{n}-1)a_n\rho^{n-2} + 2[(\mathrm{l}+1)-\rho^2]na_n\rho^{n-1} + [\lambda-(2\mathrm{l}+3)]\rho a_n\rho^n = 0$$

- Observando [2] para o primeiro termo
    - $n = 0 \rightarrow 0\,(0 - 1)\,a_0 = 0$
    - $n = 1 \rightarrow 1\,(1 - 1)\,a_1 = 0$
- Então colocamos em evidência ρ^{n+1} de modo que o primeiro termo e a parte 2(l+1) do termo do meio inicia em a_{n+2} e a outra se mantém a_n e obtemos

$$\sum_{n=0}^{\infty}\{(\mathrm{n}+2)(\mathrm{n}+1)a_{n+2} + 2(\mathrm{l}+1)(\mathrm{n}+2)a_{n+2} + [\lambda - 2\mathrm{n} - (2\mathrm{l}+3)]a_n\}\rho^{n+1} = 0$$

---

[2] https://www.ifi.unicamp.br/~maplima/f689/2016/aula26.pdf

- Rearranjamos os termos da expansão para chegar uma relação de recorrência dada por

$$a_{n+2} = \frac{2n + 2l + 3 - \lambda}{(n + 2)(n + 2l + 3)} a_n$$

- Retornando à autofunção u(ρ), observamos que apesar de possuir um termo exponencial negativo, a série expande mais rápido e faz a autofunção explodir para ρ muito grande

$$f(\rho) \rightarrow A \sum_n \frac{1}{n!} (\rho^2)^n \propto e^{\rho^2}$$

- Para que a série em f(ρ) seja interrompida temos que satisfazer

$$2n + 2l + 3 - \lambda = 0$$

$$n + l + \frac{3}{2} = \frac{\lambda}{2}$$

- Substituindo λ/2 na definição de energia dada no slide 3, temos que os autovalores do oscilador harmônico isotrópico é dado por

$$E_{nl} = (n + l + \frac{3}{2})\hbar\omega \equiv (N + \frac{3}{2})\hbar\omega$$

onde n = 0, 1, 2..., l = 0, 1, 2... e N = n + l

- Os autokets em 3D são da forma $| n_x, n_y, n_z >$ sendo $| n_x{=}0, n_y{=}0, n_z{=}0 >$ o estado fundamental
- Podemos obter casos de degenerescência nos estados excitados

N	n_x	n_y	n_z
1	1	0	0
	0	1	0
	0	0	1
2	1	1	0
	1	0	1
	0	1	1
	2	0	0
	0	2	0
	0	0	2

Conclusão

- Pela simetria esférica, a par da equação radial para oscilador harmônico obtivemos seus autovalores de energia em 3D equivalente com os previstos pelos operadores de criação e destruição $a^\dagger$ e a, respectivamente
- Foram apresentados alguns dos casos de degenerescência a partir de dos estados excitados n_x, n_y, n_z
- O livro-texto Sakurai (versões da 2ª edição inglês e português) apresenta estas passagens mas foram percebidos dois erros tipográficos
  - Equação 3.7.35: "n" da somatória deve iniciar em 0
  - Equação 3.7.42: há 3 n_x's que deveriam corresponder a $n_x + n_y + n_z$

Referências

- J. J. Sakurai, J. Napolitano, "Modern Quantum Mechanics", 2nd Edition
- M.A.P. Lima, notas de aula FI001, https://www.ifi.unicamp.br/~maplima/fi001/2020/aula20.pdf
- M.A.P. Lima, notas de aula F689, https://www.ifi.unicamp.br/~maplima/f689/2016/aula26.pdf