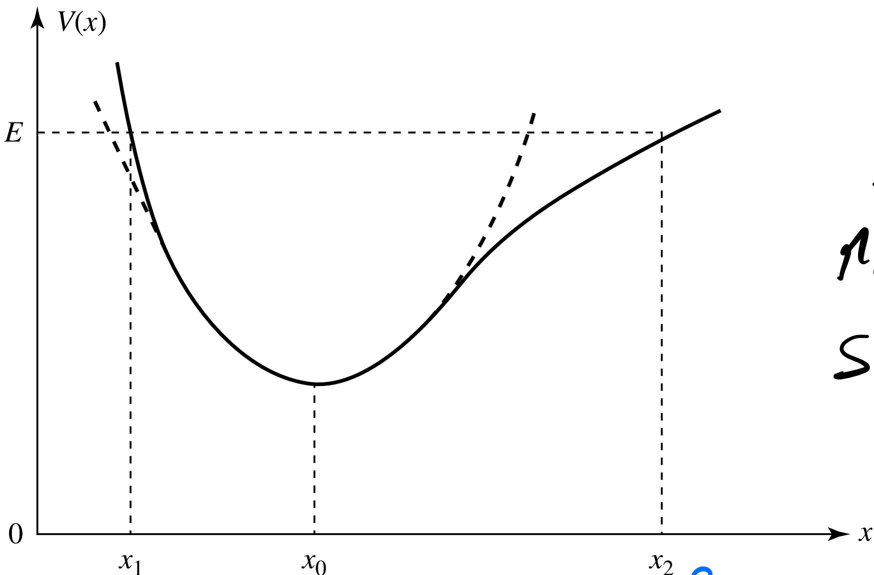
F 689 – Mecânica Quântica I

2º Semestre de 2022
09/11/2022
Aula 20

O oscilador harmônico unidimensional

Pequenas oscilações em torno de mínimos locais de potenciais



QUALQUER GRAU DE LIBERDADE QUE OSCILAR CLASSICAMENTE EM TORNO DE UM MÍNIMO SERÁ UM OSCILADOR HARMÔNICO 1D (OH1D)

$$V(x) \simeq V(x_0) + \underbrace{V'(x_0)}_{0}(x-x_0) + \frac{V''(x_0)}{2}(x-x_0)^2 + \dots$$

MÍNIMO

$$V_H(x) = V(x_0) + \frac{V''(x_0)}{2}(x-x_0)^2$$

Descrição clássica

$$m\ddot{x} = F(x) = -V_H'(x) = -V''(x_0)(x-x_0)$$

$$x' = x - x_0 \qquad \frac{d^2x'}{dt^2} = \frac{d^2x}{dt} \Rightarrow m\ddot{x}' + \underbrace{V''(x_0)}_{k}x' = 0$$

$$\boxed{m\ddot{x}' + kx' = 0}$$ EQ. DO OSCILADOR HARMÔNICO 1D

A PARTIR DE AGORA : $x' \to x$: $\boxed{m\ddot{x} + kx = 0}$

SOLUÇÃO GERAL CLÁSSICA:

$$x(t) = x_M \cos(\omega t + \varphi) \qquad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}} = \sqrt{\frac{V''(x_0)}{m}}$$

x_M, φ : CONSTANTES ARBITRÁRIAS DETERMINADAS PELAS CONDIÇÕES INICIAIS

$$\dot{x}(t) = -x_M\omega \sin(\omega t + \varphi)$$

ENERGIA TOTAL É CONSERVADA:

$$E = T + V = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{1}{2} k x^2$$

$$k = m\omega^2 \Rightarrow E = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

$$E = \frac{m}{2} (x_M \omega)^2 \sin^2(\omega t + \varphi) + \frac{1}{2} m \omega^2 x_M^2 \cos^2(\omega t + \varphi)$$

$$E = \frac{m}{2} x_M^2 \omega^2 = \text{CONSTANTE}$$

HAMILTONIANA: $\boxed{H[p, x] = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2}$

$$p = m\dot{x}$$

HAMILTONIANA QUÂNTICA:

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

$$[X, P] = i\hbar$$

Descrição quântica

UMA VIA POSSÍVEL: EQ. DE SCHRÖDINGER IND. DO TEMPO NA REPRESENTAÇÃO DE POSIÇÃO:

$$P \to \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} \qquad X \to x$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_E(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi_E(x) = E\,\psi_E(x)}$$

PODE SER RESOLVIDA POR EXPANSÃO EM SÉRIE (COMPLEMENTO CI), MAS SEGUIREMOS UMA ROTA ALTERNATIVA.

Método dos operadores de criação e destruição (ou de escada)

QUEREMOS QUANTIDADES ADIMENSIONAIS:

$$[m\hbar\omega] = [mE] = [p^2] \Rightarrow [p] = [\sqrt{m\hbar\omega}]$$

$$\Rightarrow \hat{P} = \frac{p}{\sqrt{m\hbar\omega}} \Rightarrow p = \sqrt{m\hbar\omega}\,\hat{P}$$

$$[p] = \left[\frac{\hbar}{L}\right] \Rightarrow [L] = \left[\frac{\hbar}{p}\right] = \left[\frac{\hbar}{\sqrt{m\hbar\omega}}\right] = \left[\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\right]$$

$$\Rightarrow \hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x \Rightarrow x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\,\hat{X}$$

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

$$\boxed{\hat{H} = \frac{H}{\hbar\omega} = \frac{1}{2}\left(\hat{P}^2 + \hat{X}^2\right)}$$

$$[x, p] = i\hbar = \left[\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\,\hat{X}, \sqrt{m\hbar\omega}\,\hat{P}\right] = \sqrt{\frac{\hbar}{\cancel{m\omega}}}\,\sqrt{\cancel{m}\hbar\cancel{\omega}}\,[\hat{X}, \hat{P}]$$

$$i\hbar = \hbar[\hat{X}, \hat{P}] \Rightarrow \boxed{[\hat{X}, \hat{P}] = i}$$

$$\left.\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P}) \\ a^{\dagger} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P}) \end{aligned}\right\}$$

NOTEM QUE $a, a^{\dagger}$ NÃO SÃO HERMITIANOS.

$$\left.\begin{aligned} \hat{X} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^{\dagger}) \\ \hat{P} &= \frac{i}{\sqrt{2}}(a^{\dagger} - a) \end{aligned}\right\}$$

NOTEM QUE SÃO HERMITIANOS COMO DEVEM SER

COMUTADOR: $[a, a^{+}] = \left[\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} + i\hat{P}), \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P})\right]$

$$= \frac{1}{2}\left[\hat{X} + i\hat{P}, \hat{X} - i\hat{P}\right] = \frac{1}{2}\Big\{-i\underbrace{[\hat{X}, \hat{P}]}_{i} + i\underbrace{[\hat{P}, \hat{X}]}_{-i}\Big\} = 1$$

$\boxed{[a, a^{+}] = 1}$; $[a^{+}, a] = -1$; $[a, a] = 0 = [a^{+}, a^{+}]$

$a a^{+} - a^{+} a = 1$

$a^{+} a = a a^{+} - 1$

$a a^{+} = a^{+} a + 1 = N + 1$

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\left[-\frac{1}{2}(a^{+} - a)^{2} + \frac{1}{2}(a^{+} + a)^{2}\right]$$

$$= \frac{1}{4}\left[-(a^{+} - a)(a^{+} - a) + (a^{+} + a)(a^{+} + a)\right]$$

$$= \frac{1}{4}\left[-\cancel{(a^{+})^{2}} - \cancel{a^{2}} + a^{+}a + a a^{+} + \cancel{(a^{+})^{2}} + \cancel{(a)^{2}} + a^{+}a + a a^{+}\right]$$

$$= \frac{1}{2}\left[a^{+}a + a a^{+}\right] = \frac{1}{2}\left[a^{+}a + 1 + a^{+}a\right] = a^{+}a + \frac{1}{2}$$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{H} = a^{+}a + \frac{1}{2}} = a a^{+} - \frac{1}{2}$$

O operador N (número)

$N = a^\dagger a$ (OPERADOR NÚMERO) $\qquad \hat{H} = N + \frac{1}{2}$

O ESPECTRO DE $\hat{H}$ É O MESMO DE N (A MENOS DE $\frac{1}{2}$)

- N É HERMITIANO! $\quad N^\dagger = (a^\dagger a)^\dagger = a^\dagger (a^\dagger)^\dagger = a^\dagger a = N$

- COMUTADORES:

$$[N, a] = [a^\dagger a, a] = a^\dagger \cancelto{0}{[a, a]} + \cancelto{-1}{[a^\dagger, a]}\, a = -a$$

$$[N, a^\dagger] = [a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger \cancelto{1}{[a, a^\dagger]} + \cancelto{0}{[a^\dagger, a^\dagger]}\, a = a^\dagger$$

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

$$\hat{H} = N + \frac{1}{2}$$

$$N|\varphi_\nu^i\rangle = \nu\,|\varphi_\nu^i\rangle$$

ν = AUTO-VALORES

$|\varphi_\nu^i\rangle$ = AUTO-VETORES

i = DISTINGUE AUTO-VETORES COM O MESMO AUTO-VALOR

$$\hat{H}|\varphi_\nu^i\rangle = \left(N + \frac{1}{2}\right)|\varphi_\nu^i\rangle = \left(\nu + \frac{1}{2}\right)|\varphi_\nu^i\rangle$$

$$H|\varphi_\nu^i\rangle = \hbar\omega\,\hat{H}\,|\varphi_\nu^i\rangle = \hbar\omega\left(\nu + \frac{1}{2}\right)|\varphi_\nu^i\rangle$$

Auto-valores do operador N

Lema 1: Os auto-valores são positivos ou zero: $\nu \geq 0$

SEJA $|\varphi_\nu^i\rangle$ UM AUTO-VETOR COM AUTO-VALOR $\underline{\nu}$.

$$\| a|\varphi_\nu^i\rangle \|^2 = \langle \varphi_\nu^i | a^\dagger a | \varphi_\nu^i \rangle = \langle \varphi_\nu^i | N | \varphi_\nu^i \rangle$$

$$= \nu \underbrace{\langle \varphi_\nu^i | \varphi_\nu^i \rangle}_{>0} \geq 0 \implies \boxed{\nu \geq 0}$$

Lema 2a:

a. Se existir um auto-valor $\nu=0$, os auto-vetores correspondentes são destruídos por a.

b. Se um vetor é destruído por a, ele é auto-vetor com $\nu=0$.

a. SE $N|\varphi_0^i\rangle = 0 \; |\varphi_0^i\rangle = 0$

DA DESIGUALDADE ANTERIOR: $\|a|\varphi_0^i\rangle\|^2 = 0 \langle\varphi_0^i|\varphi_0^i\rangle = 0$

$\Rightarrow \boxed{a|\varphi_0^i\rangle = 0}$

b. SE $a|\varphi\rangle = 0 \Longrightarrow a^{+}a|\varphi\rangle = 0 \Rightarrow N|\varphi\rangle = 0$

$\Rightarrow |\varphi\rangle = |\varphi_0^i\rangle$

Lema 2b: Dado um auto-vetor $\left|\phi_\nu^i\right\rangle$ com auto-valor $\nu>0$, então, $a\left|\phi_\nu^i\right\rangle$ é auto-vetor com auto-valor $\nu-1$.

SE: $N|\varphi_\nu^i\rangle = \nu|\varphi_\nu^i\rangle \quad (\nu>0)$

$$\Rightarrow N\left[a|\varphi_\nu^i\rangle\right] = (\nu-1)\left[a|\varphi_\nu^i\rangle\right]$$

DE $[N,a] = -a \Rightarrow Na - aN = -a$

$$\Rightarrow (Na-aN)|\varphi_\nu^i\rangle = -a|\varphi_\nu^i\rangle$$

$$\Rightarrow Na|\varphi_\nu^i\rangle - a(\nu|\varphi_\nu^i\rangle) = -a|\varphi_\nu^i\rangle$$

$$\Rightarrow N\left[a|\varphi_\nu^i\rangle\right] = \nu a|\varphi_\nu^i\rangle - a|\varphi_\nu^i\rangle$$

$$= (\nu-1)\left[a|\varphi_\nu^i\rangle\right]$$

POR ISSO, $\underline{a}$ É CHAMADO DE OPERADOR DESTRUIÇÃO (DE QUANTA DE ENERGIA)

Lema 3a: Para qualquer ν, $a^\dagger \left|\phi_\nu^i\right\rangle$ é não nulo.

$$N|\varphi_\nu^i\rangle = \nu|\varphi_\nu^i\rangle$$

$$\| a^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle \|^2 = \langle\varphi_\nu^i|\underbrace{a\, a^\dagger}_{N+1}|\varphi_\nu^i\rangle = \langle\varphi_\nu^i|(N+1)|\varphi_\nu^i\rangle$$

$$= \underbrace{(\nu+1)}_{>0}\underbrace{\langle\varphi_\nu^i|\varphi_\nu^i\rangle}_{>0} > 0$$

$$\Rightarrow a^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle \neq 0$$

Lema 3b: Dado um auto-vetor $|\phi_\nu^i\rangle$, então, $a^\dagger|\phi_\nu^i\rangle$ é auto-vetor com auto-valor $\nu+1$.

$$N|\varphi_\nu^i\rangle = \nu|\varphi_\nu^i\rangle \Rightarrow N\left[a^+|\varphi_\nu^i\rangle\right] = (\nu+1)\left[a^+|\varphi_\nu^i\rangle\right]$$

$$[N, a^+] = a^+ \Rightarrow Na^+ - a^+N = a^+$$

$$(Na^+ - a^+N)|\varphi_\nu^i\rangle = a^+|\varphi_\nu^i\rangle$$

$$N\left[a^+|\varphi_\nu^i\rangle\right] - \nu a^+|\varphi_\nu^i\rangle = a^+|\varphi_\nu^i\rangle$$

$$\Rightarrow N\left[a^+|\varphi_\nu^i\rangle\right] = (\nu+1)a^+|\varphi_\nu^i\rangle$$

$a^+ \Rightarrow$ OPERADOR DE CRIAÇÃO DE QUANTA DE ENERGIA

Os auto-valores de N são inteiros não negativos: 0, 1, 2, 3,…

$\underline{V}$ NÃO PODE SER NÃO INTEIRO! SUPONHA QUE SEJA: $\nu = 2{,}6 \Rightarrow |\varphi^i_{2,6}\rangle$

$$a|\varphi^i_{2,6}\rangle = c|\varphi^i_{1,6}\rangle$$

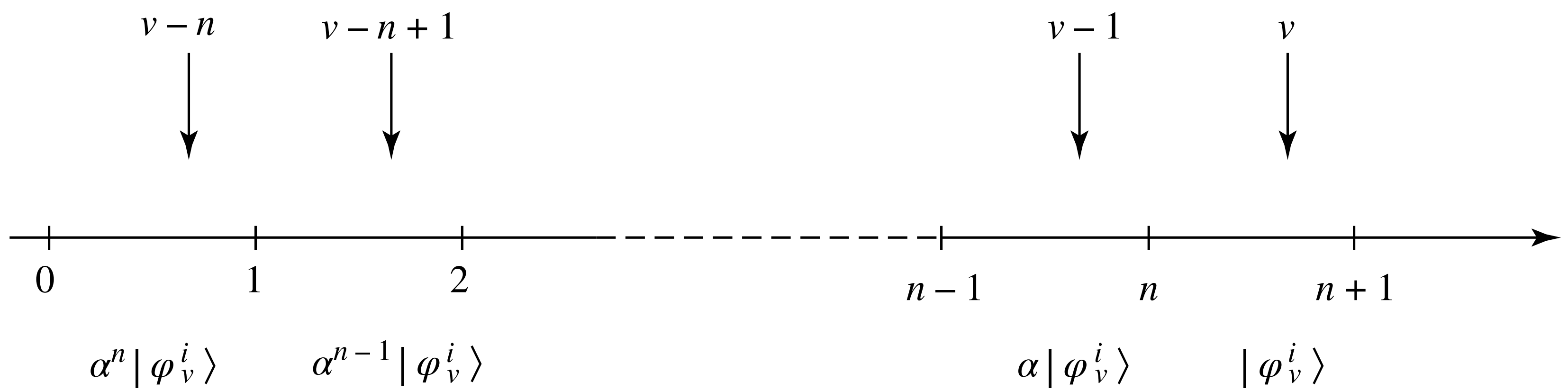
$$a^2|\varphi^i_{2,6}\rangle = c'|\varphi^i_{0,6}\rangle$$

$$a^3|\varphi^i_{2,6}\rangle = c''|\varphi^i_{-0,4}\rangle \Rightarrow \text{NÃO PODE!}$$

NO CASO $\nu = n \in \mathbb{N}$

$$a^n|\varphi^i_n\rangle = |\varphi^i_0\rangle$$

$$a^{(n+1)}|\varphi^i_n\rangle = a|\varphi^i_0\rangle = 0$$



$v = 0, 1, 2, 3, \ldots ; n$

$$H|\varphi_n^i\rangle = \underbrace{\hbar\omega\left(n + \tfrac{1}{2}\right)}|\varphi_n^i\rangle$$

COMEÇANDO DE $|\varphi_0^i\rangle$

$$|\varphi_1^i\rangle = c_1\, a^\dagger |\varphi_0^i\rangle$$

$$|\varphi_2^i\rangle = c_2\, (a^\dagger)^2 |\varphi_0^i\rangle$$

$$\vdots$$

$$|\varphi_n^i\rangle = c_n\, (a^\dagger)^n |\varphi_0^i\rangle$$

Degenerescência do espectro

1. O estado fundamental é não degenerado:

$$a|\varphi_0^i\rangle = 0 \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left[\sqrt{m\omega}\,X + \frac{i\,P}{\sqrt{m\omega}}\right]|\varphi_0^i\rangle = 0$$

NA REPRESENTAÇÃO DE POSIÇÃO:

$$\left[\sqrt{m\omega}\,x + \frac{\hbar}{\sqrt{m\omega}}\frac{d}{dx}\right]\varphi_0^i(x) = 0$$

$$\lambda \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

$$\Rightarrow \left(\frac{m\omega}{\hbar}x + \frac{d}{dx}\right)\varphi_0^i(x) = 0$$

$$\Rightarrow \varphi_0^{i\,\prime}(x) = -\frac{m\omega}{\hbar}x\,\varphi_0^i(x) = -\frac{x}{\lambda^2}\varphi_0^i(x)$$

EQ. DIF. ORD. DE 1ª ORDEM

$$\frac{(\varphi_0^i)'(x)}{\varphi_0^i(x)} = -\frac{x}{\lambda^2} \Rightarrow \frac{d}{dx}\left\{\ln\left[\varphi_0^i(x)\right]\right\} = -\frac{x}{\lambda^2}$$

$$\Rightarrow \ln\left[\varphi_0^i(x)\right] = -\frac{x^2}{2\lambda^2} + K$$

$$\Rightarrow \varphi_0^i(x) = \exp\left[-\frac{x^2}{2\lambda^2} + K\right] = A\, e^{-\frac{x^2}{2\lambda^2}} = A\, e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

QUALQUER SOLUÇÃO DA EQ. DIF. É PROPORCIONAL

À $A\, e^{-\frac{m\omega^2}{2\hbar}x^2} \Rightarrow \varphi_0^i(x) = \varphi_0(x) = A\, e^{-\frac{m\omega^2}{2\hbar}x^2}$

NÃO-DEGENERADA

2. Todos os estados são não degenerados: PROVA POR INDUÇÃO

SUPONHA: $N|\varphi_n\rangle = n|\varphi_n\rangle$ (NÃO DEGENERADO)

SE $|\varphi^i_{n+1}\rangle$ FOR DEGENERADO $(i = 1, 2, \dots)$

$$N|\varphi^i_{n+1}\rangle = (n+1)|\varphi^i_{n+1}\rangle \qquad (i = 1, 2, \dots)$$

MAS: $a|\varphi^i_{n+1}\rangle = c_i|\varphi_n\rangle$ ONDE $|\varphi_n\rangle$, POR HIPÓTESE É ÚNICO.

$$\Rightarrow \left.\begin{aligned} a|\varphi^1_{n+1}\rangle &= c_1|\varphi_n\rangle \\ a|\varphi^2_{n+1}\rangle &= c_2|\varphi_n\rangle \\ &\vdots \\ a|\varphi^g_{n+1}\rangle &= c_g|\varphi_n\rangle \end{aligned}\right\}$$

TODOS SÃO PROPORCIONAIS UNS AOS OUTROS E SÃO ÚNICOS A MENOS DE UMA CONSTANTE.

NÃO PODEM SER DEGENERADOS.

PORTANTO, COMEÇANDO DO ZERO:

$$|\varphi_0\rangle$$

$$a^+|\varphi_0\rangle = c_1|\varphi_1\rangle \Rightarrow |\varphi_1\rangle = \frac{1}{c_1} a^+|\varphi_0\rangle$$

$$(a^+)^2|\varphi_0\rangle = c_2|\varphi_2\rangle \Rightarrow |\varphi_2\rangle = \frac{1}{c_2}(a^+)^2|\varphi_0\rangle$$

$$\vdots \qquad\qquad \vdots$$

$$(a^+)^n|\varphi_0\rangle = c_n|\varphi_n\rangle \Rightarrow |\varphi_n\rangle = \frac{1}{c_n}(a^+)^n|\varphi_0\rangle$$

A PARTIR DE $\varphi_0(x) = A e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$

$$\Rightarrow \varphi_1(x) = C_1 a^+ \varphi_0(x) = \frac{C_1}{\sqrt{2}}\left[\hat{X} - i\hat{P}\right]\varphi_0(x)$$

$$= \frac{C_1}{\sqrt{2\hbar}}\left[\sqrt{m\omega}\, x - \frac{\hbar}{\sqrt{m\omega}}\frac{d}{dx}\right] A e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

$$\propto x\, e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$