

Teste 1. FI002

Março 13 de 2008

1) **Oscilador Anarmônico.** Use teoria de perturbações até a mais baixa ordem não nula para determinar os níveis de energia do oscilador anarmônico cujo Hamiltoniano é

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \alpha x^3. \quad (1)$$

$E_n^{(0)} = \hbar\omega(n+1/2)$, onde o superíndice indica estado não perturbado. Os elementos de matriz do operador de posição são facilmente deduzidos usando os operadores a e $a^\dagger$. $\langle n^{(0)} | x | n^{(0)} - 1 \rangle = \langle n^{(0)} - 1 | x | n^{(0)} \rangle = \sqrt{\frac{n\hbar}{2m\omega}}$.

Sol: O Hamiltoniano H_0 não perturbado é dado por

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \quad (2)$$

Primeira ordem:

Por paridade é direto que

$$\langle n^{(0)} | x^3 | n^{(0)} \rangle = 0.$$

Segunda ordem:

Começamos com $\langle n | x^2 | n' \rangle$ (omitimos o superíndice (0) nesta parte do cálculo),

$$\begin{aligned} \langle n | x^2 | n' \rangle &= \sum_l \langle n | x | l \rangle \langle l | x | n' \rangle \\ &= \langle n | x | n-1 \rangle \langle n-1 | x | n' \rangle + \langle n | x | n+1 \rangle \langle n+1 | x | n' \rangle, \end{aligned}$$

assim, os únicos elementos de matriz não nulos são

$$\langle n | x^2 | n-2 \rangle = \langle n-2 | x^2 | n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \sqrt{n(n-1)}, \quad (3)$$

$$\langle n | x^2 | n \rangle = \frac{(2n+1)\hbar}{2m\omega}. \quad (4)$$

Agora podemos usar esses resultado para calcular $\langle n | x^3 | n' \rangle$

$$\begin{aligned} \langle n | x^3 | n' \rangle &= \sum_l \langle n | x | l \rangle \langle l | x^2 | n' \rangle \\ &= \langle n | x | n-1 \rangle \langle n-1 | x^2 | n' \rangle + \langle n | x | n+1 \rangle \langle n+1 | x^2 | n' \rangle, \end{aligned}$$

e os elementos não nulos são

$$\langle n | x^3 | n-3 \rangle = \langle n-3 | x^3 | n \rangle = \langle n | x | n-1 \rangle \langle n-1 | x^2 | n-3 \rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{3/2} \sqrt{n(n-1)(n-2)}$$

$$\begin{aligned}
\langle n | x^3 | n-1 \rangle &= \langle n-1 | x^3 | n \rangle = \langle n | x | n-1 \rangle \langle n-1 | x^2 | n-1 \rangle + \langle n | x | n+1 \rangle \langle n+1 | x^2 | n-1 \rangle \\
&= 3 \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{3/2} n^{3/2}.
\end{aligned}$$

Em segunda ordem de teoria de perturbações a contribuição é dada por

$$\begin{aligned}
\sum_{k \neq n} \frac{|\langle k | x^3 | n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} &= \frac{|\langle n-1 | x^3 | n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_{n-1}^{(0)}} + \frac{|\langle n-3 | x^3 | n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_{n-3}^{(0)}} + \frac{|\langle n+1 | x^3 | n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_{n+1}^{(0)}} + \frac{|\langle n+3 | x^3 | n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_{n+3}^{(0)}} \\
&= -\frac{9}{\hbar\omega} \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^3 (3n^2 + 3n + 1) - \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^3 (3n^2 + 3n + 2) \\
&= -\frac{15}{4\hbar\omega} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^3 \left(n^2 + n + \frac{11}{30} \right)
\end{aligned}$$

e finalmente, a energia do nível n do oscilador anharmonico até segunda ordem na perturbação é

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{15\alpha^2}{4\hbar\omega} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^3 \left(n^2 + n + \frac{11}{30} \right)$$