9- Oscilador Harmônico Quântico

O oscilador harmônico simples é um dos problemas mais simples e mais importantes da física, devido às suas inúmeras aplicações e sua solução exata. O modelo do Oscilador Harmônico Quântico (OHQ) é utilizado em diversas áreas da física, como na física do estado sólido, estrutura nuclear, Física estatística, Óptica Quântica, física atômica e molecular, dentre outras, explicando desde o calor específico dos sólidos, até a quantização do campo eletromagnético. Por esta grande importância, este é um modelo que merece nossa atenção. Nesta aula vamos nos dedicar a uma descrição detalhada do OHQ, através de diferentes formalismos:

- Método Analítico: Equação de Hermite
- Método Algébrico: Operadores escada

Vamos começar pela Hamiltoniana do oscilador Harmônico clássico:

$$H = \underbrace{\frac{p^2}{2m}}_{\text{energia cinética}} + \underbrace{\frac{1}{2} m\omega^2 x^2}_{\text{energia potencial}}$$

9.1 - Método Analítico: Equação diferencial de Hermite

Primeiro levamos a Hamiltoniana Clássica para a equação de Schrödinger unidimensional na representação da posição:

$$\mathcal{H}\,\psi(x) = E\,\psi(x)$$

Onde:

$$\psi(x) = \langle x | e_i \rangle \; ; \qquad \mathcal{H}|e_i\rangle = E|e_i\rangle \; ; \qquad \hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\psi(x) = E\,\psi(x) \qquad 9.1$$

É fácil perceber que temos uma partícula, confinada em um potencial parabólico:

- Autoestados de energia:

Fazendo a seguinte mudança de variável:

$$\gamma = \alpha x \; ; \qquad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

A equação de Schrödinger se torna:

$$\frac{d^2}{d\gamma^2}\psi(\gamma) + (\lambda - \gamma^2)\psi(\gamma) = 0 \qquad 9.2$$

Onde: $\lambda = \dfrac{2E}{\hbar\omega}$

A Eq. 9.2 não é fácil de resolver, mas o caso particular $\lambda = 1$ nos dá uma solução conhecida:

$$\psi(r) \propto e^{-r^2/2}$$

Onde a exponencial crescente é fisicamente inaceitável!

Exercício: Verificar que a equação acima é solução da EDO:

$$\psi''(r) + (1 - r^2)\psi(r) = 0$$

Nesse contexto, podemos inferir que a solução da Eq. 9.2 pode ser escrita na forma

$$\psi(r) \propto e^{-r^2/2}\,\varphi(r) \qquad 9.3$$

O problema se torna então determinar a função $\varphi(r)$. Substituindo a Eq. 9.3 na equação 9.2 obtemos uma equação diferencial bastante conhecida dos alunos do curso de física

$$\frac{d^2}{dr^2}\varphi(r) - 2r\frac{d}{dr}\varphi(r) + (\lambda - 1)\varphi(r) = 0$$

A conhecida Equação de Hermite!

Logo:
$$\varphi(\gamma) = \varphi_n(\gamma) = A_n H_n(\gamma)$$

Onde A_n é uma constante de normalização e $H_n(\gamma)$ são os polinômios de Hermite, dados pela formula de Rodrigues:

$$\boxed{H_n(n) = (-1)^n e^{\gamma^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-\gamma^2}}$$

Exercício: Demonstre a fórmula de Rodrigues para os polinômios de Hermite. Esse é um exercício feito normalmente nos cursos de física matemática

Exercício: Calcule os 4 primeiros polinômios de Hermite $n = \{0, 1, 2, 3\}$ usando a fórmula de Rodrigues

Pela Eq. 9.3 podemos escrever a função de onda do sistema

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

Normalizando:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = 1$$

$$|A_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{\left(-\frac{m\omega}{\hbar}\right)x^2} H_n^2\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x\right) dx = 1$$

Usando a condição de ortogonalidade dos polinômios de Hermite:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} H_n(z)\, H_m(z)\, dz = \delta_{nm} 2^n n! \sqrt{\pi}$$

↳ Demonstre!

Logo:

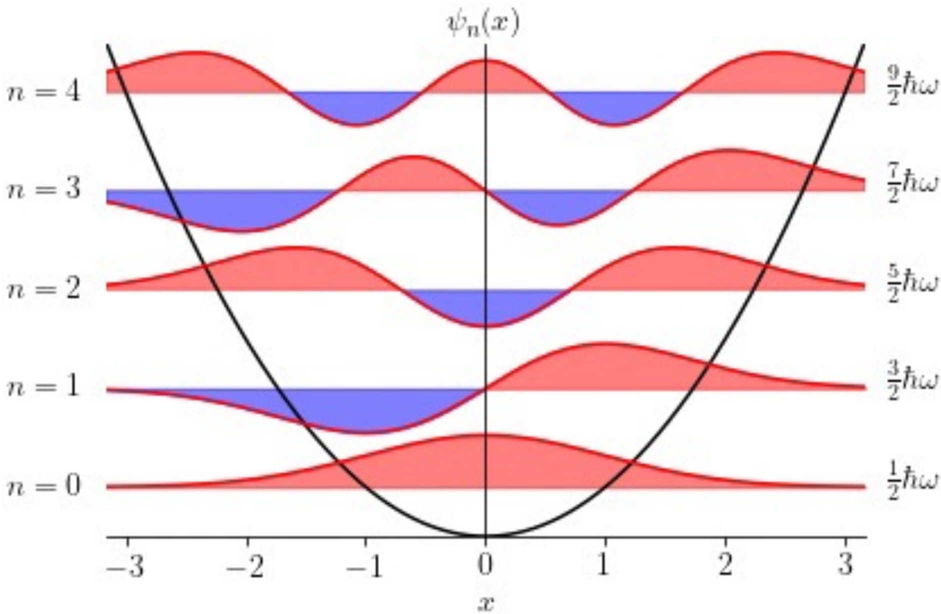
$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\gamma^2} H_n^2(\gamma)\, d\gamma = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{1}{|A_n|^2}$$

$$A_n = \left[\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \frac{1}{2^n n!}\right]^{1/2}$$

Assim a função de onda do OHQ será:

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

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



Funções de Onda para alguns valores de n, sobreposta a energia potencial em que a partícula está submetida!

As funções de onda do OHQ possuem paridade bem definida devido a paridade dos polinômios de Hermite

$$H_n(z) = (-1)^n H_n(z)$$

Ou seja:

$$\begin{cases} n \equiv \text{par} \Rightarrow \psi_n(x) \equiv \text{par} \\ n \equiv \text{ímpar} \Rightarrow \psi_n(x) \equiv \text{ímpar} \end{cases}$$

- Autovalores de Energia

A equação de Hermite possui solução para qualquer valor de λ, entretanto, essa solução só será normalizada caso λ assuma valores discretos:

$$\lambda_n = 2n + 1 = \frac{2E_n}{\hbar\omega}$$

Isso implica:

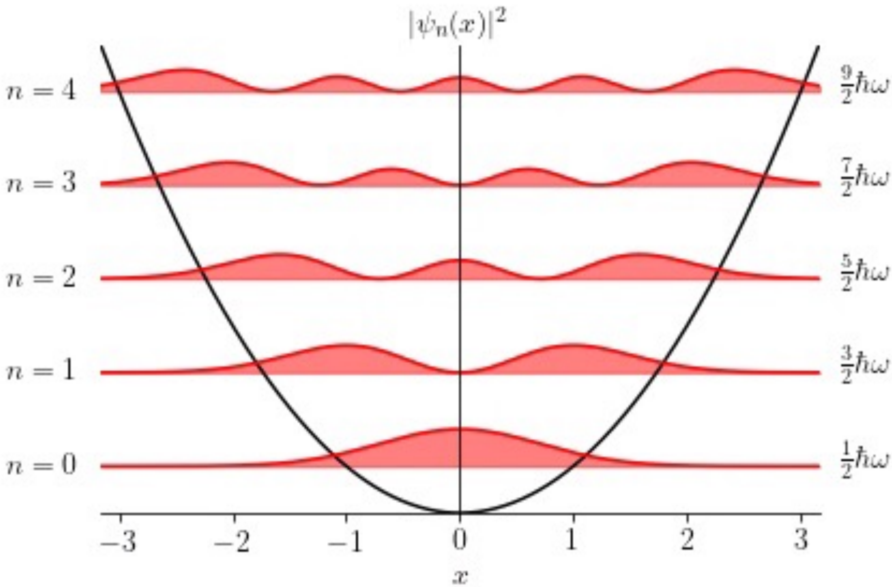
$$\boxed{E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)}$$

Espectro de energia do OHQ

Dessa maneira o estado fundamental do oscilador Harmônico Quântico nunca será zero, sendo, no mínimo $\hbar\omega/2$

- Densidade de Probabilidade

$$P(x) = |\langle x|\psi_n\rangle|^2 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar^2}\right)\frac{1}{2^n n!} e^{\left(-\frac{m\omega}{\hbar}\right)x^2} H_n^2\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x^2\right)$$



Densidade de Probabilidade do OHQ para alguns valores de n.

Um resultado interessante que podemos observar é que à medida que os níveis do oscilador aumentam a densidade de probabilidade Quântica irá se aproximará da densidade de

Probabilidade do caso Clássico:

$$P(x)\,dx = \frac{2\,dt}{\tau} \; ; \quad \tau = \frac{2\pi}{\omega}$$

Seja

$$p(x) = m\frac{dx}{dt} \Longrightarrow P(x) = \frac{\omega m}{\pi p}$$

Seja a energia total do sistema clássico:

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

Onde $x = x_0 \Longrightarrow p = 0$

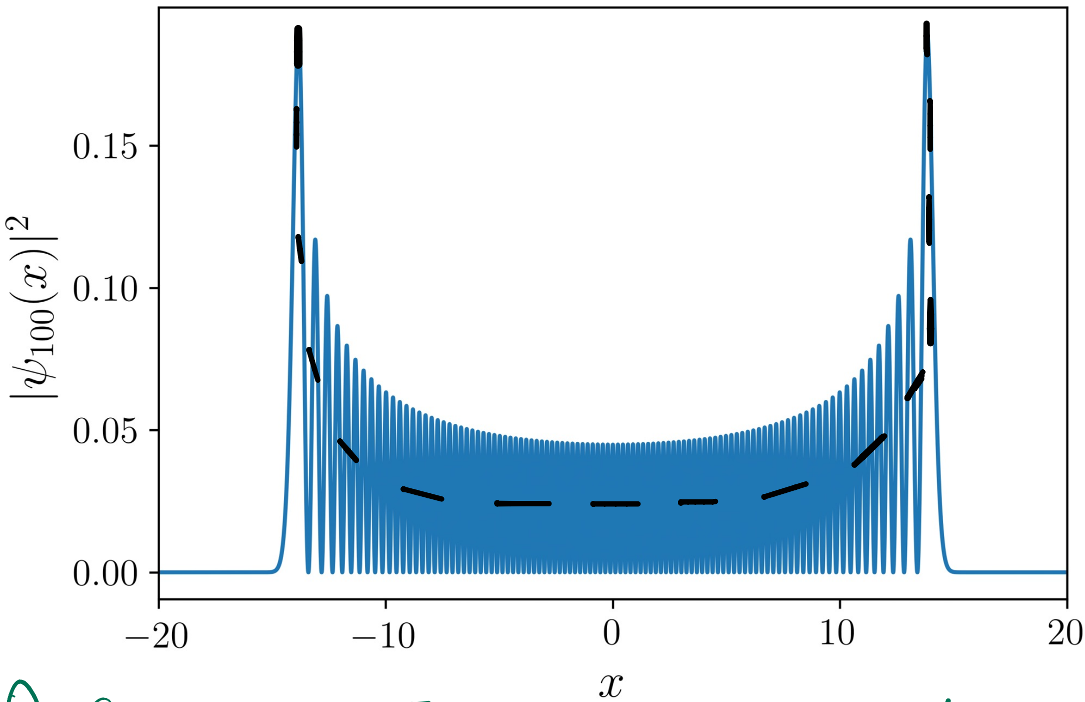
$$x_0 = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$$

$$p^2 = m^2\omega^2(x_0^2 - x^2)$$

$$\boxed{P(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{x_0^2 - x^2}}}$$

Densidade de Probabilidade do Oscilador Harmônico Clássico. $P(x)$ será mínima se $x = 0$ e máxima nos pontos de retorno clássico.

- Princípio de Correspondencia:



O comportamento de sistemas quânticos, reproduz o comportamento clássico para grandes números quânticos (grandes órbitas ou energias). Nesses limites a física quantica irá concordar com a clássica

- Valores esperados e o Teorema de Feynman-Hellmann

Se as funções de onda são autofunções do Hamiltoniano temos que essas funções são estacionárias

$$\mathcal{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle;\ \langle\psi_n|\psi_n\rangle = 1 \Rightarrow \frac{d}{d\lambda}(\langle\psi_n|\psi_n\rangle) = 0$$

$$\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = \frac{\partial}{\partial \lambda}\langle\psi_n|\mathcal{H}|\psi_n\rangle$$

$$= \langle \frac{\partial}{\partial\lambda}\psi_n|\mathcal{H}|\psi_n\rangle + \langle\psi_n|\frac{\partial}{\partial\lambda}\mathcal{H}|\psi_n\rangle + \langle\psi_n|\mathcal{H}|\frac{\partial}{\partial\lambda}\psi_n\rangle$$

$$= E_n\frac{\partial}{\partial\lambda}\langle\psi_n|\psi_n\rangle + \langle\psi_n|\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\lambda}|\psi_n\rangle$$

$$\boxed{\frac{\partial E_n}{\partial\lambda} = \langle\psi_n|\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\lambda}|\psi_n\rangle}$$

Teorema de Feynman-Hellmann

- Fazendo $\lambda = \omega$

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

$$\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\omega} = m\omega\,\hat{x}^2;\quad \frac{\partial E_n}{\partial\omega} = \hbar\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

Usando o TFH

$$\hbar\left(n+\frac{1}{2}\right) = m\omega\langle\psi_n|\hat{x}^2|\psi_n\rangle$$

$$\langle x^2\rangle = \frac{\hbar}{m\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

- Fazendo $\lambda = m$

$$\frac{\partial H}{\partial m} = -\frac{\hat{p}^2}{2m^2} + \frac{1}{2}\omega^2\hat{x}^2 \; ; \; \frac{\partial E}{\partial m} = 0$$

Usando o TFH:

$$\langle\hat{p}^2\rangle = m^2\omega^2\langle\hat{x}^2\rangle$$
$$= m\omega\hbar\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

Exercício: Calcule $\langle(\Delta x)^2\rangle = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2$

$\langle(\Delta p)^2\rangle = \langle p^2\rangle - \langle p\rangle^3$

e mostre o princípio de incerteza no OHQ.