Aula 26 (25/Mar)

Na aula de hoje:

* Revisão da aula anterior.
* Revisão oscilador harmónico clássico.
* Oscilador harmónico quântico em 1D.
* Operadores de criação e de destruição.

Revisão da última aula

* Experiências de pensamento com o aparato experimental de Stern-Gerlach.
* Precessão de Larmor.
* Sistemas de dois níveis.

Capítulo 7: Exemplos de Quantificação Canónica

Refs.:
* Cohen, Vol. 1, Cap. 5
* Sakurai, secção 2.3

7.1 Oscilador Harmónico Quântico em 1D

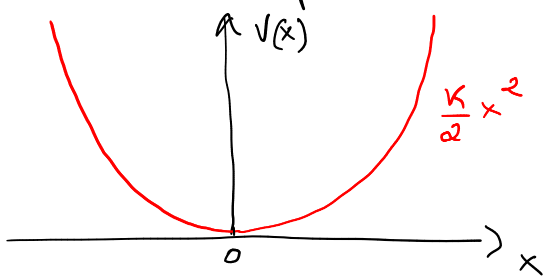
O OHQ ocorre em muitos contextos de física quântica. Alguns exemplos são:

* Vibrações de átomos numa molécula;
* Oscilações de átomos num sólido (fonões);
* Estudo do campo EMG (conjunto osciladores independ.);
* Teoria Quântica de Campo;

7.1.1) Oscilador Harmónico Clássico em 1D

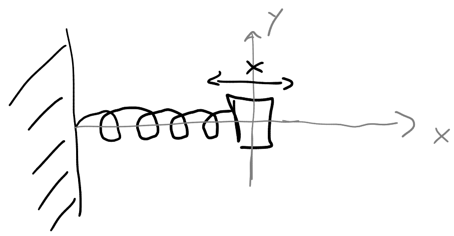
Partícula massa $\underline{m}$ em 1D num potencial,

$$V(x) = \frac{k}{2} x^2$$



que corresponde a força

$$F(x) = -\frac{dV}{dx} = -kx$$



Vimos solução clássica é dada por

$$m \cdot \frac{d^2x}{dt^2} = F(x) = -kx$$

$$\Leftrightarrow \frac{d^2x(t)}{dt^2} = -\frac{k}{m} x(t) \overset{\omega \equiv \sqrt{k/m}}{=} -\omega^2 \cdot x(t) .$$

As soluções particulares

$$x(t) = A \cdot e^{\pm i\omega t}$$

sendo solução geral

$$x(t) = A\, e^{i\omega t} + B\, e^{-i\omega t}$$

onde A e B determinados pelas condições iniciais, por ex. em $t=0$ $x(0) = x_M$, $\dot{x}(0) = 0$, o que resulta em

$$A + B = x_M \underset{R}{\Rightarrow} A = x_M/2$$

$$i\omega\,(A-B) = 0 \Rightarrow A = B$$

que substituindo em cima,

$$x(t) = x_M \cdot \cos(\omega t - \phi)$$

<u>Nota</u>: A energia total será $E = T + V$, i.e

$$E = \frac{m}{2}\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 + \frac{k}{2}x^2$$

$$= x_M^2 \left[\frac{m}{2}\omega^2 \cdot \operatorname{sen}^2(\omega t - \phi) + \frac{k}{2}\cos^2(\omega t - \phi)\right]$$

$\omega^2 \cdot m$

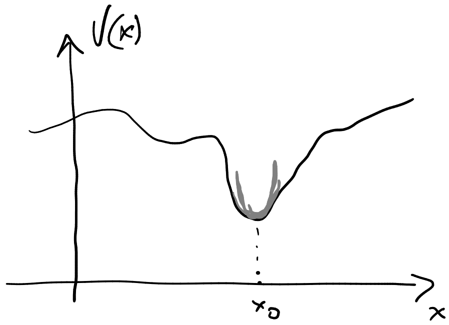
$$= x_M^2\, \omega^2 \frac{m}{2}$$

que é constante no tempo.

↳ consistente com sistema conservativo (i.e. $\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}$).

↳ Qualquer energia é admitida como solução (depende apenas do x_n que é escolhido por nós).

Nota: Podemos expandir em torno do mínimo (local).



7.1.2) Hamiltoniano do Oscilador Harmónico Quântico em 1D

Vimos qual hamiltoniano (ver 1.3.1),

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

Usando regras de quantificação canónica o Hamiltoniano do sist quântico será

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{X}^2 ,$$

e impondo relações comutação

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar \hat{\mathbb{1}} .$$

O $\hat{H}$ será observável associado à energia total.

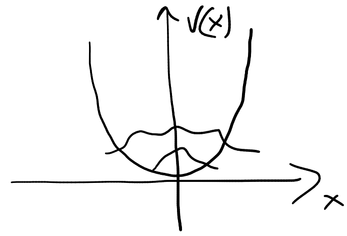
Como $\hat{H}$ independente do tempo, temos apenas que resolver

$$\hat{H}|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$$

que na repres. $\{|x\rangle\}$ é

$$\langle x|\hat{H}|\varphi\rangle = E\langle x|\varphi\rangle$$

$$\Longleftrightarrow \left[-\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega}{2}x^2\right]\varphi(x) = E\,\varphi(x) .$$



Esperamos que:

(i) Auto-vals de $\hat{H}$ sejam positivos pois (o mínimo de $V(x)$ é zero quando $x=0$).

(ii) Os auto-estados de $\hat{H}$ podem ser escritos como auto-estados de $\hat{\Pi}$, op. paridade, pois $[\hat{H}, \hat{\Pi}] = 0$, já que $V(-x) = V(x)$.

(iii) O espectro de $\hat{H}$ deverá ser discreto, pois procuramos estados ligados deste poço potencial.

7.1.3) Soluções do OHQ em 1D usando operadores de criação e destruição

7.1.3.1) Operadores criação e destruição

Definimos $\hat{a}$ e $\hat{a}^{+}$, chamados respectivamente de op. destruição e criação, como

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,\hat{X} + \frac{i}{\sqrt{m\omega\hbar}}\,\hat{P}\right)$$

$$\hat{a}^{+} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,\hat{X} - \frac{i}{\sqrt{m\omega\hbar}}\,\hat{P}\right)$$

que não são hermíticos! Tomar o hermítico conjugado de um deles, dá o outro.

O produto $\hat{a}^{+}$ e $\hat{a}$ é dado por

$$\hat{a}^{+}\hat{a} = \frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{\cdots}{\cdots}}\,\hat{X} - \frac{i}{\sqrt{\cdots}}\,\hat{P}\right)\left(\sqrt{\frac{\cdots}{\cdots}}\,\hat{X} + \frac{i}{\sqrt{\cdots}}\,\hat{P}\right)$$

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\hat{X}^{2} + \frac{1}{m\omega\hbar}\hat{P}^{2} + \frac{i}{\hbar}\underbrace{(\hat{X}\hat{P} - \hat{P}\hat{X})}_{[\hat{X},\hat{P}] = i\hbar\hat{\mathbb{1}}}\right)$$

$$= \frac{1}{\omega\hbar}\left(\underbrace{\frac{\hat{P}^{2}}{2m} + \frac{m\omega^{2}}{2}\hat{X}^{2}}_{\hat{H}} - \frac{\hbar\omega}{2}\hat{\mathbb{1}}\right)$$

e assim podemos reescrever o hamiltoniano como

$h\nu = \hbar\omega$

$$\boxed{\hat{H} = \hbar\omega\left(\overbrace{\hat{a}^{+}\hat{a}}^{\hat{N}} + \frac{\hat{1}}{2}\right) = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{\hat{1}}{2}\right)}$$

onde definimos o operador número, $\hat{N} \equiv \hat{a}^{+}\hat{a}$, que é hermítico, $\hat{N}^{+} = (\hat{a}^{+}\hat{a})^{+} = \hat{a}^{+}(\hat{a}^{+})^{+} = \hat{a}^{+}\hat{a} = \hat{N}$, o que é consistente com o facto de $\hat{H}^{+} = \hat{H}$.

As relações de comutação entre $\hat{a}$ e $\hat{a}^{+}$,

$$[\hat{a}, \hat{a}^{+}] = \frac{1}{2}\left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{m\omega\hbar}}\,\hat{p}\,,\ \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{m\omega\hbar}}\,\hat{p}\right]$$

$$= \frac{1}{2}\left(-\frac{i}{\hbar}\underbrace{[\hat{x}, \hat{p}]}_{= i\hbar\hat{1}} + \frac{i}{\hbar}\underbrace{[\hat{p}, \hat{x}]}_{= -i\hbar\hat{1}}\right) = \hat{1}$$

$$\longrightarrow \boxed{[\hat{a}, \hat{a}^{+}] = \hat{1}}$$

Podemos também calcular de $\hat{a}$ e $\hat{a}^{+}$ com $\hat{N}$,

$$[\hat{N}, \hat{a}] = [\hat{a}^{+}\hat{a}, \hat{a}] = \hat{a}^{+}\hat{a}\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^{+}\hat{a} = \overbrace{[\hat{a}^{+}, \hat{a}]}^{= -\hat{1}}\hat{a} = -\hat{a}$$

$$[\hat{N}, \hat{a}^{+}] = [\hat{a}^{+}\hat{a}, \hat{a}^{+}] = \hat{a}^{+}\hat{a}\hat{a}^{+} - \hat{a}^{+}\hat{a}^{+}\hat{a} = \hat{a}^{+}\overbrace{[\hat{a}, \hat{a}^{+}]}^{= \hat{1}} = \hat{a}^{+}$$

ou seja, $[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a}$ e $[\hat{N}, \hat{a}^{+}] = \hat{a}^{+}$.

7.1.3.2) Espectro de energias do OHQ em 1D

Começamos por estudar operador $\hat{N}$ e o seu espectro. Escrevamos

$$\hat{N}|\varphi_\nu^i\rangle = \nu|\varphi_\nu^i\rangle$$

onde $|\varphi_\nu^i\rangle$ é auto-vec de $\hat{N}$ com auto-val. ν e degenerescência g_ν, onde $i=1,\dots,g_\nu$.

Lema 1: Os auto-vals de $\hat{N}$ são positivos ou zero.

Demonstração: Consideremos $|\varphi_\nu^i\rangle$ arbitrário

$$\|\hat{a}|\varphi_\nu^i\rangle\|^2 \geq 0 \iff \langle\varphi_\nu^i|\overbrace{\hat{a}^\dagger\hat{a}}^{=\hat{N}}|\varphi_\nu^i\rangle \geq 0$$

$$\iff \langle\varphi_\nu^i|\hat{N}|\varphi_\nu^i\rangle \geq 0$$

$$\iff \nu.\underbrace{\langle\varphi_\nu^i|\varphi_\nu^i\rangle}_{=\||\varphi_\nu^i\rangle\|^2\geq 0} \geq 0$$

$$\iff \nu \geq 0$$

$\square$

Lema 2: Seja $|\varphi_\nu^i\rangle$ auto-vec. de $\hat{N}$ não nulo, então

(i) se $\nu = 0$, então $\hat{a}|\varphi_\nu^i\rangle = 0$.

(ii) se $\nu > 0$, então $\hat{a}|\varphi_\nu^i\rangle$ é ket não nulo que é auto-vec. de $\hat{N}$ com auto-val. $\underline{\nu - 1}$.

Demonstração: Para mostrar (i) basta notar do lema 1 que a norma de $\hat{a}|\varphi_{\nu=0}^i\rangle$ é zero, logo vector será zero.

Para mostrar (ii) assumamos $\nu > 0$, logo $a|\varphi_\nu^i\rangle$ tem norma maior do que zero (lema 1). Podemos então escrever

$$\overbrace{[\hat{N}, \hat{a}]}^{= -\hat{a}}|\varphi_\nu^i\rangle = -\hat{a}|\varphi_\nu^i\rangle$$

$$\Leftrightarrow \hat{N}.(\hat{a}|\varphi_\nu^i\rangle) = \hat{a}\underbrace{\hat{N}|\varphi_\nu^i\rangle}_{\nu|\varphi_\nu^i\rangle} - a|\varphi_\nu^i\rangle$$

$$= (\nu - 1).(\hat{a}|\varphi_\nu^i\rangle)$$

ou seja $\hat{a}|\varphi_\nu^i\rangle$ é auto-vec. de $\hat{N}$ com auto-val $\nu - 1$. □

Lema 3: Seja $|\varphi_\nu^i\rangle$ auto-vect. de $\hat{N}$ não nulo,

(i) $\hat{a}^+|\varphi_\nu^i\rangle$ é sempre não nulo.

(ii) $\hat{a}^+|\varphi_\nu^i\rangle$ é auto-vect. de $\hat{N}$ com auto-val $\underline{\nu + 1}$.

Demonstração: Para mostrar (i) basta invocar lema 1, notando $|\hat{a}^+|\varphi_\nu^i\rangle|^2 = \langle\varphi_\nu^i|\hat{a}\hat{a}^+|\varphi_\nu^i\rangle = \langle\varphi_\nu^i|\hat{N}+\hat{1}|\varphi_\nu^i\rangle$
$= (\nu+1)\langle\varphi_\nu^i|\varphi_\nu^i\rangle > 0$.

Já para mostrar (ii) basta usar $[\hat{N},\hat{a}^+] = \hat{a}^+$ para notar que

$$[\hat{N},\hat{a}^+]|\varphi_\nu^i\rangle = \hat{a}^+|\varphi_\nu\rangle$$

$$\Leftrightarrow \hat{N}.(\hat{a}^+|\varphi_\nu^i\rangle) = \hat{a}^+\overbrace{\hat{N}|\varphi_\nu^i\rangle}^{=\nu|\varphi_\nu^i\rangle} + \hat{a}^+|\varphi_\nu^i\rangle$$

$$= (\nu+1).(\hat{a}^+|\varphi_\nu^i\rangle)$$

ou seja $\hat{a}^+|\varphi_\nu^i\rangle$ é auto-vec de $\hat{N}$ com auto-valor $\underline{\nu+1}$.

$\blacksquare$

Lema 4: O espectro de $\hat{N}$ é composto por inteiros não negativos.

Demonstração: Consideremos $|\varphi_\nu^i\rangle$ onde ν não é inteiro, i.e. $n < \nu < n+1$. (inteiros) Do lema 2 sabemos que $\hat{a}^p|\varphi_\nu^i\rangle \propto |\varphi_{\nu-p}^i\rangle \Rightarrow \hat{N}(\hat{a}^p|\varphi_\nu^i\rangle) =$
$= (\nu-p)(\hat{a}^p|\varphi_\nu^i\rangle)$.

↳ Se $p = n$ então $\hat{a}^n|\varphi_\nu^i\rangle \propto |\varphi_{\nu-n}^i\rangle$, estado este que terá norma positiva, do lema 1, pois

$$\|\hat{a}|\varphi_\nu^i\rangle\|^2 = \overbrace{(\nu-1)}^{>0} . \langle\varphi_{\nu-1}^i|\varphi_{\nu-1}^i\rangle > 0$$

$$\|\hat{a}|\varphi_{\nu-1}^i\rangle\|^2 = \overbrace{(\nu-2)}^{>0} \langle\varphi_{\nu-2}^i|\varphi_{\nu-2}^i\rangle > 0$$

$$\vdots$$

$$\|\hat{a}|\varphi_{\nu-n+1}^i\rangle\|^2 = (\nu-n) . \langle\varphi_{\nu-n}^i|\varphi_{\nu-n}^i\rangle > 0$$

$\Rightarrow \langle\varphi_{\nu-n}^i|\varphi_{\nu-n}^i\rangle > 0$ pois $\nu - n > 0$.

↳ Mas se $p = n+1$ então isto implicará que para que norma de $|\varphi_{\nu-n-1}^i\rangle$ ser positiva, o Lema 1 não pode ser obedecido

$$\|\hat{a}|\varphi_{\nu-n}^i\rangle\|^2 = \overbrace{(\nu-n-1)}^{<0} . \langle\varphi_{\nu-n-1}^i|\varphi_{\nu-n-1}^i\rangle > 0$$

mas $\nu - n - 1 < 0 \Rightarrow \langle\varphi_{\nu-n-1}^i|\varphi_{\nu-n-1}^i\rangle < 0$!!

A forma de evitar esta contradição é restringir ν a valores inteiros não negativos. Assim, se $\nu = n$, então $\hat{a}|\varphi_{\nu-n}^i\rangle = 0$ e a inconsistência desaparecerá.

<u>Lema 5</u>: Todos os auto-estados de $\hat{N}$ são <u>não degenerados</u>.

Demonstração: Vamos mostrar que $|\varphi_0\rangle$ é não-degenerado, e que por essa razão todos os $|\varphi_n\rangle$ serão também não degenerados, pois são obtidos recursivamente de $|\varphi_0\rangle$.

Sabemos que $\hat{a}|\varphi_0^i\rangle = 0$. Na representação $\{|x\rangle\}$ esta eqç tem a forma

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

$$\times\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

$$\Longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{m\omega}{\hbar}\cdot x + \cancel{\frac{i}{\hbar}}\left(\cancel{-i\hbar}\frac{d}{dx}\right)\right]\varphi_0^i(x) = 0$$

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

que terá solução $\varphi_0^i(x) = c.\,e^{\alpha x^2}$; que substituindo

$$\left[\frac{m\omega}{\hbar}x + 2\alpha x\right]c.\,e^{\alpha x^2} = 0$$

$$\Longleftrightarrow \alpha = -\frac{m\omega}{2\hbar}$$

ou seja

$$\varphi_0(x) = c.\,e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2},$$

onde c é constante.

↳ este auto-vec não é degenerado pois só ℓ não fixo e diferentes ℓ são o mesmo estado físico.

$$\Rightarrow \varphi_0^{*}(x) = \varphi_0(x).$$

Sabemos do lema 3 que $a^{+}|\varphi_n^i\rangle \propto |\varphi_{n+1}^i\rangle$, logo teremos $a^{+}|\varphi_0\rangle \propto |\varphi_1\rangle$ que por $|\varphi_0\rangle$ não ser degenerado, $|\varphi_1\rangle$ não será degenerado. O mesmo raciocínio se repete para obter todos os $|\varphi_n\rangle$, concluindo assim que todos auto-vec de $\hat{N}$ serão não-degenerados. $\square$