Autor: Henrique Fleming

13: O oscilador harmônico

Exercícios

Uma partícula de massa m executa movimento unidimensional sob a ação de uma força elástica $-kx$. Isto é um oscilador harmônico. Sua energia potencial é $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$, e. portanto, a equação de Schrödinger para estados estacionário é

$$-\frac{\hbar}{2m\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi=E\psi} \tag{209}$$

Note-se que $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$.

A Eq.(209) pode ser escrita na forma

$$\frac{1}{2m\left[\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)^2+(m\omega x)^2\right]\psi=E\psi} \tag{210}$$

Daqui se vê que

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left[\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)^2 + (m\omega x)^2\right] \tag{211}$$

Considere os operadores

$$a_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2m}}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} \pm im\omega x\right) \tag{212}$$

Um cálculo simples mostra que

$$a_-a_+ = \frac{1}{2m}\left(\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)^2 + (m\omega x)^2\right) + \frac{1}{2}\hbar\omega \tag{213}$$

de maneira que, usando (211),

$$\left(a_-a_+ - \tfrac{1}{2}\hbar\omega\right)\psi = E\psi \tag{214}$$

Um outro cálculo simples resulta em

$$[a_-, a_+] = \hbar\omega \tag{215}$$

A Eq.(214) dá

$$\begin{aligned}
\left(a_-a_+ - a_+a_- + a_+a_- - \frac{1}{2}\hbar\omega\right)\psi &= E\psi \\
\left([a_-, a_+] + a_+a_- - \frac{1}{2}\hbar\omega\right)\psi &= E\psi \\
\left(a_+a_- + \frac{1}{2}\hbar\omega\right)\psi &= E\psi
\end{aligned} \tag{216}$$

Lema 1: Seja ψ um estado estacionário do oscilador harmônico de energia E. Então $a_+\psi$ é um estado estacionário de energia $E+\hbar\omega$.
Dem.:

$$\left(a_+a_- + \frac{1}{2}\hbar\omega\right)(a_+\psi) = a_+a_-a_+\psi + \frac{1}{2}\hbar\omega(a_+\psi)$$

$$= a_+\left(a_-a_+\psi + \frac{1}{2}\hbar\omega\psi\right) = a_+\left[\left(a_-a_+ - a_+a_- + a_+a_-\right)\psi + \frac{1}{2}\hbar\omega\psi\right]$$

$$= a_+\left[[a_-, a_+]\psi + \left(a_+a_- + \frac{1}{2}\hbar\omega\right)\psi\right] = a_+\left[\hbar\omega\psi + E\psi\right] = (E+\hbar\omega)(a_+\psi)$$

Ou,

$$\hat{H}(a_+\psi) = (E+\hbar\omega)(a_+\psi) \tag{217}$$

Analogamente se mostra que

$$\hat{H}(a_-\psi) = (E - \hbar\omega)(a_-\psi) \tag{218}$$

Lema 2: A energia do oscilador harmônico é ≥ 0.

Dem.: Esta demonstração depende de um Lema, demonstrado mais adiante,[15] junto à Eq.(290). Como $\hat{H}$ pode ser escrito como a soma de dois operadores hermiteanos ao quadrado,

$$\hat{H} = \left(\frac{\hat{p}_x}{\sqrt{2m}}\right)^2 + \left(\sqrt{\frac{m}{2}}\,\omega x\right)^2$$

segue que $\langle\hat{H}\rangle \geq 0$. Como os autovalores de um operador são casos particulares de seus valores médios (quando os estados são as autofunções), a desigualdade acima proíbe a existência de autovalores negativos do hamiltoniano.

Em decorrência disso, deve haver um estado ψ_0 tal que

$$a_-\psi_0 = 0 \tag{219}$$

De fato, se não fosse assim, dada qualquer autofunção do hamiltoniano do oscilador harmônico, a aplicação a ela do operador a_- geraria uma outra autofunção , de energia menor, o processo podendo se repetir indefinidamente, até se chegar a energia s negativas, o que é proibido.

Explicitamente esta última equação é

$$\frac{1}{\sqrt{2m}}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi_0}{dx} - im\omega x\psi_0\right) = 0 \tag{220}$$

$$\frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar}x\psi_0$$

$$\frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar}xdx$$

$$\psi_0(x) \quad = \quad K \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}\ x\right) \tag{221}$$

Esta é a função de onda do estado estacionário do oscilador harmônico. A energia desse estado é obtida assim:

$$\hat{H}\psi_0(x) = \left(a_+a_- + \frac{1}{2}\hbar\omega\right)\psi_0(x) = \frac{1}{2}\hbar\omega\psi_0(x) \tag{222}$$

Logo, temos

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \tag{223}$$

O estado de energia imediatamente mais alta, chamado de *primeiro estado excitado*, tem a função de onda

$$\psi_1(x) = a_+\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2m}}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} + im\omega x\right)\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \tag{224}$$

ou

$$\psi_1(x) = Ki\sqrt{\frac{m}{2}}\omega x \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \tag{225}$$

e possui energia

$$E_1 = (1 + \frac{1}{2})\hbar\omega \tag{226}$$

Mais geralmente,

$$\psi_n(x) = A_n(a_+)^n \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \tag{227}$$

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \tag{228}$$

e, com algum esforço, pode-se mostrar que

$$A_n = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{n!(\hbar\omega)^n}} \tag{229}$$

Vamos fazer o esforço mencionado acima. Seja $\psi_0(x)$ a autofunção normalizada do estado fundamental do oscilador harmônico. Então,

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \tag{230}$$

e seja

$$\psi_n(x) = K_n \left(a_+\right)^n \psi_0(x) \tag{231}$$

Temos, obviamente,

$$\psi_{n-1}(x) = K_{n-1} \left(a_+\right)^{n-1} \psi_0(x) \ , \tag{232}$$

de onde se deduz que

$$\psi_n(x) = K_n a_+ \left((a_+)^{n-1}\psi_0(x)\right) = \frac{K_n}{K_{n-1}} a_+ \psi_{n-1}(x) \tag{233}$$

Considere a integral de normalização de $\psi_n(x)$:

(

$$\int dx \psi_n^*(x)\psi_n(x) = \left|\frac{K_n}{K_{n-1}}\right|^2 \int dx (a_+\psi_{n-1})^*(a_+\psi_{n-1}) = \left|\frac{K_n}{K_{n-1}}\right|^2 \int dx \psi$$)

onde usamos o fato de que o adjunto de a_+ é a_-. Pela equação (214), temos

$$a_- a_+ \psi_{n-1} = \hbar\omega(n - 1 + \tfrac{1}{2})\psi_{n-1} + \frac{\hbar\omega}{2}\psi_{n-1} = \hbar\omega\psi_{n-1} \tag{235}$$

Logo, podemos escrever

$$\int \psi_n^*(x)\psi_n(x)dx = \left|\frac{K_n}{K_{n-1}}\right|^2 \hbar\omega n \int dx \psi_{n-1}^* \psi_{n-1} \tag{236}$$

Iterando este procedimento, teremos

$$\int \psi_n^*(x)\psi_n(x)dx = \left|\frac{K_n}{K_{n-1}}\right|^2 \left|\frac{K_{n-1}}{K_{n-2}}\right|^2 (\hbar\omega)^2 n(n-1) \int dx \psi_{n-2}^* \psi_{n-2} \tag{237}$$

ou

$$\int \psi_n^*(x)\psi_n(x)dx = \left|\frac{K_n}{K_{n-2}}\right|^2 (\hbar\omega)^2 n(n-1) \int dx \psi_{n-2}^* \psi_{n-2} \tag{238}$$

Prosseguindo, chegaremos a

$$\int \psi_n^*(x)\psi_n(x)dx = |K_n|^2 (\hbar\omega)^n (n!) \int dx \psi_0^* \psi_0(x) = 1 \tag{239}$$

ou seja,

$$\mathrm{K}_n = \frac{1}{\sqrt{(\hbar\omega)^n n!}} \tag{240}$$

Portanto,

$$\psi_n(x) = K_n (a_+)^n \psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{n!(\hbar\omega)^n}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \tag{241}$$

Um oscilador harmônico que não oscila é decepcionante. Se calcularmos o valor médio da posição, $\langle \hat{x} \rangle$, nos estados estacionários do oscilador harmônico, que vimos até agora, encontraremos (*e o leitor deve obter isso por conta própria!*)

$$\langle \hat{x} \rangle = 0$$

ou seja, nenhuma oscilação! Estados estacionários não são apropriados para comparar o sistema quântico com o análogo clássico. Para obter alguma coisa semelhante a um pêndulo, devemos estudar *pacotes de onda*. Os particulares pacotes de onda que vamos estudar agora se chamam *estados coerentes*. Consideremos as autofunções do operador a_-, introduzido acima. Como a_- não comuta com $\hat{H}$, as autofunções de a_- não serão, em geral, autofunções de $\hat{H}$, ou seja, não serão estados estacionários. Sejam então ϕ_α funções tais que

$$a_- \phi_\alpha = \alpha \phi_\alpha \tag{243}$$

Como o operador a_- não é hermiteano, os autovalores α serão números complexos quaisquer.

Lembremos que os estados estacionários podem ser escritos em termos do estado fundamental assim:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!(\hbar\omega)^n}} (a_+)^n \psi_0(x) \tag{244}$$

Vai ser importante nos cálculos que faremos a seguir a seguinte quantidade:

$$(\psi_n, \phi_\alpha) = \frac{1}{\sqrt{n!(\hbar\omega)^n}} \left((a_+)^n \psi_0, \phi_\alpha\right) = \frac{1}{\sqrt{n!(\hbar\omega)^n}} \left(\psi_0, (a_-)^n \phi_\alpha\right) =$$

$$= \alpha^n \frac{}{\sqrt{n!(\hbar\omega)^n}(\psi_0, \phi_\alpha)} \tag{245}$$

Vamos agora expandir $\phi_\alpha(x)$ em estados estacionários. Para simplificar a notação, vamos introduzir a abreviação

$$K_n = (\hbar\omega)^{-\frac{n}{2}}$$

$$\begin{aligned} \phi_\alpha(x) &= \sum_n (\psi_n, \phi_\alpha) \psi_n \\ &= \sum_n \frac{K_n \alpha^n}{\sqrt{n!}} (\psi_0, \phi_\alpha) \psi_n \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= C \sum_n \frac{K_n \alpha^n}{\sqrt{n!}} \psi_n \\
&= C \sum_n \frac{K_n \alpha^n}{\sqrt{n!}} \frac{K_n}{\sqrt{n!}} (a_+)^n \psi_0 \\
&= C \sum_n \frac{K_n^2 (\alpha a_+)^n}{n!} \psi_0 \qquad (246)
\end{aligned}
$$

$$
\phi_\alpha(x) = C \sum_n \frac{K_n^2 (\alpha a_+)^n}{n!} \psi_0 = C \sum_n \frac{1}{n!} \left(\frac{\alpha a_+}{\hbar\omega} \right)^n \psi_0 \qquad (247)
$$

A constante C é determinada normalizando-se $\phi_\alpha(x)$, como segue:

$$
\begin{aligned}
1 &= (\phi_\alpha, \phi_\alpha) = C^2 \left(\sum_n \frac{1}{n!} \left(\frac{\alpha a_+}{\hbar\omega} \right)^n \psi_0,\ \sum_m \frac{1}{m!} \left(\frac{\alpha a_+}{\hbar\omega} \right)^m \psi_0 \right) \\
&= C^2 \sum_n \frac{1}{n!} \left(\frac{\alpha^*}{\hbar\omega} \right)^n \sum_m \frac{1}{m!} \left(\frac{\alpha}{\hbar\omega} \right)^m \left((a_+)^n \psi_0,\ (a_+)^m \psi_0 \right) \\
&= C^2 \sum_n \frac{1}{(n!)^2} \frac{|\alpha|^{2n}}{(\hbar\omega)^{2n}} n! (\hbar\omega)^n \\
&= C^2 \sum_n \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \frac{1}{(\hbar\omega)^n} \\
&= C^2 \exp\left(\frac{|\alpha|^2}{\hbar\omega} \right)
\end{aligned}
$$

Logo,

$$
C = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2\hbar\omega} \right)
$$

Voltando à expansão,

$$
\phi_\alpha(x) = \exp\left(-\tfrac{|\alpha|^2}{2\hbar\omega} \right) \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!(\hbar\omega)^n}} \psi_n \qquad (248)
$$

- Para obter a dependência temporal de $\phi_\alpha(x)$ precisamos demonstrar um resultado geral:

Teorema: Seja $\hat{H}$ o hamiltoniano de um sistema físico, e sejam $\psi_n(x)$ suas autofunções. Sabemos que

$$\psi_n(x,t) = \psi_n(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right)$$

onde os E_n são os autovalores de $\hat{H}$, ou seja, satisfazem as equações

$$\hat{H}\psi_n = E_n \psi_n \ .$$

Seja $\phi(x)$ um estado qualquer desse sistema, e

$$\phi(x) = \sum_n a_n \psi_n(x)$$

sua expansão nas autofunções de $\hat{H}$ no instante $t = 0$. Então,

$$\phi(x,t) = \sum\nolimits_n a_n \psi_n(x) \exp\left(-\tfrac{i}{\hbar} E_n t\right) \tag{249}$$

onde os a_n são os mesmos da expansão em $t = 0$.

A demonstração consiste em mostrar que $\phi(x,t)$ satisfaz a equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \phi(x,t)}{\partial t} = \hat{H}\phi(x,t)$$

com a condição inicial $\phi(x, t = 0) = \phi(x)$.

De fato,

$$i\hbar \partial \phi(x,t) \partial t = i\hbar \sum_n a_n \psi_n(x) \frac{\partial}{\partial t} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right)$$

$$= \sum_n a_n E_n \psi_n(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) = \hat{H} \sum_n a_n \psi_n(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right)$$

$$= \hat{H}\phi(x,t)$$

A verificação da condição inicial é trivial.

Aplicando este teorema à Eq.(248), temos

$$\phi_\alpha(x,t) = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2\hbar\omega}\right)\sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!(\hbar\omega)^n}}\psi_n \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right) \tag{250}$$

ou

$$\begin{aligned} \phi_\alpha(x,t) &= \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2\hbar\omega}\right)\sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!(\hbar\omega)^n}}\psi_n \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hbar\omega(n + \right. \\ \phi_\alpha(x,t) &= \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2\hbar\omega}\right)\sum_n \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!(\hbar\omega)^n}}\psi_n \exp\left(-\frac{i\omega}{2}t\right) \end{aligned} \tag{251}$$

Comparando com a Eq.(248), vê-se que:

$$\phi_\alpha(x,t) = \phi_{\alpha(t)} e^{-\frac{i\omega t}{2}} \tag{252}$$

com

$$\alpha(t) = \alpha e^{-i\omega t} \tag{253}$$

Podemos agora calcular $\langle\hat{x}\rangle$ no estado $\phi_\alpha(x,t)$.

$$\langle\hat{x}\rangle = (\phi_\alpha(x,t), \hat{x}\phi_\alpha(x,t)) = \left(\phi_{\alpha(t)}, \hat{x}\phi_{\alpha(t)}\right) \tag{254}$$

Da definição de a_+ e a_- obtém-se facilmente que

$$\hat{x} = \frac{-i}{\sqrt{2m\,\omega}}(a_+ - a_-)$$

logo,

$$\langle \hat{x} \rangle = \left(\phi_{\alpha(t)}, \hat{x}\phi_{\alpha(t)}\right) = \frac{-i}{\sqrt{2m}\,\omega}\left\{\left(\phi_{\alpha(t)}, a_+\phi_{\alpha(t)}\right) - \left(\phi_{\alpha(t)}, a_-\phi_{\alpha(t} \right. \right. \qquad (255)$$

Mas

$$a_-\phi_{\alpha(t)} = \alpha(t)\phi_{\alpha(t)}$$

e, como a_+ é o adjunto de a_-,

$$a_+\phi_{\alpha(t)} = \alpha^*(t)\phi_{\alpha(t)}$$

Logo,

$$\langle \hat{x} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2m}\,\omega}\left\{\alpha^*(t) - \alpha(t)\right\} \qquad (256)$$

Pondo $\alpha = |\alpha| \exp i\delta$, temos

$$\alpha(t) = |\alpha| e^{-i(\omega t - \delta)}$$

e

$$\langle \hat{x} \rangle = \frac{|\alpha|}{\sqrt{2m}\,i\omega}\left(e^{i(\omega t-\delta)} - e^{-i(\omega t-\delta)}\right) = |\alpha|\sqrt{\frac{2}{m\omega^2}}\sin\left(\omega t - \delta\right) \qquad (257)$$

e surgiu finalmente a oscilação procurada! O valor médio da posição, nesse estado, oscila exatamente como no caso clássico.

Exercícios

Para uso nos exercícios subsequentes, apresentamos aqui uma tabela de funções de onda de estados estacionários do oscilador harmônico.

n	E_n	$\psi_n(x) = \left(\frac{1}{n!2^n a\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} H_n\left(\frac{x}{a}\right) e^{-x^2/2a^2}$
0	$\frac{1}{2}\hbar\omega$	$\left(\frac{1}{a\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-x^2/2a^2}$
1	$\frac{3}{2}\hbar\omega$	$\left(\frac{1}{2a\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} 2\left(\frac{x}{a}\right) e^{-x^2/2a^2}$
2	$\frac{5}{2}\hbar\omega$	$\left(\frac{1}{8a\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \left[2 - 4\left(\frac{x}{a}\right)^2\right] e^{-x^2/2a^2}$
3	$\frac{7}{2}\hbar\omega$	$\left(\frac{1}{48a\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \left[12\left(\frac{x}{a}\right) - 8\left(\frac{x}{a}\right)^3\right] e^{-x^2/2a^2}$
4	$\frac{9}{2}\hbar\omega$	$\left(\frac{1}{384a\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \left[12 - 48\left(\frac{x}{a}\right)^2 + 16\left(\frac{x}{a}\right)^4\right] e^{-x^2/2a^2}$

onde $a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$.

1.(a) Mostre que o parâmetro a que aparece na tabela é igual ao deslocamento máximo de um oscilador clássico de energia $\frac{1}{2}\hbar\omega$.

(b) Verifique que a expressão $(1+bx^2)e^{-x^2/2a^2}$ satisfaz a equação de Schrödinger para o movimento harmônico simples com energia $E = \frac{5}{2}\hbar\omega$. Qual o valor para b?

2. Considere o *meio-oscilador* harmônico, isto é, uma partícula cuja energia potencial é

$$V(x) = \infty \ , \quad x < 0$$

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \ , \quad x \geq 0$$

(a) Compare as funções de onda dos estados estacionários deste sistema com as do oscilador harmônico normal com os mesmos valores de m e k.

(b) Quais são as energias permitidas para o *meio-oscilador*?

(c) Invente um sistema que seria o análogo macroscópico deste sistema quântico.

3. Regiões classicamente proibidas para o oscilador harmônico simples. Usando a função de onda normalizada para o estado fundamental do oscilador harmônico, calcule a probabilidade de que uma observação da posição detete a partícula numa região classicamente proibida. A integral que você obterá não pode ser resolvida analiticamente. Olhe o resultado numérico numa tabela da *error function*, ou nos programas Maple ou Mathematica.

4. A tabela exibe as funções $H_n(x)$, denominadas polinômios de Hermite.

(a)Mostre que e^{-t^2+2tx} é uma *função geratriz* dos polinômios de Hermite, isto é,que

(b)

$$e^{-t^2+2tx} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} H_n(x)$$

ao menos até $n = 4$. Determine $H_5(x)$.

(b) Tomando a derivada desta expressão, demonstre as relações de recorrência

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dx} H_n(x) &= 2n H_{n-1}(x) \\
H_{n+1}(x) &= 2x H_n(x) - 2n H_{n-1}(x)
\end{aligned}$$

5. Valendo-se da expressão das funções de onda do oscilador harmônico, mostre que devemos esperar que

Autor: Henrique Fleming

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{mn}$$