Materiais Elétricos e Magnéticos para Engenharia

Professor: Marcus V. Batistuta

Aula-2

Mecânica Quântica: O Elétron no Átomo

1º Semestre de 2018

FGA - Universidade de Brasília

Relações Fundamentais

$$E = h\nu$$

$$p = h/\lambda$$

$$p = \hbar k$$

$$k = 2\pi/\lambda$$

Função de Onda

$$\Psi(x,t) = A\, e^{ik_0 x - i\omega t}$$ (Onda Plana)

$$k_0 = p_0/\hbar \qquad E = \hbar\omega$$

$$\Delta k_0 = 0 \qquad \Delta x \to \infty$$

Princípio da Incerteza (Heisenberg – 1927)

$$\Delta p = \hbar \Delta k \qquad \Delta x \Delta k \simeq 1$$

$$\Psi(x,0) \Longrightarrow \Delta x \Delta p \simeq \hbar$$

(Superposição de Ondas Planas)
t = 0

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar/2 \qquad \Delta E\, \Delta t \;\geq\; \hbar/2$$

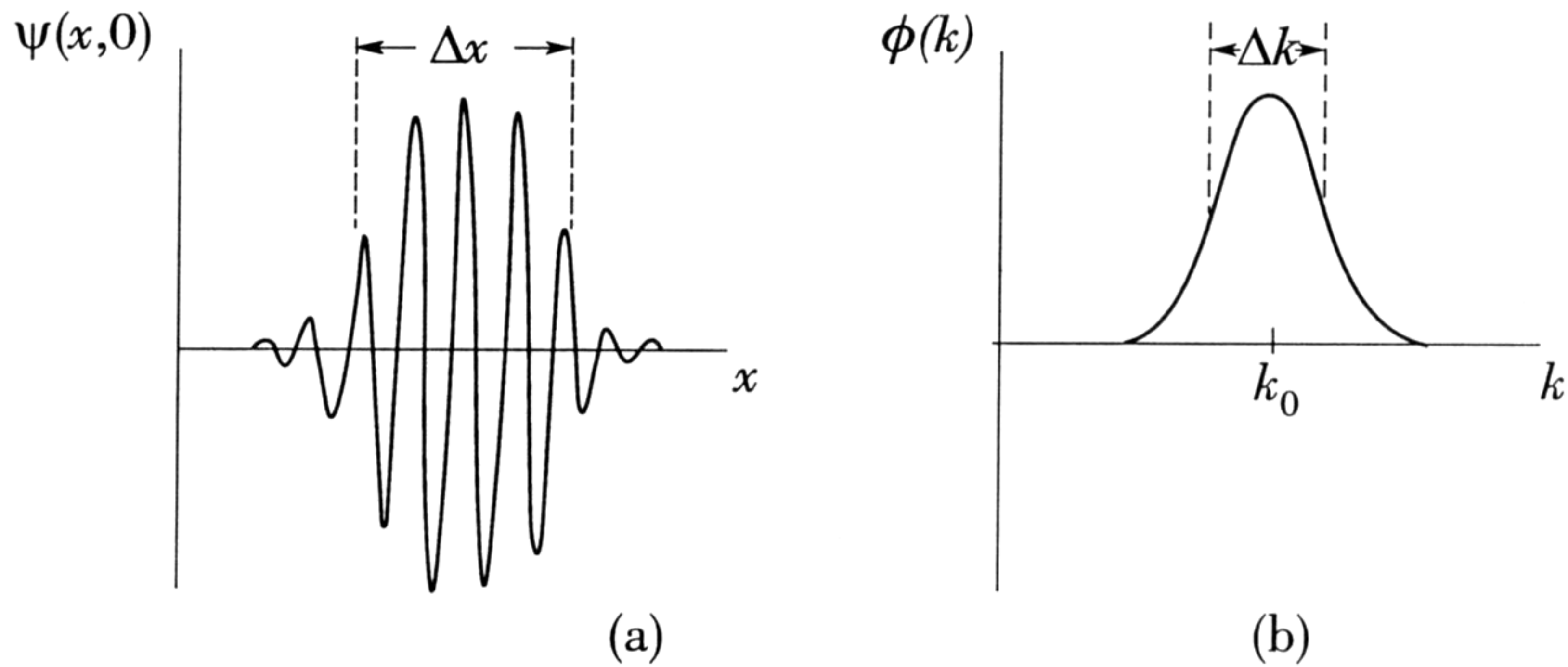


Figura 2.14: (a) Pacote de ondas que descreve o estado de uma partícula livre localizada numa região do espaço. (b) Transformada de Fourier do pacote de ondas mostrado em (a).

Probabilidade de Função de Onda

$$P(x,t) = \Psi^*(x,t)\ \Psi(x,t)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x,t)\ dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\ \Psi(x,t)\ dx = 1$$

Operadores Quânticos

$$p_{op} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$ (Momentum)

$$p_{op}\Psi(x,t) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}A\ \mathrm{e}^{ik_0x-i\omega t} = \hbar k_0\ \Psi(x,t)$$ (Elétron Livre)

$$p_{op}\Psi = p\Psi$$

Autofunção

Autovalor

Operador Momentum

$$\vec{p}_{op} = -i\hbar\,\nabla = -i\hbar\left(\hat{x}\frac{\partial}{\partial x} + \hat{y}\frac{\partial}{\partial y} + \hat{z}\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

Operador Energia

$$E_{op} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

$$E_{op}\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}A\,\mathrm{e}^{ik_0x-i\omega t} = \hbar\omega\,\Psi(x,t)$$ (Elétron Livre)

Autovalor

$$\boxed{E = \hbar\omega}$$

Operador Energia Cinética

$$T_{op} = \frac{1}{2m}\vec{p}_{op}.\vec{p}_{op} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla.\nabla = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$T_{op} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Grandeza Clássica	Operador Quântico
x	x
$\vec{r}$	$\vec{r}$
p_x	$-i\hbar\partial/\partial x$
$\vec{p}$	$-i\hbar\nabla$
E	$i\hbar\partial/\partial t$
T	$-(\hbar^2/2m)\nabla^2$
$\vec{L}$	$-i\hbar\vec{r}\times\nabla$

Valor Esperado

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi \, dxdydz = 1$$

$$< Q >= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* Q_{op} \Psi \, dxdydz$$

Equação de Schrödinger (1926)

$$(T_{op} + V_{op})\Psi = E_{op}\Psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\vec{r},t) + V_{op}\Psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \qquad \text{(1D)}$$

Equação de Schrödinger Independente do Tempo

$$\Psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})\phi(t)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r})\ \phi(t) + V(\vec{r})\psi(\vec{r})\phi(t) = i\hbar\frac{\partial\phi(t)}{\partial t}\psi(\vec{r})$$

Divide por: $\psi(\vec{r})\phi(t)$

$$\frac{1}{\psi(\vec{r})}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r})\right] = \frac{1}{\phi(t)}\left[i\hbar\frac{\partial\phi(t)}{\partial t}\right]$$

$$\frac{d\phi(t)}{dt} = -i\frac{E}{\hbar}\phi\ (t) \quad \Longrightarrow \quad \phi(t) = \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}\,t\right)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\ \psi(\vec{r}) = E\ \psi(\vec{r})$$

Hamiltoniano

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

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})$$

Solução Completa da Eq. de Schrödinger

$$\Psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})\,\exp\left(-i\frac{E}{\hbar}\,t\right)$$

$$P(\vec{r},t) = \Psi^*(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t) = |\psi(\vec{r})|^2$$

Estado Estacionário!

Elétron Livre (1D)

$$V(r) = \text{constante.}$$

$$\vec{F} = -\nabla V = 0$$

$$V = 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\,\psi(x) \quad \Rightarrow \quad \psi(x) = A\,\mathrm{e}^{ikx} + B\,\mathrm{e}^{-ikx}$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad E = \frac{p^2}{2m}$$

$$\phi(t) = \exp(-iEt/\hbar)$$

$$\Psi(x,t) = A\,\mathrm{e}^{ikx - i\omega t}$$

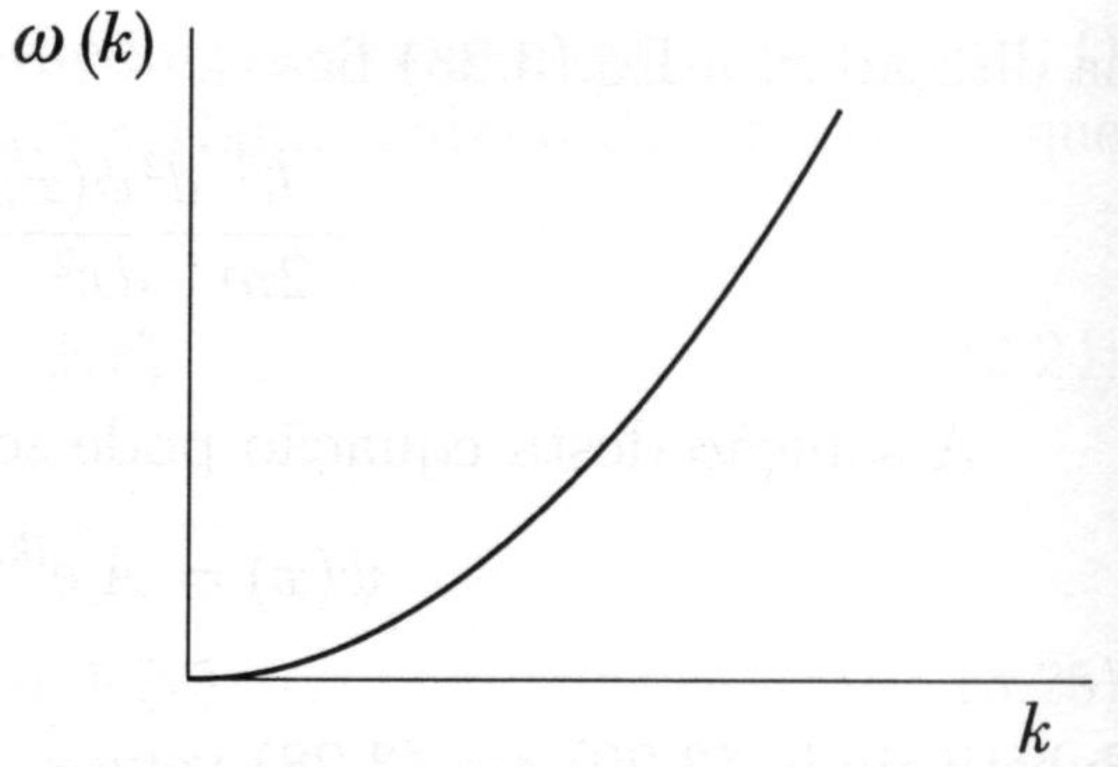
Relação de Dispersão - Elétron Livre (1D)

$$E = \hbar\omega$$

$$\boxed{\omega(k) = \frac{\hbar}{2m}k^2}$$

$$\lambda = \frac{2\pi}{k}$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$



$$v_g = \left.\frac{\partial\omega}{\partial k}\right|_{k_0}$$

$$v_{part} = v_g = \frac{\hbar}{m}k_0$$

$$p = m\,v_{part} = \hbar\,k_0$$

Curral Quântico

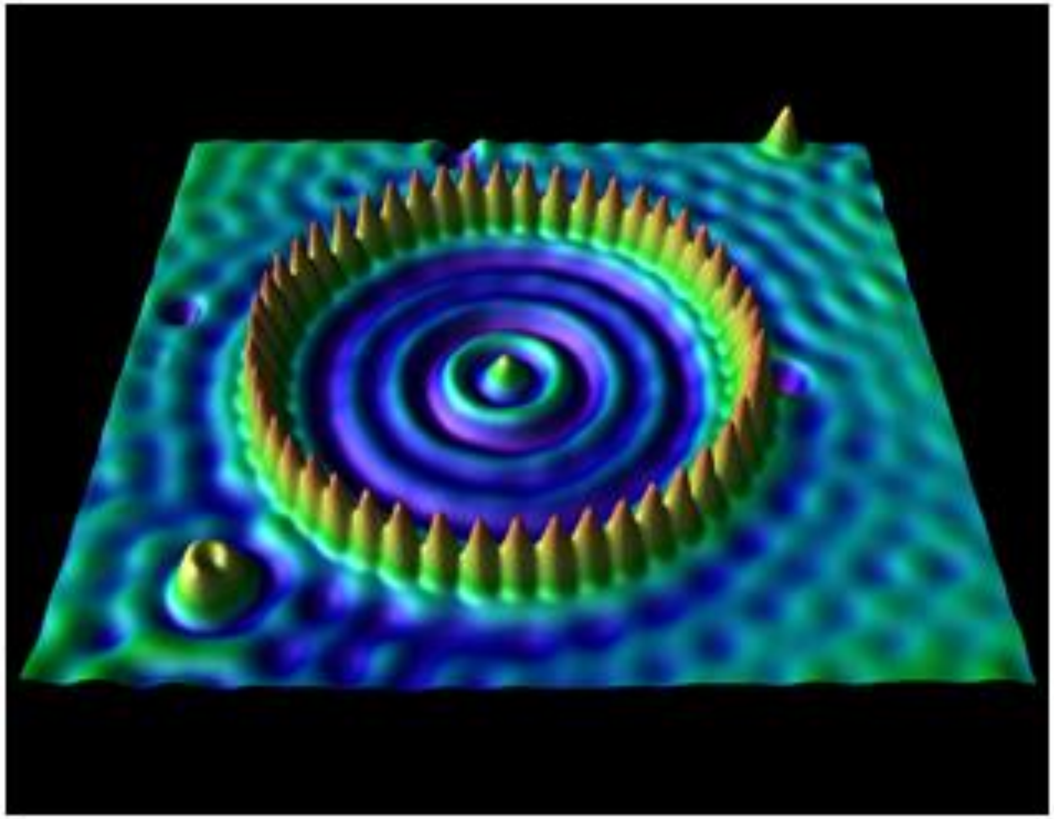


Image: Image taken with a scanning tunneling microscope. This image is about 5 nanometers shows a copper surface where the copper atoms are contained within an enclosure quantum of 48 iron atoms. The circular barrier iron has a radius of 71.3 Angstroms (71.3 x10^{-10}) meter. We see the electrons behave like waves.

http://www.astronoo.com/en/articles/quantum-tunnelling.html

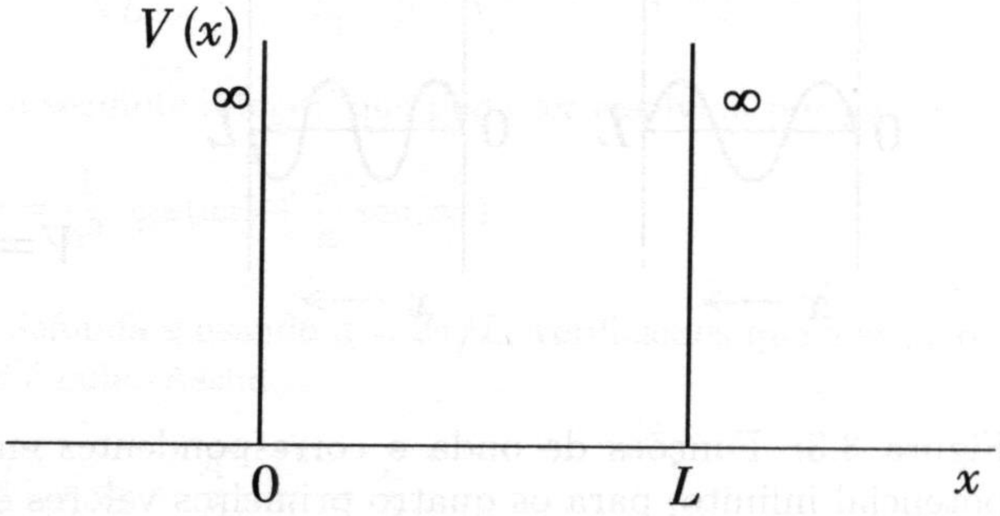
Elétron num Poço de Potencial Infinito (1D)

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < L \\ \infty & x \le 0 \quad ; \quad x \ge L \end{cases}$$

$$\psi(x) = A\,\mathrm{e}^{ikx} + B\,\mathrm{e}^{-ikx} \qquad (0 < x < L)$$

Euler: $\boxed{e^{ikx} = \cos(kx) + i.sen(kx)}$

$$E = (\hbar k)^2/2m$$



$$x \le 0 \text{ e } x \ge L,\ \psi = 0$$

$$\psi(x=0) = \psi(x=L) = 0$$

$$B = -A$$

Autofunções

$$\psi_n(x) = A_n \operatorname{sen} k_n x$$

$$\psi(L) = 0 \quad \Rightarrow \quad k_n = n\frac{\pi}{L} \; (n = 1, 2, 3, 4, \ldots)$$

n – número quântico

$$E = (\hbar k)^2/2m$$

$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}\, n^2}$$

Autovalores

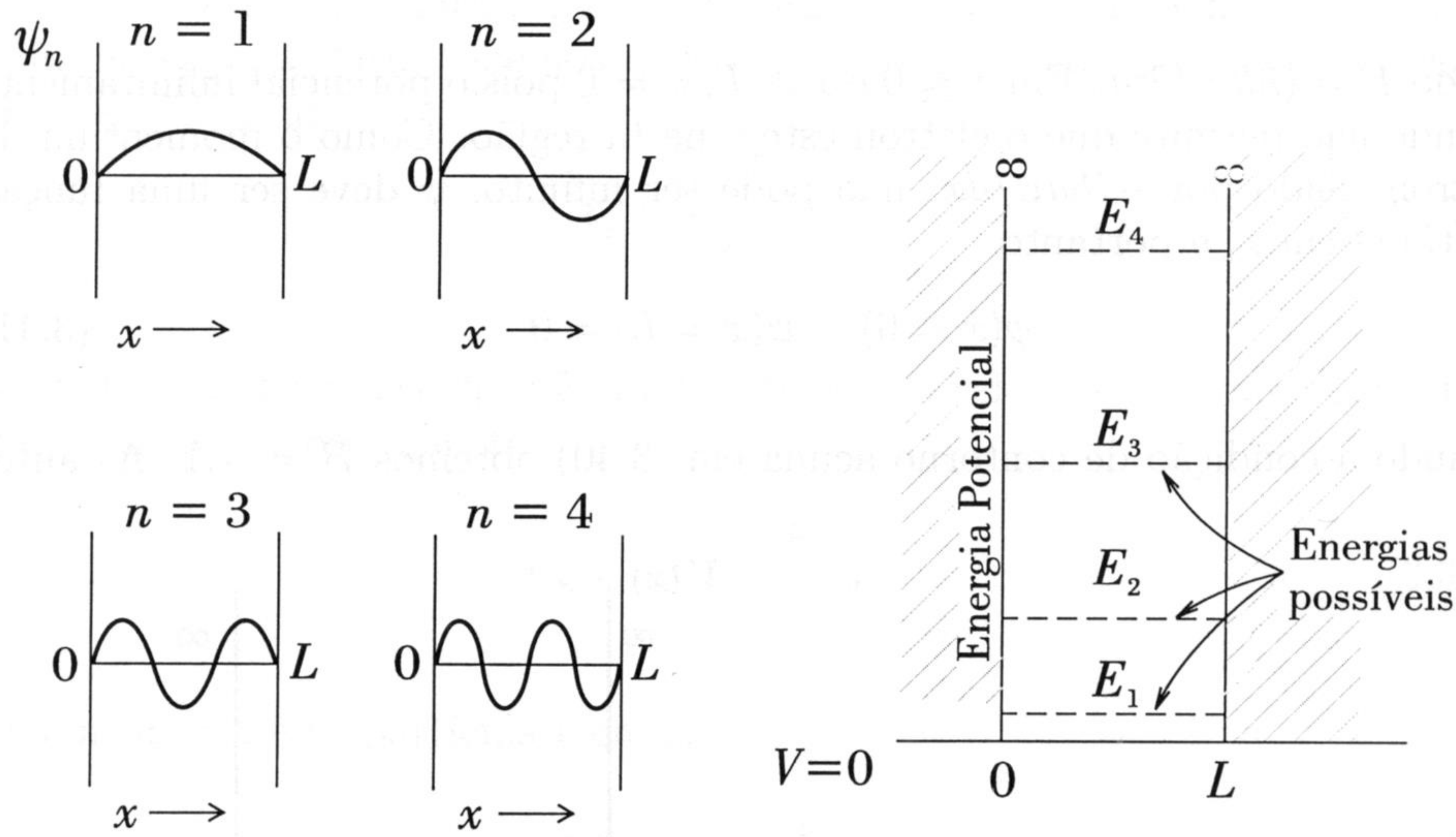


Figura 3.3: Funções de onda e correspondentes energias de uma partícula num poço de potencial infinito, para os quatro primeiros valores do número quântico n.

Exemplo 3.1: Uma partícula está no estado fundamental num poço de potencial infinito de largura L. Calcule: a) Os valores esperados da posição x e do momentum p_x; b) Os desvios médios quadráticos de x e de p_x.

a) A função de onda da partícula no estado fundamental é dada por (3.42) e (3.43) com $n = 1$, $\psi = A \operatorname{sen}(\pi x/L)$. Para normalizar a função de onda usamos a condição (3.1),

$$\int_0^L A^2 \operatorname{sen}^2\left(\frac{\pi}{L}x\right) dx = A^2 \int_0^L \operatorname{sen}^2\left(\frac{\pi}{L}x\right)\, dx = A^2 \frac{L}{\pi} \int_0^\pi \operatorname{sen}^2\left(\frac{\pi}{L}x\right)\, d\left(\frac{\pi x}{L}\right) = 1\,.$$

Como $\operatorname{sen}^2\alpha = (1 - \cos\, 2\alpha)/2$, o integrando pode ser dividido em duas parcelas. Fazendo $\alpha \equiv (\pi x/L)$, é fácil ver que a integral da primeira parcela é $\pi/2$ e a da segunda é nula. Então,

$$A^2 \frac{L}{\pi}\, \frac{\pi}{2} = 1\,, \text{logo } A = \sqrt{\frac{2}{L}}\,.$$

O valor esperado de x é

$$\overline{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x\, \psi\, dx = \int_0^L A^2 x \,\mathrm{sen}^2\left(\frac{\pi}{L}x\right) dx = \int_0^L \frac{A^2}{2} x \left(1 - \cos\frac{2\pi}{L}x\right)\, dx$$

Para calcular esta expressão usamos a seguinte integral que pode ser resolvida por partes,

$$\int x\, \cos\, ax\, dx = \frac{1}{a^2}\, \cos(ax) + \frac{x}{a}\, \mathrm{sen}(ax)\ .$$

Aplicando este resultado na integral definida e usando $a = 2\pi/L$, verificamos que a segunda parcela da integral na expressão de $\overline{x}$ é nula. Assim,

$$\overline{x} = \frac{A^2}{2} \int_0^L x\, dx = \frac{A^2}{2}\, \frac{L^2}{2} = \frac{L}{2}$$

Este resultado era, de certa forma, esperado, pois uma partícula que se movimenta livremente entre $x = 0$ e $x = L$ tem uma posição média em $x = L/2$.
O valor esperado do momentum é,

$$\begin{aligned} \overline{p}_x \;&=\; \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(-i\hbar)\frac{\partial\psi}{\partial x} dx = -i\hbar A^2 \int_0^L \mathrm{sen}\left(\frac{\pi}{L}x\right)\, \frac{\pi}{L}\, \cos\left(\frac{\pi}{L}x\right) dx \\ &=\; -i\hbar\frac{A^2}{2}\, \frac{\pi}{L} \int_0^L \mathrm{sen}\left(\frac{2\pi}{L}x\right) dx = 0 \end{aligned}$$

Este resultado também é natural, pois uma partícula que vai e volta dentro de uma caixa, com energia constante, tem velocidade média nula.

b) O desvio médio quadrático de x é definido por

$$\overline{\Delta x^2} = < x^2 - \overline{x}^2 >$$

Então

$$\begin{aligned}
\overline{\Delta x^2} &= A^2 \int_0^L \left(x^2 - \frac{L^2}{4} \right) \operatorname{sen}^2 \left(\frac{\pi}{L} x \right) dx \\
&= \frac{A^2}{2} \int_0^L \left(x^2 - \frac{L^2}{4} \right) \left(1 - \cos \frac{2\pi}{L} x \right) dx
\end{aligned}$$

Para resolver esta expressão, usamos o resultado,

$$\int x^2 \cos(ax)\, dx = \frac{2x \cos(ax)}{a^2} + \frac{a^2 x^2 - 2}{a^3} \operatorname{sen}(ax) \,.$$

Após algumas contas simples obtemos, finalmente,

$$\overline{\Delta x^2} = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^2 \left(\frac{\pi^2 - 6}{3} \right) = 0,033\ L^2$$

O desvio médio quadrático do momentum pode ser calculado de maneira semelhante. O resultado é,

$$\overline{\Delta p_x^2} = \left(\frac{\hbar\pi}{L}\right)^2$$

É interessante notar que as incertezas na determinação da posição e do momentum podem ser consideradas como as raízes quadradas dos desvios médios quadráticos. Assim,

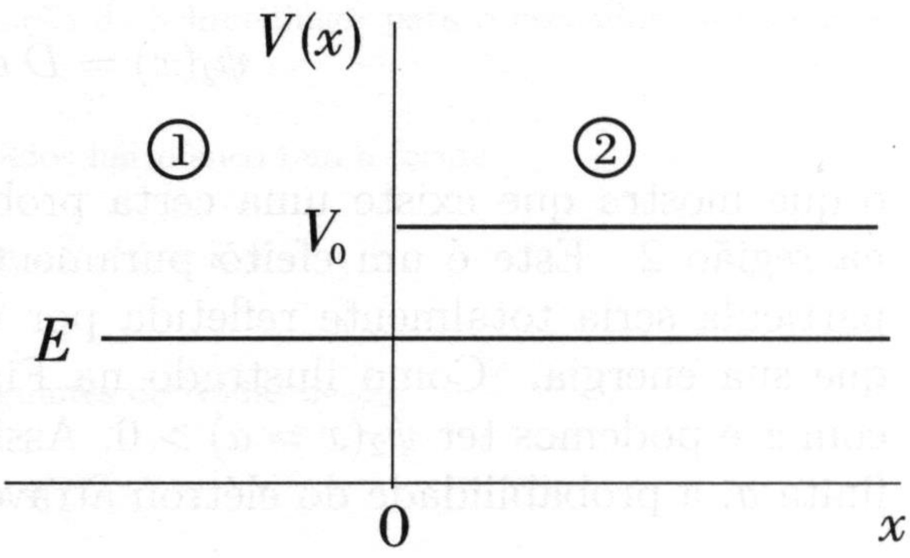
$$\begin{aligned}\Delta x &= \left(\overline{\Delta x^2}\right)^{1/2} = \sqrt{0,033}L = 0,18\ L\\ \Delta p_x &= \left(\overline{\Delta p_x^2}\right)^{1/2} = \hbar\ \frac{\pi}{L}\ .\end{aligned}$$

O produto dessas duas grandezas dá,

$$\Delta x\,\Delta p_x = 0,18\ \pi\ \hbar = 0,57\ \hbar\ .$$

Este resultado é consistente com o princípio da incerteza, que estabelece como limite mínimo para o produto das incertezas o valor de $\hbar/2$.

Barreira de Potencial – Efeito Túnel



Região-1

$$\psi_1(x) = A\,\mathrm{e}^{ikx} + B\,\mathrm{e}^{-ikx}$$

$$k = (2mE)^{1/2}/\hbar$$

Região-2

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\,\psi$$

$$(V_0 - E) > 0 \;\Rightarrow\; \psi_2(x) = C\,\mathrm{e}^{\gamma x} + D\,\mathrm{e}^{-\gamma x}$$

γ Real (Não-propaga)

$$\gamma = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$$

$E > V_0 \Rightarrow$ γ Imaginário (Propaga)

$$C = 0$$

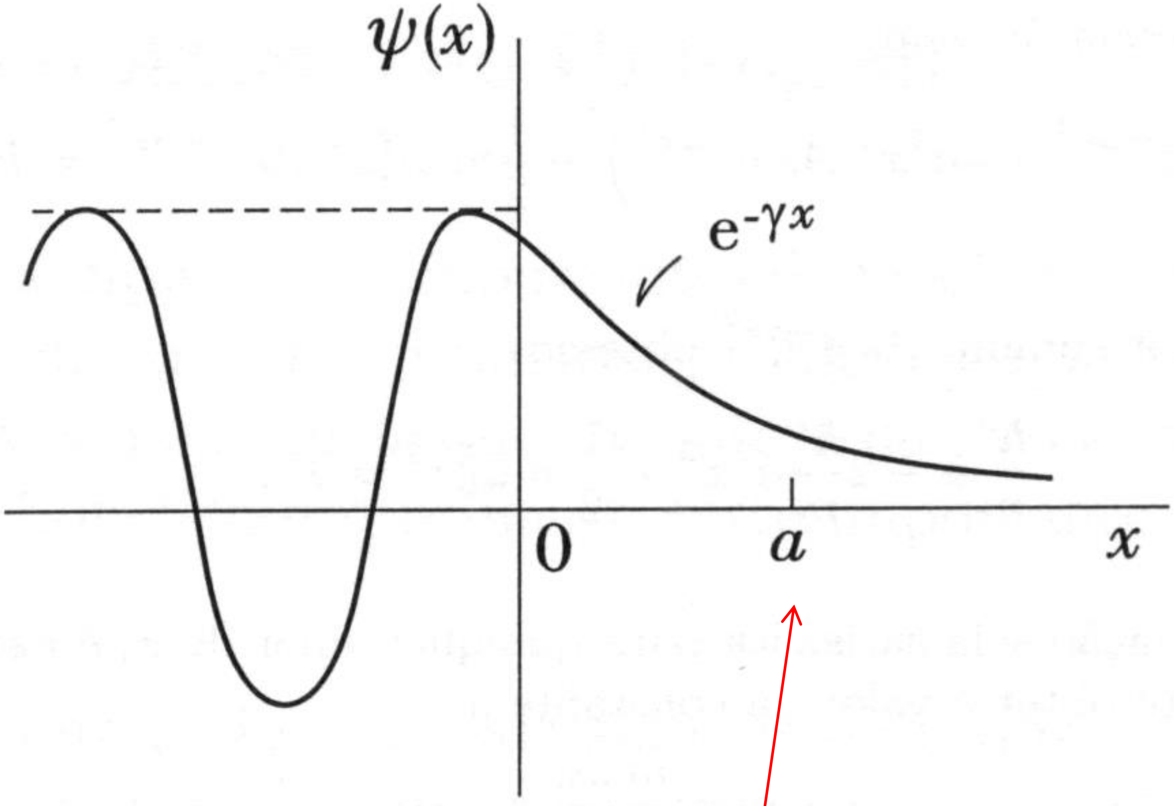
$$\psi_1(0) = \psi_2(0)$$

$$A + B = D$$

$$\left.\frac{d\psi_1}{dx}\right|_0 = \left.\frac{d\psi_2}{dx}\right|_0$$

$$ik(A - B) = -\gamma D$$

$$D = \frac{2k}{k + i\gamma} A \qquad B = \frac{(k - i\gamma)}{k + i\gamma} A$$



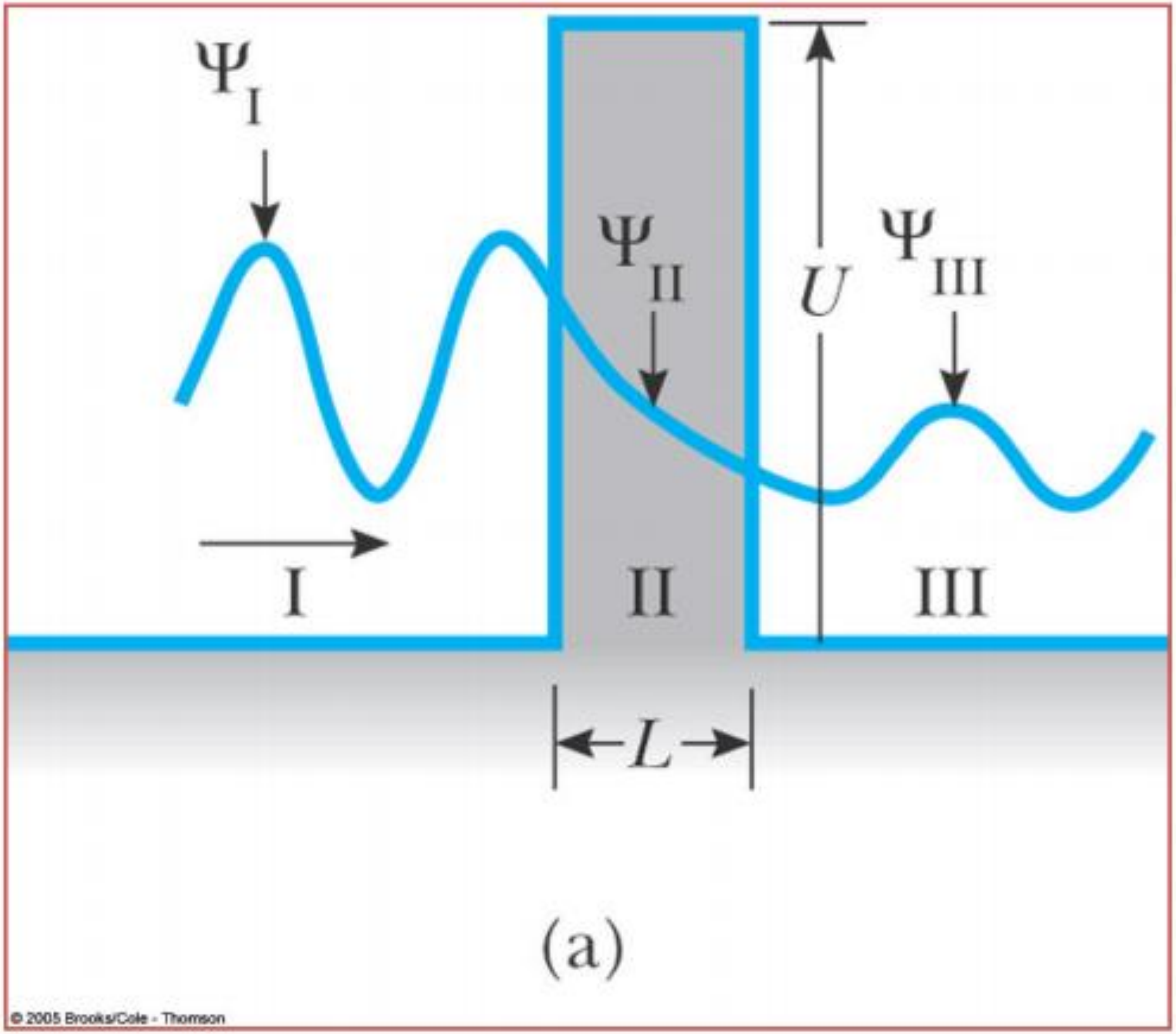
Região-2 $\psi_2(x) = D\, \mathrm{e}^{-\gamma x}$

Evanescente!

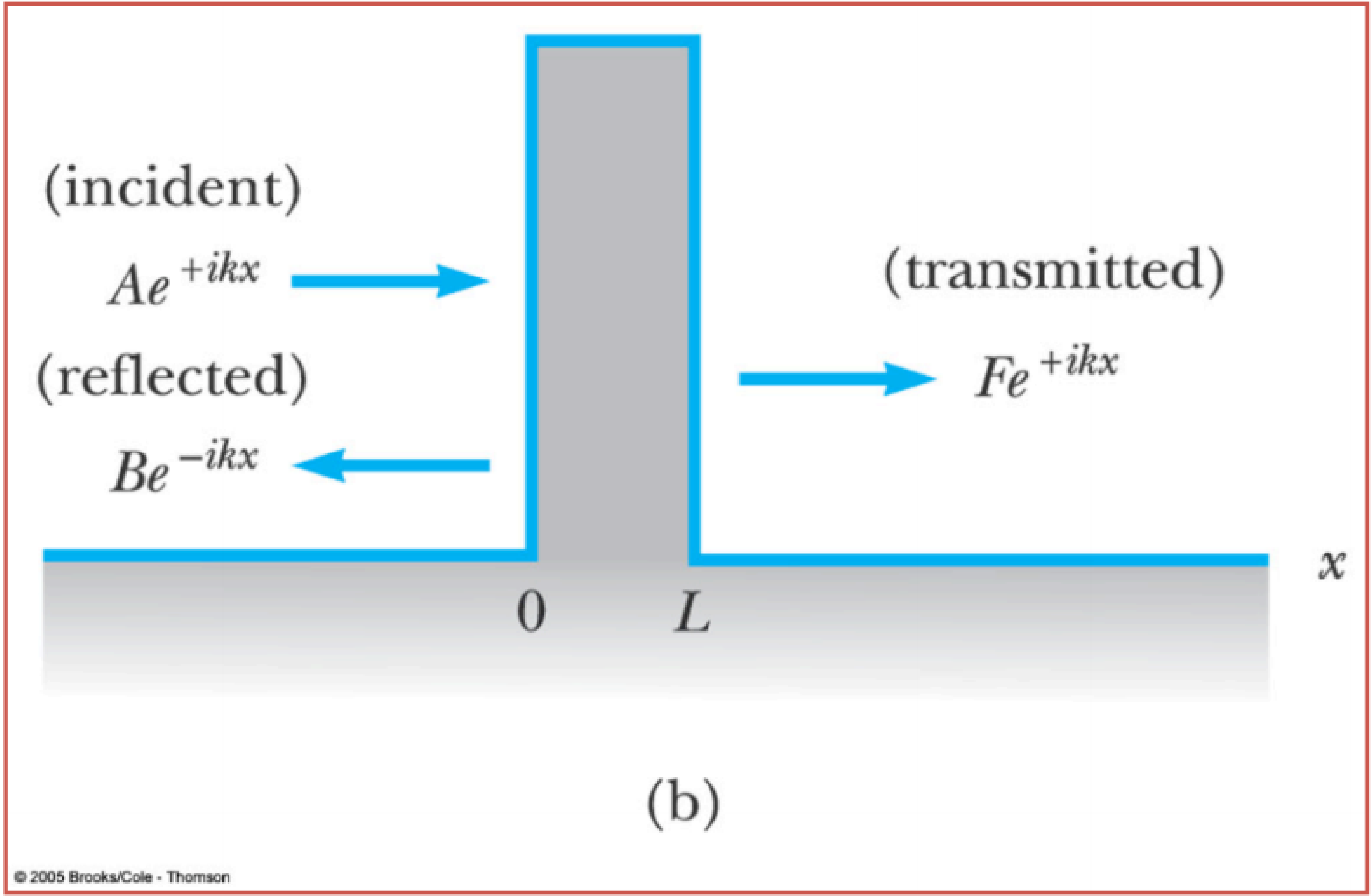
$$\boxed{|\psi_2(a)|^2 = \mathrm{e}^{-2\gamma a}}$$

Probabilidade de Tunelamento Aproximada

Barreira de Potencial Retangular - Efeito Túnel



https://bohr.wlu.ca/pc242/Phys242Lec14.pdf


(incident)
Ae^{+ikx}
(reflected)
Be^{-ikx}
(transmitted)
Fe^{+ikx}
0
L
x
(b)
© 2005 Brooks/Cole - Thomson

Equação de Schroedinger Independente do Tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) = (E-U)\phi(x)$$

Região-I: U = 0

$$\phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$R = \frac{\left|\phi_{reflected}\right|^2}{\left|\phi_{incident}\right|^2} = \frac{|B|^2}{|A|^2}$$

Região-II: U > E

$$\phi(x) = Ce^{-\alpha x} + De^{\alpha x}$$

$$\alpha = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}$$

Região-III: U = 0

$$\phi(x) = Fe^{ikx}, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$T = \frac{\left|\phi_{transmitted}\right|^2}{\left|\phi_{incident}\right|^2} = \frac{|F|^2}{|A|^2}$$

$$T + R = 1$$

Critérios de Continuidade nas Fronteiras

ϕ Região-I = ϕ Região-II: *x = 0*

$$\boxed{Ae^{ikx} + Be^{-ikx} = Ce^{-\alpha x} + De^{\alpha x}} \Rightarrow \boxed{A + B = C + D}$$

ϕ Região-II = ϕ Região-III: *x = L*

$$\boxed{Ce^{-\alpha L} + De^{\alpha L} = Fe^{ikL}}$$

dϕ/dx Região-I = dϕ/dx Região-II: *x = 0*

$$\boxed{ikAe^{ikx} - ikBe^{-ikx} = -\alpha Ce^{-\alpha x} + \alpha De^{\alpha x}}$$

$$\Rightarrow \boxed{ikA - ikB = -\alpha C + \alpha D}$$

dϕ/dx Região-II = dϕ/dx Região-III: *x = L*

$$\boxed{-\alpha Ce^{-\alpha L} + \alpha De^{\alpha L} = ikFe^{ikL}}$$

Solução de Sistema de Quatro Equações

$$\boxed{A + B = C + D}$$

$$\boxed{Ce^{-\alpha L} + De^{\alpha L} = Fe^{ikL}}$$

$$\boxed{ikA - ikB = -\alpha C + \alpha D}$$

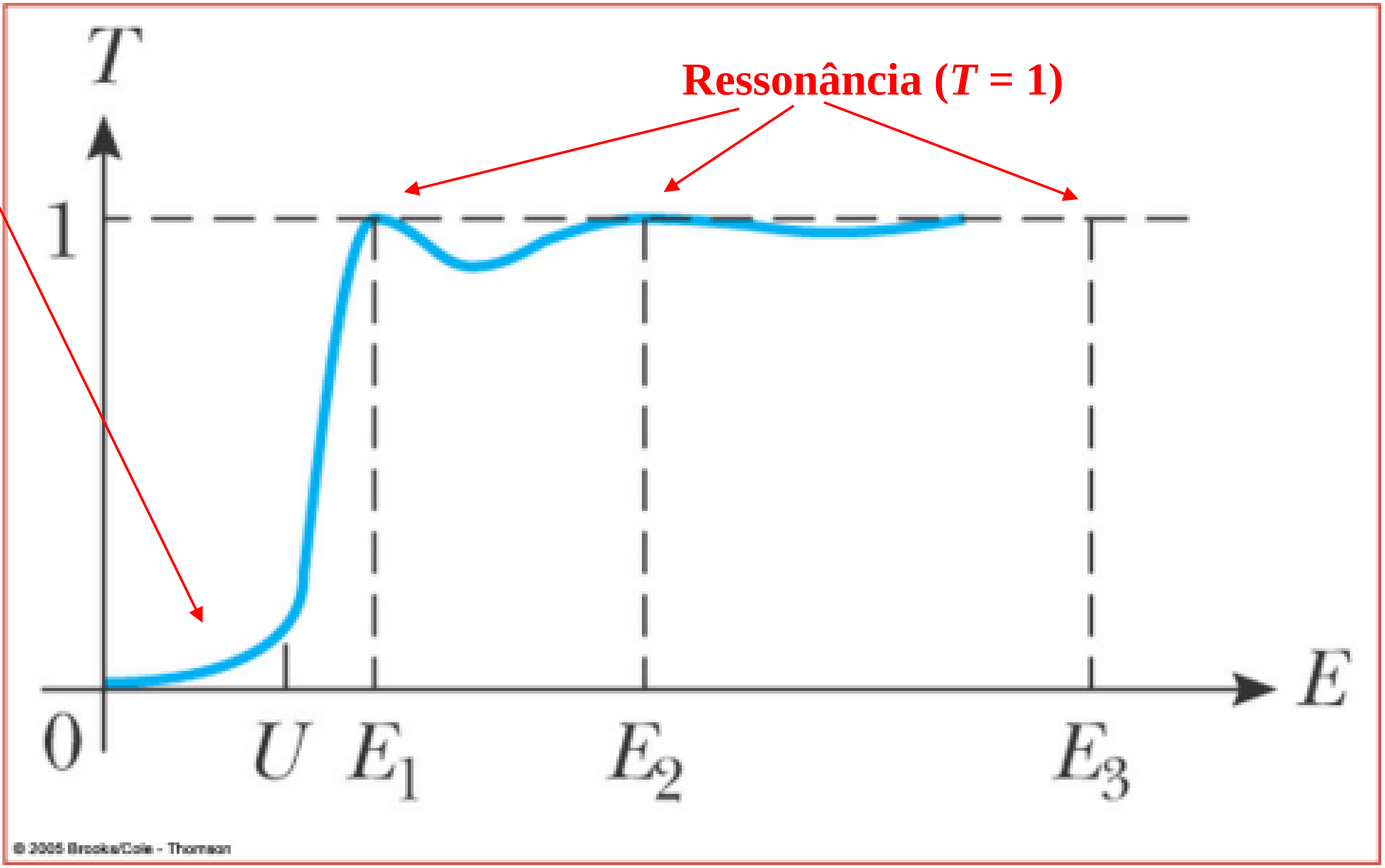
$$\boxed{-\alpha Ce^{-\alpha L} + \alpha De^{\alpha L} = ikFe^{ikL}}$$

Solução: Coeficiente de Transmissão

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\left[\frac{U^2}{E(U-E)}\right]\left[\frac{e^{\alpha L} + e^{-\alpha L}}{2}\right]^2}$$

Baixas Energias:
(L >>)

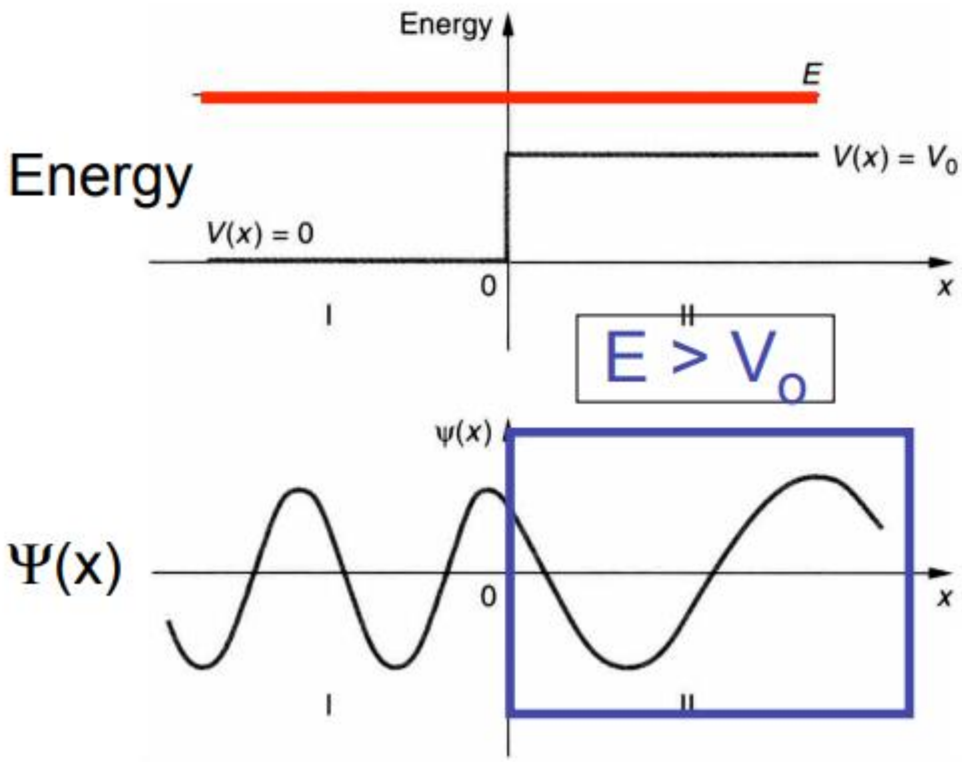
$$T \approx e^{-\alpha L}$$



Barreira de Potencial em Degrau - Efeito Túnel

Case 1

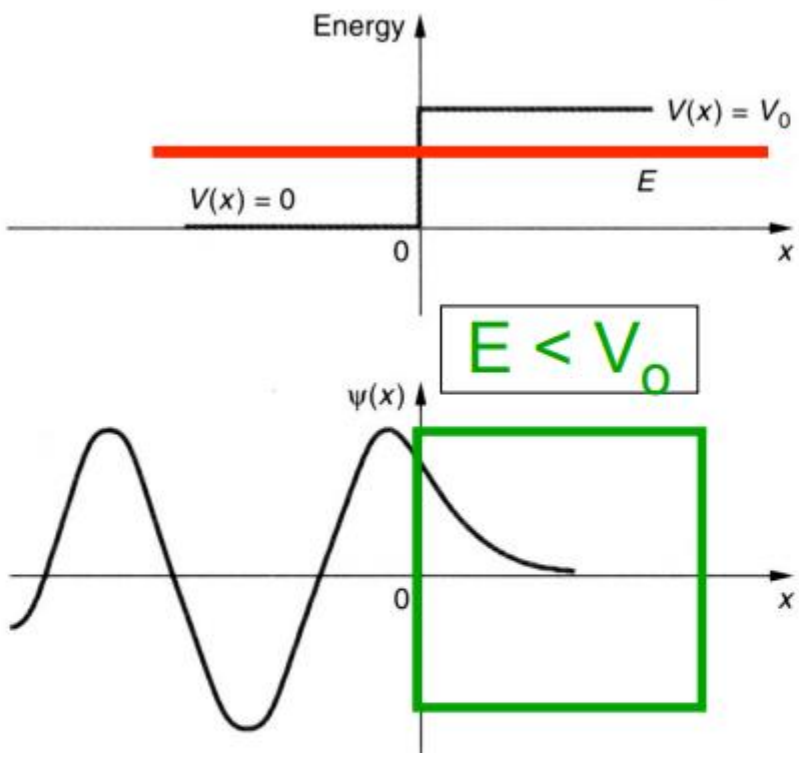
$\Psi(x)$ is oscillatory for $E > V_o$



Propagante

Case 2

$\Psi(x)$ is decaying for $E < V_o$



Evanescente

Barreira de Potencial em Degrau - Efeito Túnel

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) = (E-U)\phi(x)$$

Região-I: U = 0

$$\phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Região-II: U = V_0

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) = (E-V_0)\phi(x)$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$$

<u>Solução</u>: Transmissão e Reflexão em Degrau

$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2$$

$$T = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

R(reflection) + T(transmission) = 1

R ≠ 0 para *step-up* ou *step-down*

The step barrier:

A free particle of mass m, wave number k_1 , and energy $E = 2V_o$ is traveling to the right. At x = 0, the potential jumps from zero to $-V_o$ and remains at this value for positive x. Find the wavenumber k_2 in the region $x > 0$ in terms of k_1 and V_o. Find the reflection and transmission coefficients R and T.

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m(2V_o)}}{\hbar} = \frac{\sqrt{4mV_o}}{\hbar} \quad and$$

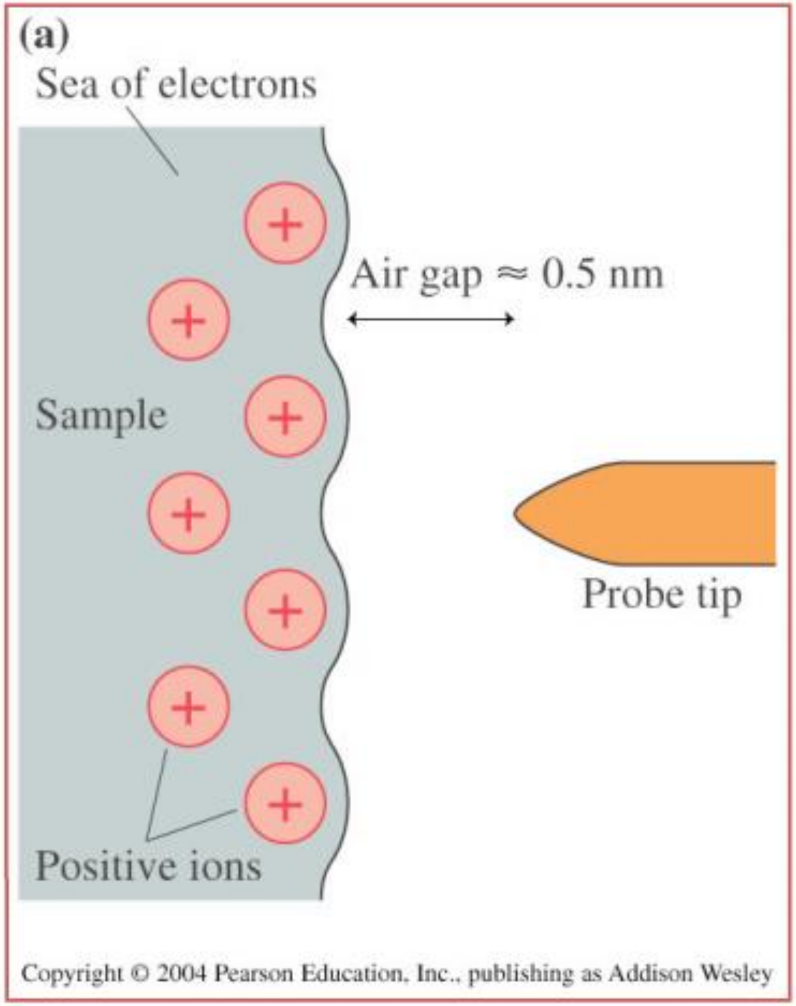
$$\boxed{k_2} = \frac{\sqrt{2m|V-E|}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m|-V_o-2V_o|}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m(3V_o)}}{\hbar} = \boxed{\frac{\sqrt{6mV_o}}{\hbar} \quad or \quad \sqrt{\frac{3}{2}}\,k_1}$$

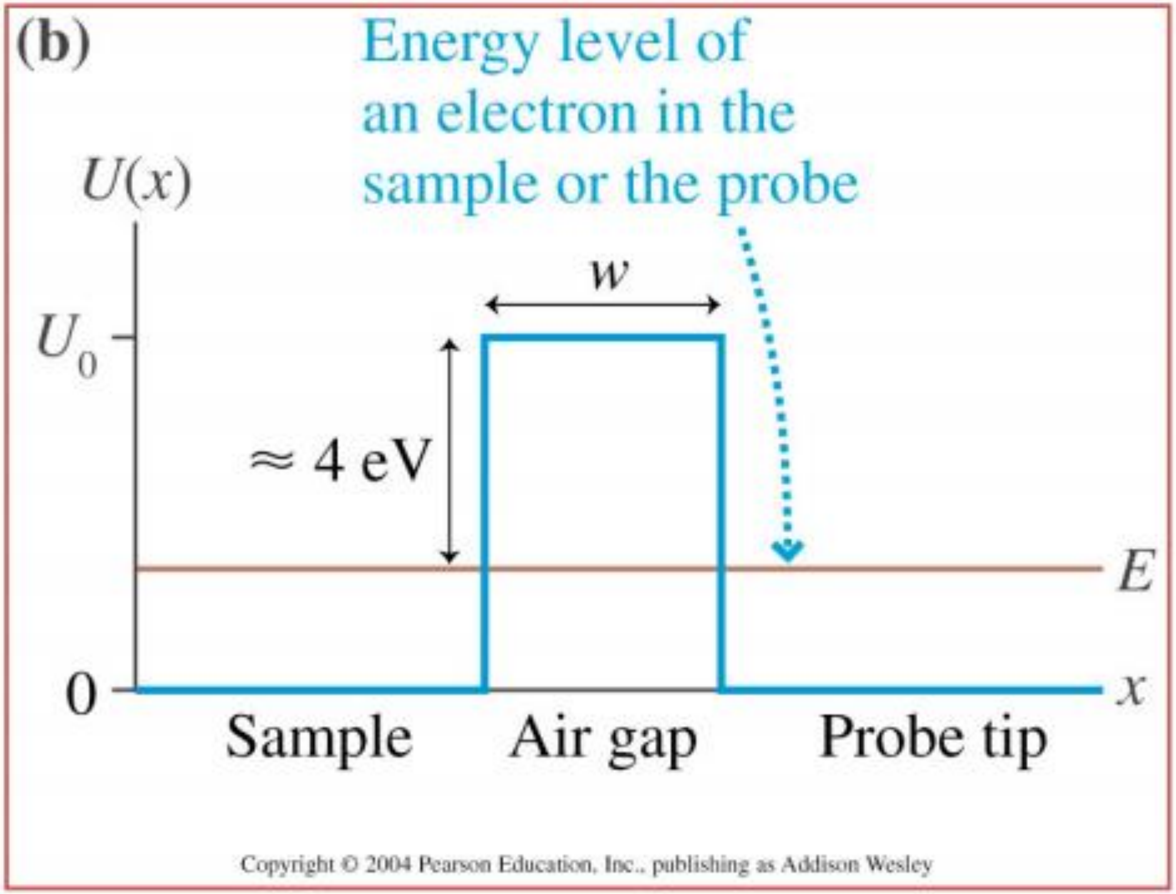
$$\boxed{R} = \left(\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}\right)^2 = \left(\frac{k_1-\sqrt{\frac{3}{2}}k_1}{k_1+\sqrt{\frac{3}{2}}k_1}\right)^2 = \left(\frac{-0.225}{2.225}\right)^2 = \boxed{0.0102} \quad \text{(1\% reflected)}$$

$$T = 1 - R = 1 - 0.0102 = 0.99 \quad \text{(99\% transmitted)}$$

https://bohr.wlu.ca/pc242/Phys242Lec14.pdf

Scanning Tunneling Microscope (STM)





É preciso considerar também densidades de estados, efeitos de carregamento, ...

https://bohr.wlu.ca/pc242/Phys242Lec14.pdf

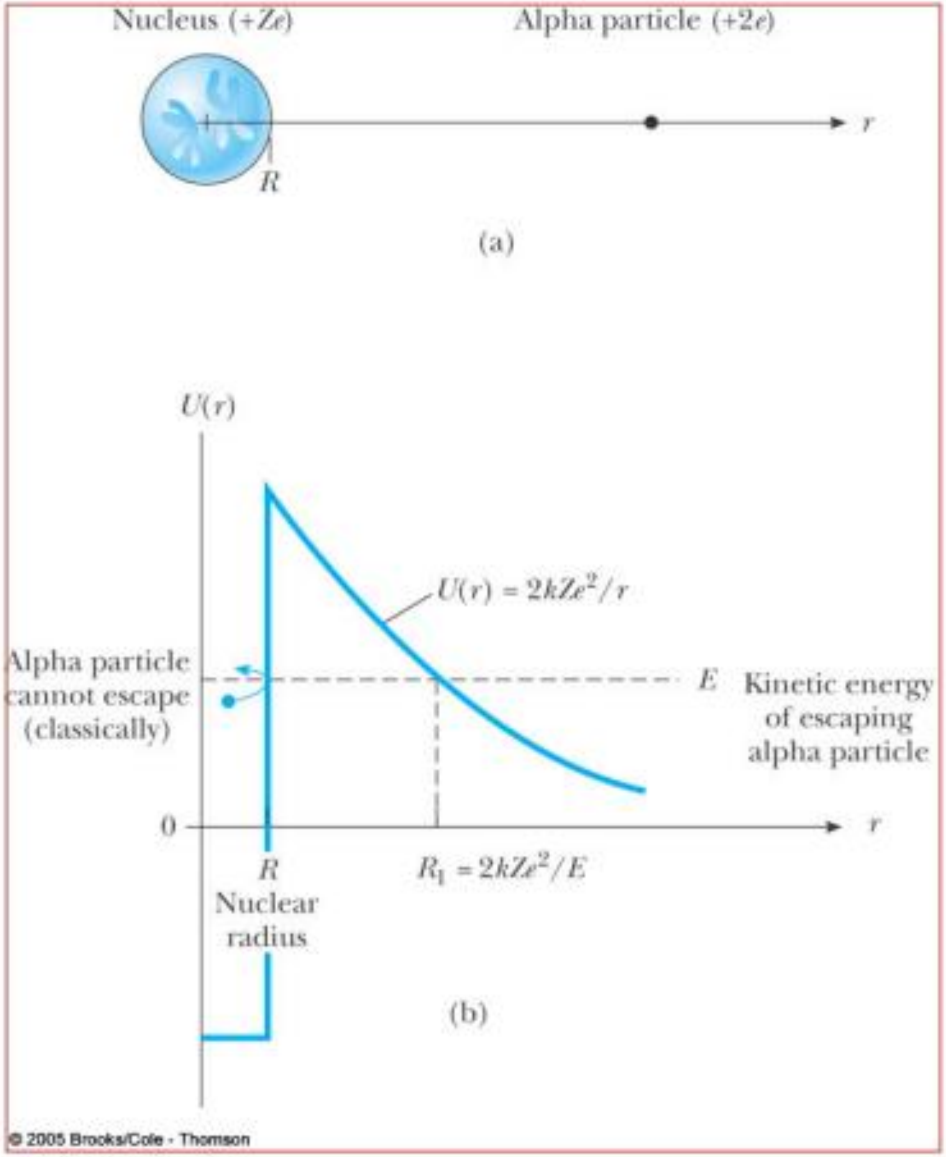
Emissão de Partículas Alfa de Núcleos Atômicos

$$T = e^{8\sqrt{\frac{ZR}{r_0}} - 4\pi Z\sqrt{\frac{E_0}{E}}},$$

$$r_0 \approx 7.25\, fm,\ E_0 = 0.0993 MeV$$

$$\lambda = fT \approx 10^{21} e^{8\sqrt{\frac{ZR}{r_0}} - 4\pi Z\sqrt{\frac{E_0}{E}}},$$

Meia-vida: $$t_{1/2} = \frac{0.693}{\lambda}$$



https://bohr.wlu.ca/pc242/Phys242Lec14.pdf

Exemplo 3.2: Outra aplicação importante da mecânica quântica é a de uma partícula de massa m submetida a uma interação com um potencial de oscilador harmônico simples do tipo,

$$V(x) = \frac{1}{2}\,kx^2 = \frac{1}{2}\,m\,\omega_0^2\,x^2\ ,$$

onde $\omega_0 = \sqrt{k/m}$ é a freqüência natural do oscilador. Verifique que as funções $\psi_0(x) = A_0\,e^{-ax^2}$ e $\psi_1(x) = A_1 x\,e^{-ax^2}$ são autofunções da equação de Schroedinger para o oscilador harmônico e determine suas energias.

A equação de Schroedinger para o oscilador harmônico tem a forma,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}\,m\,\omega_0^2\,x^2\psi = E\,\psi\ .$$

Para o estado fundamental temos as seguintes derivadas de ψ_0,

$$\begin{aligned}\frac{d\psi_0}{dx} &= -2ax\,A_0\,e^{-ax^2}\ ,\\ \frac{d^2\psi_0}{dx^2} &= -2a\,A_0\,e^{-ax^2} + 4a^2\,x^2\,A_0\,e^{-ax^2}\ .\end{aligned}$$

Substituindo na equação vem,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-2a\,A_0\,\mathrm{e}^{-ax^2}+4a^2x^2\,A_0\,\mathrm{e}^{-ax^2}\right)+\frac{1}{2}m\,\omega_0^2x^2\,A_0\,\mathrm{e}^{-ax^2}=E\,A_0\,\mathrm{e}^{-ax^2}\ .$$

Cancelando o fator comum $A_0\,\mathrm{e}^{-ax^2}$ obtemos,

$$\frac{\hbar^2}{m}a-2\frac{\hbar^2}{m}a^2x^2+\frac{1}{2}m\,\omega_0^2x^2=E\ .$$

Para que esta equação seja satisfeita para qualquer valor de x, é necessário que o termo em x^2 seja nulo. Isto permite obter o valor da constante a,

$$a=\frac{m\,\omega_0}{2\hbar}\ .$$

Substituindo esta expressão na equação anterior vem,

$$E=\frac{\hbar^2 a}{m}=\frac{1}{2}\hbar\,\omega_0\ .$$

Esta é a energia do estado fundamental. O procedimento para obter a energia do estado ψ_1 é semelhante. Calculamos a derivada $d^2\psi_1/dx^2$, substituímos na equação de Schroedinger e cancelamos o fator comum, obtendo,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-2ax-4ax+4a^2x^3\right)+\frac{1}{2}m\,\omega_0^2x^3=xE\ .$$

Neste caso é preciso anular separadamente todos os termos com potências iguais de x. O termo em x^3 leva ao mesmo valor de a obtido para o estado fundamental, enquanto o termo em x dá,

$$E = 3\frac{\hbar^2 a}{m} = \frac{3}{2}\,\hbar\,\omega_0\,.$$

Esta é a energia do primeiro estado excitado, cuja função de onda é precisamente ψ_1. A solução geral da equação de Schroedinger para o oscilador harmônico, que está apresentada em detalhe nos livros de mecânica quântica, é dada por funções do tipo,

$$\psi_n(x) = \left(c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + \cdots c_n x^n\right)\,\mathrm{e}^{-ax^2}\,,$$

onde a função entre parênteses é conhecida como polinômio de Hermite. A demonstração de que esta expressão é autofunção da equação de Schroedinger para o oscilador harmônico é feita de maneira análoga ao que fizemos para $n = 0$ e $n = 1$, que correspondem aos dois estados de menor energia. A solução geral mostra que a energia do estado excitado de ordem n é dada por,

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\,\omega_0\,.$$

Este é um resultado importante que mostra que os níveis de energia dos estados do oscilador harmônico estão igualmente espaçados, com uma diferença entre dois níveis consecutivos de $\hbar\,\omega_0$.