BKC 0103-15 – Física Quântica – Informações complementares

Integrais para oscilador harmônico quântico

Em geral, em problemas que envolvem as funções de onda para o oscilador harmônico quântico temos integrais do tipo:

$$I(n) = \int_{-\infty}^{+\infty} x^n e^{-\alpha x^2} dx \,, \quad \text{com n = 0,1,2,3...}$$

Como apresentado em aula, a integral para o caso de n = 0 é dada por: $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$. Uma forma de ver este resultado é determinando o valor da integral $I^2(0)$ e fazendo uma mudança de coordenadas de cartesianas para polares.

Para os casos com n >1, um caminho natural para se resolver é por meio de sucessivas integrações por partes. Contudo, para as integrais de funções pares, ou seja: $I_{par}(n) = \int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n} e^{-\alpha x^2} dx$, com n = 0,1,2..., temos uma maneira mais simples de resolver. Consideremos, por exemplo, o caso para n = 2.

$$I_{par}(2) = \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 e^{-\alpha x^2} dx = + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d^2}{d\alpha^2} e^{-\alpha x^2} dx = + \frac{d^2}{d\alpha^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx$$

Veja que na solução acima, escrevemos $x^4 e^{-\alpha x^2}$ como $\frac{d^2}{d\alpha^2} e^{-\alpha x^2}$, lembrando o resultado apresentado anteriormente para o caso n=0, temos:

$$I_{par}(2) = \frac{d^2}{d\alpha^2}\left[\left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{1/2}\right] = +\frac{3}{4}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^5}}$$

Analisando a estrutura dessa resposta, podemos chegar a uma solução para integrais pares como:

$$I_{par}(n) = \int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n} e^{-\alpha x^2} dx = (-1)^n \sqrt{\pi} \frac{d^n}{d\alpha^n}\left[\alpha^{-\frac{1}{2}}\right], \quad \text{n=0,1,2,3...}$$

Para o caso de integrais impares, podemos escrever:

$$I_{impar}(n) = \int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n+1} e^{-\alpha x^2} dx \,, \quad \text{com n = 0,1,2,3...}$$

Observe que neste caso temos o produto de uma função impar (o polinômio) por uma função par (a gaussiana) integrada em todo o espaço (unidimensional) e, portanto, com integral (área sob a curva) nula. Dessa forma, podemos escrever que:

$$\boxed{\begin{aligned} &\boldsymbol{I_{impar}(n) = \int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n+1} e^{-\alpha x^2} dx = 0}\,, \\ &\boldsymbol{I_{par}(n) = \int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n} e^{-\alpha x^2} dx = (-1)^n \sqrt{\pi} \frac{d^n}{d\alpha^n}\left[\alpha^{-\frac{1}{2}}\right]}, \quad \textbf{com n=0,1,2,3,...} \end{aligned}}$$

Estas soluções são validas para os intervalos de integração como definidos acima, para o caso de diferentes intervalos de integração, devemos utilizar métodos mais elaborados, incluindo abordagens puramente numéricas.