

# O oscilador harmônico quântico

Prof. Luiz T. F. Eleno

Departamento de Engenharia de Materiais  
Escola de Engenharia de Lorena  
Universidade de São Paulo



2020

## 1 O oscilador harmônico clássico

- Potencial harmônico
- Probabilidade clássica

## 2 O oscilador harmônico quântico

- Método algébrico
- O comutador  $[\hat{x}, \hat{p}]$
- Propriedades importantes dos operadores  $\hat{a}_-$  e  $\hat{a}_+$
- Estado fundamental
- Estados excitados
- Método analítico
- Tunelamento
- Limite clássico

## 1 O oscilador harmônico clássico

- Potencial harmônico
- Probabilidade clássica

## 2 O oscilador harmônico quântico

- Método algébrico
- O comutador  $[\hat{x}, \hat{p}]$
- Propriedades importantes dos operadores  $\hat{a}_-$  e  $\hat{a}_+$
- Estado fundamental
- Estados excitados
- Método analítico
- Tunelamento
- Limite clássico

## Oscilador harmônico clássico

- A representação mais simples do movimento harmônico simples é uma mola:

$$F = -kx$$

- Veja que essa força vem de um potencial parabólico:

$$V(x) = - \int F dx = \frac{1}{2}kx^2$$

- a 2ª lei de Newton diz que

$$F = ma = m \frac{d^2x}{dt^2} = m\ddot{x}$$

- Então:

$$m\ddot{x} + kx = 0$$

- Cuja solução geral é

$$x(t) = A \sin \omega t + B \cos \omega t$$

- $\omega$  é a *frequência de oscilação*, dada por

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

- o *período de oscilação* da partícula é

$$\tau = \frac{2\pi}{\omega}$$

- Repare que o potencial pode ser reescrito em termos de  $\omega$ :

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

# Probabilidade clássica

- se a condição inicial é conhecida, sei a posição e a velocidade da partícula (e também seu momento) em qualquer instante
  - ▶ por exemplo,  $x(0) = x_0$  e  $\dot{x}(0) = 0 \Rightarrow x(t) = x_0 \cos \omega t$  (oscilador-harmonico.py)
- E se eu não conheço a condição inicial da partícula, mas apenas sua energia total?
  - ▶ nesse caso, posso determinar a **distribuição de probabilidades da posição**  $x$  da partícula
- A energia da partícula é

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

- ▶ o máximo valor de  $x$  acontece quando  $\dot{x} = 0$  (quando a energia é puramente potencial):

$$E = \frac{1}{2}m\omega^2 x_m^2 \Rightarrow x_m = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \quad \Rightarrow \quad \dot{x} = \pm \omega \sqrt{x_m^2 - x^2}$$

- Em  $[x, x + dx]$ , a partícula passa um tempo  $dt$  dado por

$$dt = \left| \frac{dx}{\dot{x}} \right| = \frac{dx}{\omega \sqrt{x_m^2 - x^2}}$$

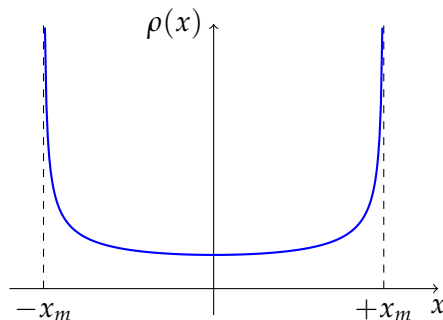
- Para ir de  $-x_m$  a  $x_m$ , a partícula gasta meio período de oscilação ( $\tau_{1/2} = \pi/\omega$ )

- $\Rightarrow$  a prob. de encontrar a partícula em  $[x, x + dx]$  é

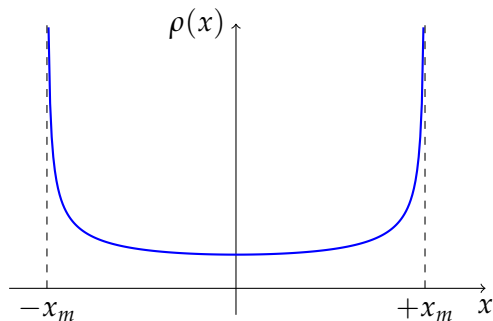
$$\rho(x) dx = \frac{dt}{\tau_{1/2}}$$

$$\Rightarrow \boxed{\rho(x) = \frac{1}{\pi \sqrt{x_m^2 - x^2}}}$$

- ▶  $\rho(x) = 0$  se  $|x| > x_m$



# Normalização



$$\rho(x) = \frac{1}{\pi \sqrt{x_m^2 - x^2}}$$

## Algumas observações (exercício):

13. (a) Verifique que a *distribuição de probabilidades*  $\rho(x)$  está normalizada, ou seja, verifique que

$$\int_{-x_m}^{+x_m} \rho(x) dx = 1$$

- (b) Por que a probabilidade é menor perto de  $x = 0$ ?  
(c) Você vê algum problema em  $\rho(x) \rightarrow \infty$  quando  $x \rightarrow \pm x_m$ ?

- Veremos agora o equivalente quântico do oscilador harmônico

→

# Plano de aula

## 1 O oscilador harmônico clássico

- Potencial harmônico
- Probabilidade clássica

## 2 O oscilador harmônico quântico

- Método algébrico
- O comutador  $[\hat{x}, \hat{p}]$
- Propriedades importantes dos operadores  $\hat{a}_-$  e  $\hat{a}_+$
- Estado fundamental
- Estados excitados
- Método analítico
- Tunelamento
- Limite clássico

# Oscilador harmônico quântico

- Lembrando que a equação de Schrödinger independente do tempo é

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$$

com

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$$

e

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

- O *potencial harmônico* é parabólico:

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

## Solução exata:

- Há dois métodos:

### Método analítico

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi(x) &= E\psi(x)\end{aligned}$$

- Estratégia: *série de potências*

### Método algébrico

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2m} [\hat{p}^2 + (m\omega x)^2] \\ \frac{1}{2m} [\hat{p}^2 + (m\omega x)^2] \psi(x) &= E\psi(x)\end{aligned}$$

- Estratégia: *fatoração do hamiltoniano*



# Oscilador harmônico quântico

- Lembrando que a equação de Schrödinger independente do tempo é

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$$

com

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$$

e

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

- O *potencial harmônico* é parabólico:

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

## Solução exata:

- Há dois métodos:

### Método analítico

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi(x) &= E\psi(x)\end{aligned}$$

- Estratégia: *série de potências*

### Método algébrico

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2m} [\hat{p}^2 + (m\omega x)^2] \\ \frac{1}{2m} [\hat{p}^2 + (m\omega x)^2] \psi(x) &= E\psi(x)\end{aligned}$$

- Estratégia: *fatoração do hamiltoniano*

# Método algébrico

## operadores escada

- O Hamiltoniano é

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} [\hat{p}^2 + (m\omega x)^2]$$

- ▶ se  $p$  fosse um escalar (ou seja, um número), poderíamos *fatorar o hamiltoniano*:

$$H = \frac{1}{2m} (-ip + m\omega x)(+ip + m\omega x)$$

- mas  $\hat{p}$  é um operador, portanto é preciso tomar cuidado ao fatorar!
- Vamos introduzir os **operadores escada**:

- ▶  $\hat{a}_- \rightarrow$  **operador de abaixamento**:

$$\hat{a}_- = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (+i\hat{p} + m\omega\hat{x}) \quad \text{ou} \quad \hat{a}_- = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \left( \hbar \frac{\partial}{\partial x} + m\omega x \right)$$

- ▶  $\hat{a}_+ \rightarrow$  **operador de levantamento**:

$$\hat{a}_+ = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (-i\hat{p} + m\omega\hat{x}) \quad \text{ou} \quad \hat{a}_+ = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \left( -\hbar \frac{\partial}{\partial x} + m\omega x \right)$$

- \* (a razão dos nomes ficará mais clara em breve)
- \* lembrando que

$$\hat{x} = x \quad \text{e} \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

## Fatoração do hamiltoniano

- o que acontece se faço o *produto dos operadores*  $\hat{a}_-$  e  $\hat{a}_+$ ?

$$\begin{aligned}\hat{a}_- \hat{a}_+ &= \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (+i\hat{p} + m\omega\hat{x}) \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (-i\hat{p} + m\omega\hat{x}) \\ &= \frac{1}{2m\hbar\omega} [\hat{p}^2 + (m\omega\hat{x})^2 - im\omega\hat{x}\hat{p} + im\omega\hat{p}\hat{x}] \\ &= \frac{1}{\hbar\omega} \underbrace{\left( \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \right)}_{\hat{H}} - \frac{i}{2\hbar} (\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})\end{aligned}$$

- O **comutador** de dois operadores  $\hat{A}$  e  $\hat{B}$  é o **parêntese de Poisson** entre eles:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

- dizemos que dois operadores **comutam** se o comutador entre eles é nulo:

$$\hat{A} \text{ e } \hat{B} \text{ comutam} \quad \Leftrightarrow \quad [\hat{A}, \hat{B}] = 0$$

- Então:

$$\hat{a}_- \hat{a}_+ = \frac{1}{\hbar\omega} \hat{H} - \frac{i}{2\hbar} [\hat{x}, \hat{p}]$$

- Vamos calcular  $[\hat{x}, \hat{p}]$

## O comutador $[\hat{x}, \hat{p}]$

- Sempre calcule um comutador aplicando-o a uma função qualquer  $f(x)$ :

$$[\hat{x}, \hat{p}]f(x) = \hat{x}\hat{p}f(x) - \hat{p}\hat{x}f(x)$$

- agora use as definições  $\hat{x} = x$  e  $\hat{p} = -i\hbar d/dx$ :

$$[\hat{x}, \hat{p}]f(x) = x \left( -i\hbar \frac{df}{dx} \right) - \left( -i\hbar \frac{d}{dx} \right) [xf(x)]$$

$$[\hat{x}, \hat{p}]f(x) = -i\hbar x \frac{df}{dx} + i\hbar \frac{d}{dx} [xf(x)]$$

$$[\hat{x}, \hat{p}]f(x) = -i\hbar x \frac{df}{dx} + i\hbar \left[ f(x) + x \frac{df}{dx} \right]$$

$$[\hat{x}, \hat{p}]f(x) = \cancel{-i\hbar x \frac{df}{dx}} + i\hbar f(x) + \cancel{i\hbar x \frac{df}{dx}}$$

$$[\hat{x}, \hat{p}]f(x) = i\hbar f(x)$$

- Com isso, concluímos que

$$\boxed{[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar}$$

- $\Rightarrow$  Uma das Propriedades Fundamentais da Mecânica Quântica:

- ▶ **os operadores posição e momento não comutam**

## Vontando à fatoração do hamiltoniano

- Havíamos chegado a

$$\hat{a}_- \hat{a}_+ = \frac{1}{\hbar\omega} \hat{H} - \frac{i}{2\hbar} [\hat{x}, \hat{p}]$$

- e vimos que

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

- $\Rightarrow$  descobrimos então que

$$\hat{a}_- \hat{a}_+ = \frac{1}{\hbar\omega} \hat{H} + \frac{1}{2}$$

- Portanto:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{a}_- \hat{a}_+ - \frac{1}{2} \right)$$

- $\Rightarrow$  o hamiltoniano não fatora perfeitamente, pois sobra o termo  $-\hbar\omega/2$ .

### Exercícios

14. (a) Calcule agora  $\hat{a}_+ \hat{a}_-$  e conclua que

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{a}_+ \hat{a}_- + \frac{1}{2} \right)$$

- (b) Mostre que

$$[\hat{a}_-, \hat{a}_+] = 1$$

# Propriedades importantes dos operadores $\hat{a}_-$ e $\hat{a}_+$

## Razão dos nomes *abaixamento* e *levantamento*

- **Propriedade 1:** Se  $\psi$  satisfaz a equação de Schrödinger com energia  $E$  (ou seja, se  $\hat{H}\psi = E\psi$ ), então  $\hat{a}_+\psi$  satisfaz a equação de Schrödinger com energia  $E + \hbar\omega$
- **Propriedade 2:** Se  $\psi$  satisfaz a equação de Schrödinger com energia  $E$  (ou seja, se  $\hat{H}\psi = E\psi$ ), então  $\hat{a}_-\psi$  satisfaz a equação de Schrödinger com energia  $E - \hbar\omega$
- Demonstração da propriedade 1:

$$\begin{aligned}\hat{H}(\hat{a}_+\psi) &= \hbar\omega \left( \hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2} \right) \hat{a}_+\psi \\&= \hbar\omega \left( \hat{a}_+\hat{a}_-\hat{a}_+ + \frac{1}{2}\hat{a}_+ \right) \psi = \hbar\omega \hat{a}_+ \left( \hat{a}_-\hat{a}_+ + \frac{1}{2} \right) \psi \\&= \hbar\omega \hat{a}_+ \left( \hat{a}_-\hat{a}_+ - \frac{1}{2} + 1 \right) \psi = \hat{a}_+ \left[ \hbar\omega \left( \hat{a}_-\hat{a}_+ - \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega \right] \psi \\&= \hat{a}_+ (\hat{H} + \hbar\omega) \psi = \hat{a}_+ (\hat{H}\psi + \hbar\omega\psi) \\&= \hat{a}_+ (E\psi + \hbar\omega\psi) = \hat{a}_+ (E + \hbar\omega) \psi \\&\Rightarrow \boxed{\hat{H}(\hat{a}_+\psi) = (E + \hbar\omega) \hat{a}_+\psi}\end{aligned}$$

## Exercício

15. Demonstre a propriedade 2.

## Determinação do estado fundamental

- Se conhecemos a função de onda e a energia de qualquer estado  $\psi_n$  e  $E_n$ , podemos usar as Propriedades 1 e 2 vistas no slide anterior para gerar todas as outras soluções, pois

$$\psi_{n+1}(x) = A_{n+1} \hat{a}_+ \psi_n, \quad E_{n+1} = E_n + \hbar\omega$$

$$\psi_{n-1}(x) = A_{n-1} \hat{a}_- \psi_n, \quad E_{n-1} = E_n - \hbar\omega$$

onde  $A_{n+1}$  e  $A_{n-1}$  são constantes que garantem a normalização das funções  $\psi_{n+1}(x)$  e  $\psi_{n-1}(x)$ , respectivamente.

- Mas o que acontece se eu *aplicar o operador abaixamento repetidamente* a uma solução conhecida?  
*Resposta:* uma hora o processo chega ao estado fundamental (de menor energia)  $\psi_0$ , pois não é possível abaixar a energia além de  $E_0$ 
  - Por isso, vamos impor a condição

$$\hat{a}_- \psi_0 = 0$$

$$\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (+i\hat{p} + m\omega\hat{x}) \psi_0(x) = 0$$

$$\left( \hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) \psi_0(x) = 0$$

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

$$\psi_0(x) = A_0 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

# Determinação do estado fundamental

## Normalização

- Precisamos agora normalizar a solução:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^*(x) \psi_0(x) dx = 1$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |A_0|^2 e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} dx = 1$$

$$|A_0|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} dx = 1$$

- Fazendo a substituição

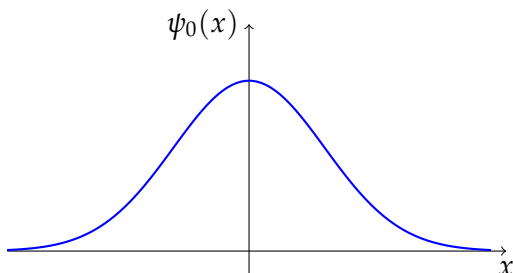
$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

$$\Rightarrow |A_0|^2 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} d\xi}_{\sqrt{\pi}} = 1$$

$$\Rightarrow |A_0| = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$$

- Portanto, a equação do estado fundamental é:

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





# Energia do estado fundamental

- Para encontrar a energia do estado fundamental, substituímos a função  $\psi_0(x)$  na equação de Schrödinger independente do tempo:

$$\hat{H}\psi_0(x) = E_0\psi_0(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_0}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi_0(x) = E_0\psi_0(x)$$

## Exercício

16. Mostre que a energia do estado fundamental é

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

# Estados excitados

- De posse da solução e da energia do estado fundamental,  $\psi_0(x)$  e  $E_0$ , e usando as propriedades do operador levantamento, podemos determinar (em princípio) todas as soluções:
- As funções  $\psi_n(x)$  são obtidas aplicando  $n$  vezes o operador  $\hat{a}_+$  a  $\psi_0(x)$ :
- As energias  $E_n$ , por sua vez, também vêm das propriedades de levantamento:

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

$$\psi_1(x) = A_1 \hat{a}_+ \psi_0(x)$$

$$\psi_3(x) = \tilde{A}_2 \hat{a}_+ \psi_1(x) = A_2 (\hat{a}_+)^2 \psi_0(x)$$

$$\psi_3(x) = \tilde{A}_3 \hat{a}_+ \psi_2(x) = A_3 (\hat{a}_+)^3 \psi_0(x)$$

$\vdots$

$$\boxed{\psi_n(x) = A_n (\hat{a}_+)^n \psi_0(x)}$$

(os valores  $\tilde{A}_i$  são também constantes de normalização, usadas apenas para diferenciá-las das  $A_i$ )

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

$$E_1 = E_0 + \hbar\omega = \frac{1}{2}\hbar\omega + \hbar\omega$$

$$E_2 = E_1 + \hbar\omega = \frac{1}{2}\hbar\omega + 2\hbar\omega$$

$$E_3 = E_2 + \hbar\omega = \frac{1}{2}\hbar\omega + 3\hbar\omega$$

$\vdots$

$$\boxed{E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad n = 0, 1, 2, \dots}$$

# Estados excitados

- Na verdade, existe um truque para determinar qualquer um dos  $A_n$  ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ), *que não vamos nos preocupar em demonstrar agora*:
- Se  $\psi_0(x)$  está normalizado, então

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}_+)^n \psi_0(x)$$

- usando o mesmo truque, também é possível demonstrar que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = \delta_{mn}$$

ou seja, os estados são ortonormais.

- ▶ lembrando que  $\delta_{mn}$  é o delta de Kronecker:

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1, & m = n \\ 0, & m \neq n \end{cases}$$

## Primeiro estado excitado

- Vamos determinar  $\psi_1(x)$ , ou seja, a função de onda (independente do tempo) do primeiro estado excitado usando a propriedade do operador levantamento:

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a}_+ \psi_0(x)$$

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

$$\hat{a}_+ = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(-i\hat{p} + m\omega x) \quad \text{ou} \quad \hat{a}_+ = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\left(-\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)$$

$$\Rightarrow \psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \left(-\hbar\frac{d\psi_0}{dx} + m\omega x\psi_0\right)$$

- Então:

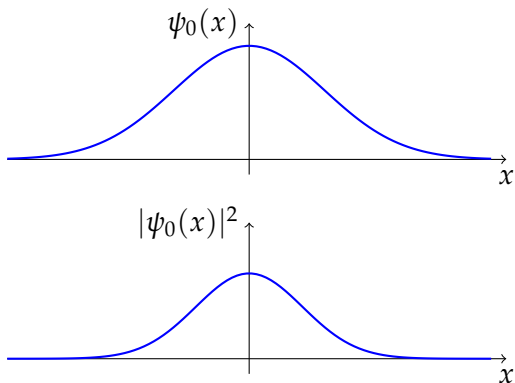
$$\psi_1(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

com

$$E_1 = 3\hbar\omega/2$$

# Primeiro estado excitado

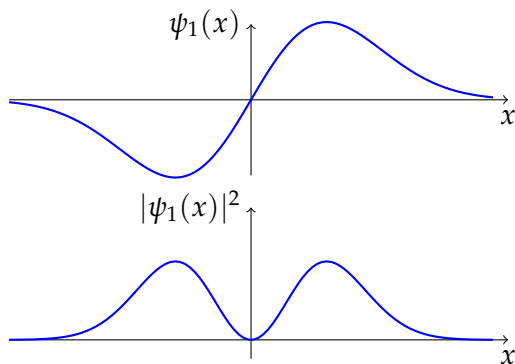
- Estado fundamental:



- Repare que

1.  $\psi_0(x)$  é par e  $\psi_1(x)$  é ímpar
2.  $\psi_0(x)$  não tem nós e  $\psi_1(x)$  tem um nó

- Primeiro estado excitado:



## Exercícios

17. Construa  $\psi_2(x)$ .
18. Esboce  $\psi_2(x)$  e  $|\psi_2(x)|^2$ .
19. Verifique a ortonormalidade de  $\psi_0$ ,  $\psi_1$  e  $\psi_2$  por integração explícita. *Dica:* explore a paridade e a imparidade das funções.

# Método analítico

- Não veremos a solução usando o método analítico (ou seja, por série de potências)
  - ▶ mas aplicaremos o método no átomo de hidrogênio (num futuro não muito distante...)
- Pulando para o resultado, a solução é:

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

- ▶ sendo que

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

e  $H_n(\xi)$  os **polinômios de Hermite**:

$$H_0(\xi) = 1$$

$$H_1(\xi) = 2\xi$$

$$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2$$

$$H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi$$

$$H_4(\xi) = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12$$

$$H_5(\xi) = 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi$$

⋮

# Algumas propriedades dos polinômios de Hermite

## Exercícios

20. Verifique que as funções de onda  $\psi_0(x)$ ,  $\psi_1(x)$  e  $\psi_2(x)$  dadas pelo método algébrico são idênticas às dadas pelo método analítico
21. Usando os polinômios de Hermite do slide anterior, verifique que valem as seguintes relações:

$$\frac{dH_n}{d\xi} = 2nH_{n-1}(\xi),$$

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - \frac{dH_n}{d\xi}$$

e portanto

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2nH_{n-1}(\xi).$$

22. Com as relações do slide anterior e do Ex. 21, encontre  $H_6(\xi)$ .

## Exercícios

23. Para os estados  $\psi_0$  e  $\psi_1$  do oscilador harmônico:
- (a) Calcule  $\langle x \rangle$ ,  $\langle p \rangle$ ,  $\langle x^2 \rangle$  e  $\langle p^2 \rangle$ .
  - (b) Verifique o princípio da incerteza para esses estados.
  - (c) Calcule  $\langle T \rangle$  (a energia cinética média) e  $\langle V \rangle$  (a energia potencial média) para ambos os estados (não precisa integrar de novo!). A soma das duas é o que você esperava?
24. Calcule  $\langle x \rangle$ ,  $\langle p \rangle$ ,  $\langle x^2 \rangle$ ,  $\langle p^2 \rangle$  e  $\langle T \rangle$  para o  $n$ -ésimo estado estacionário do oscilador harmônico. Confira se o princípio da incerteza é satisfeito.
25. Uma partícula no potencial do oscilador harmônico está no estado

$$\Psi(x, 0) = A[3\psi_0(x) + 4\psi_1(x)]$$

- (a) Calcule  $A$ .
- (b) Ao medir a energia da partícula, quais valores você pode obter e com quais probabilidades?
- (c) Monte  $\Psi(x, t)$  e  $|\Psi(x, t)|^2$ .
- (d) Calcule  $\langle x \rangle$  e  $\langle p \rangle$ . Verifique se o teorema de Ehrenfest é satisfeito:

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle$$



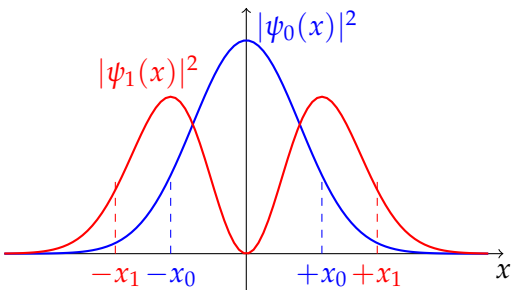
# Tunelamento

- Como vimos, classicamente, a partícula sob a influência do potencial harmônico tem energia total dada por

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

- se a energia da partícula (clássica) é  $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$ , o máximo valor de  $x$  alcançado (que chamaremos de  $x_n$ ) é atingido quando  $\dot{x} = 0$ , ou seja,

$$\frac{1}{2}m\omega^2x_n^2 = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \Rightarrow x_n = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}(2n+1)}$$



- Classicamente, a partícula com energia  $E_n$  não escapa da região  $-x_n \leq x \leq +x_n$
- Mas, quanticamente, existe a probabilidade da partícula *tunelar* para fora dessa região:

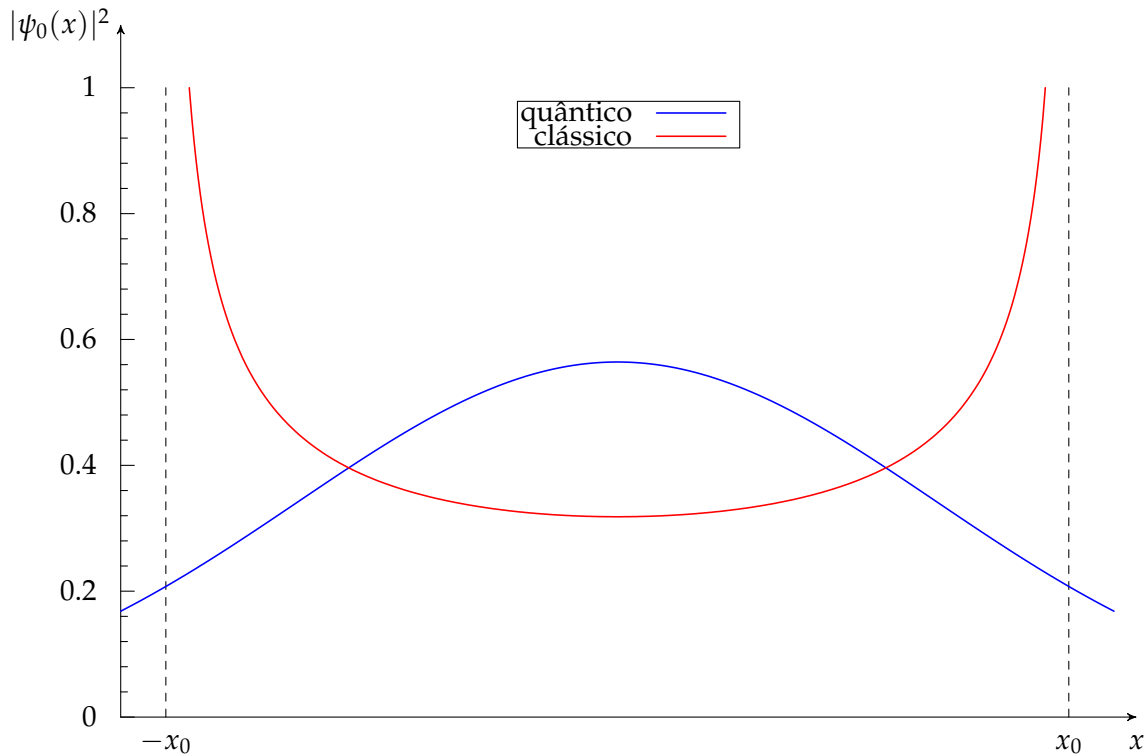
$$P_n(|x| > x_n) = \int_{-\infty}^{-x_n} |\psi_n(x)|^2 dx + \int_{x_n}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx$$

$$P_n(|x| > x_n) = 1 - 2 \int_0^{x_n} |\psi_n(x)|^2 dx$$

## Exercícios

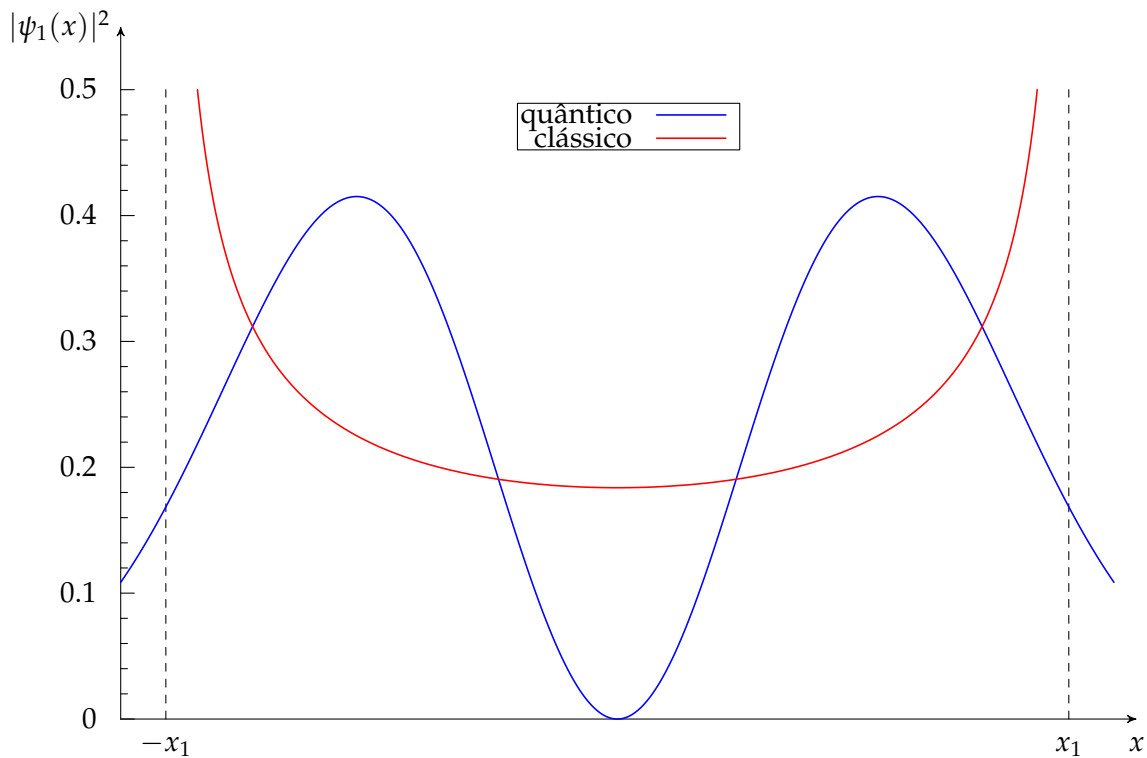
26. Determine  $P_0(|x| > x_0)$ ,  $P_1(|x| > x_1)$  e  $P_2(|x| > x_2)$ . Resolva as integrais numericamente ou usando uma tabela da função erro.

## Estados fortemente excitados



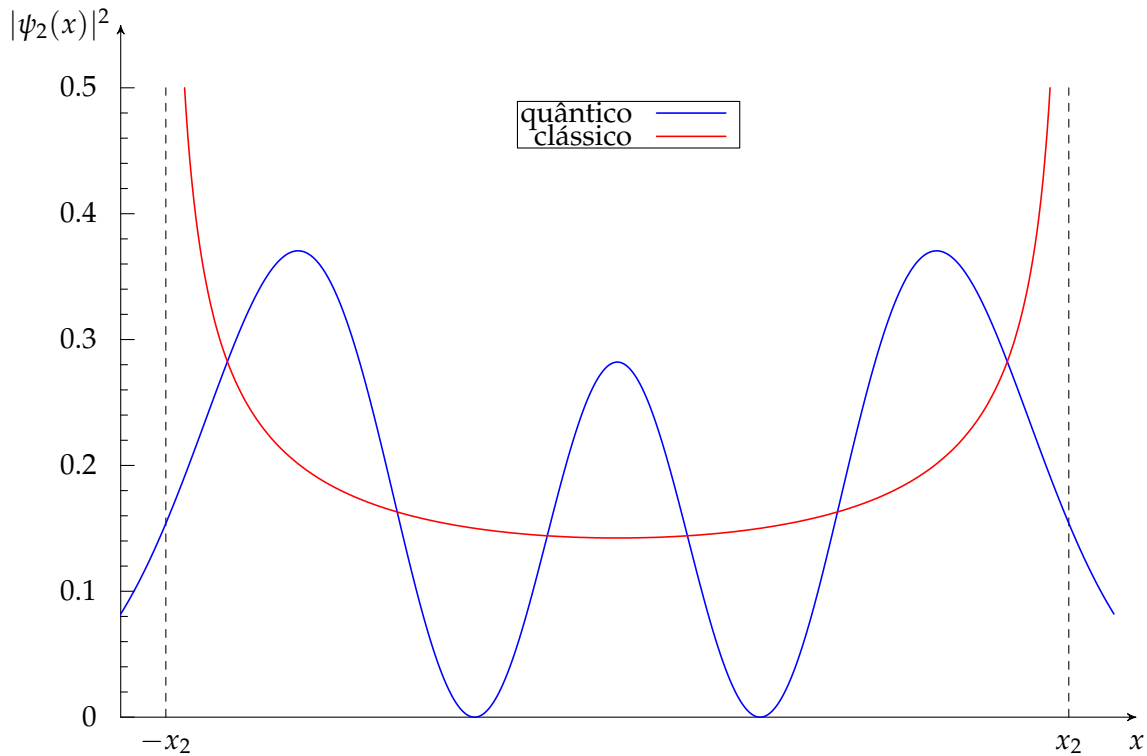
Estado fundamental

## Estados fortemente excitados



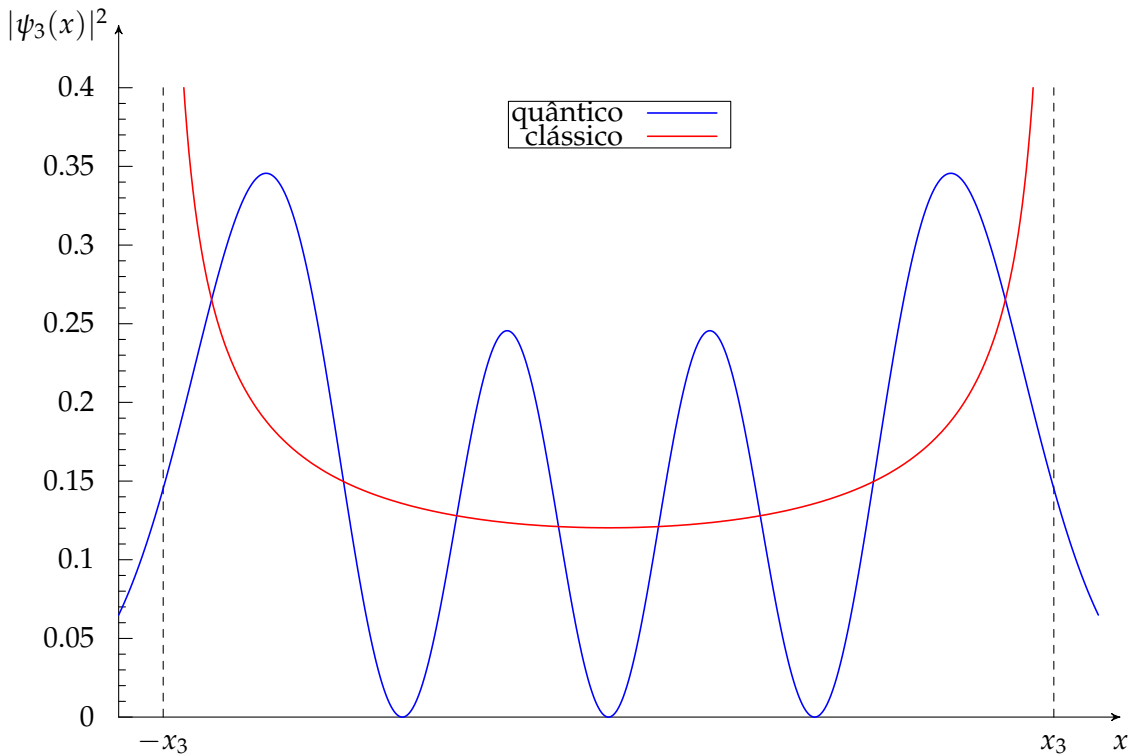
Estados excitados

## Estados fortemente excitados



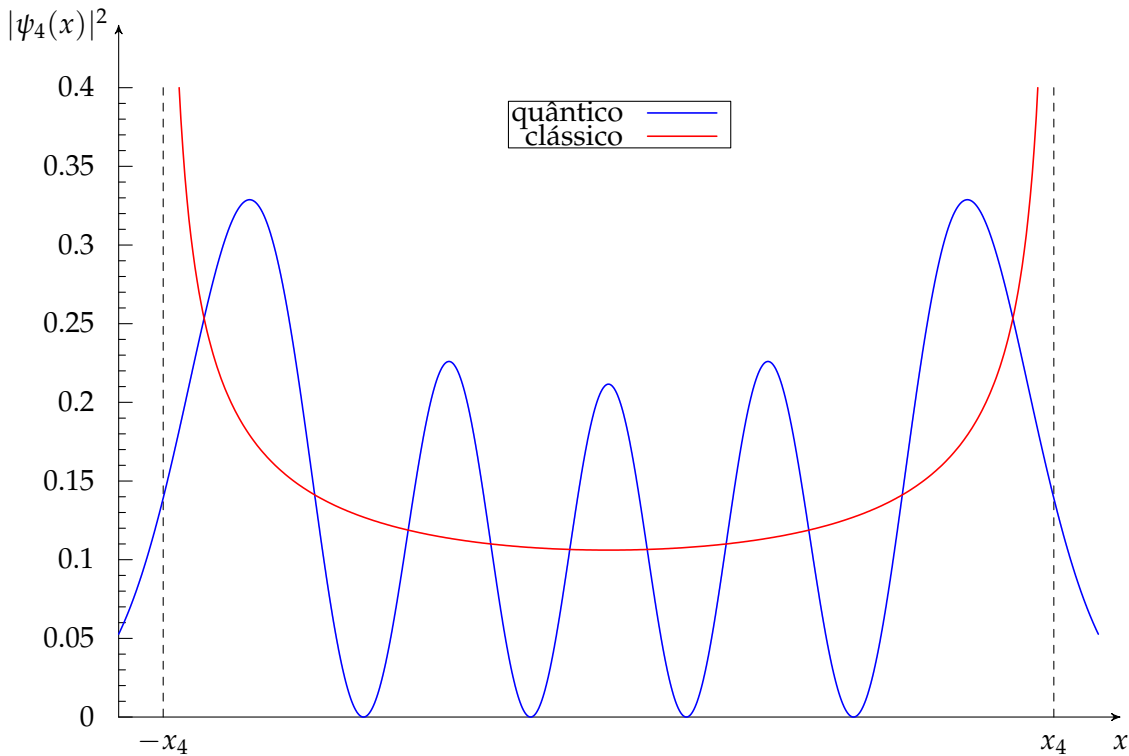
Estados excitados

## Estados fortemente excitados



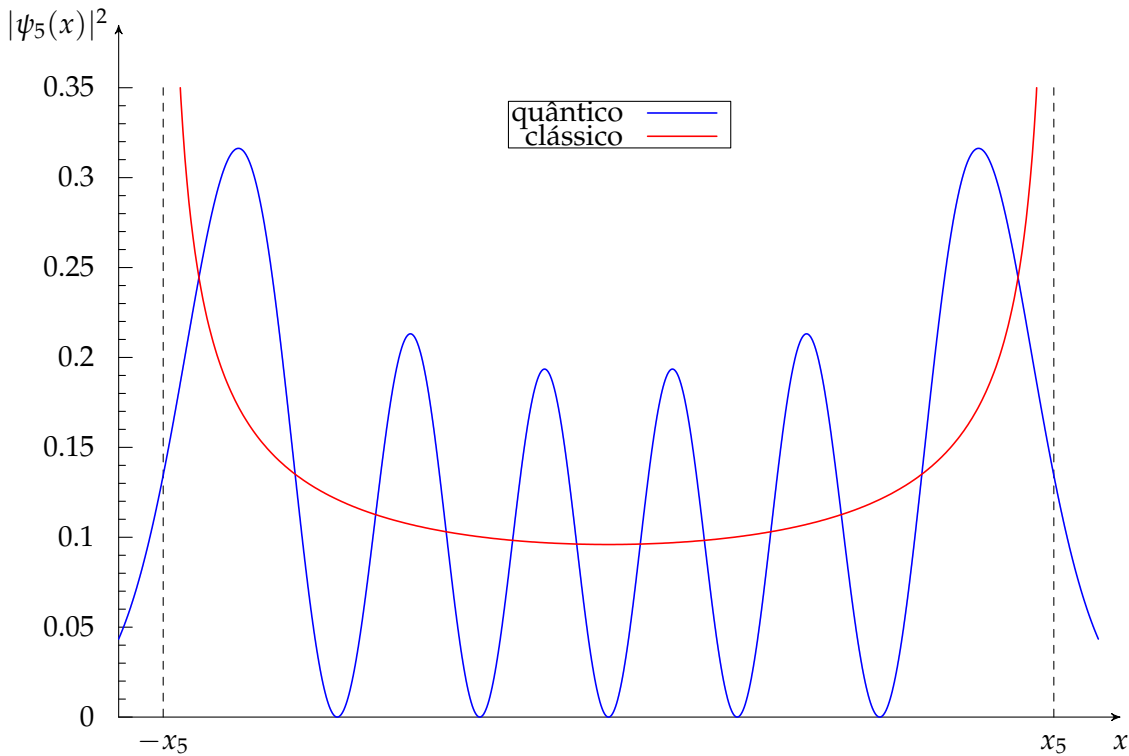
Estados excitados

## Estados fortemente excitados



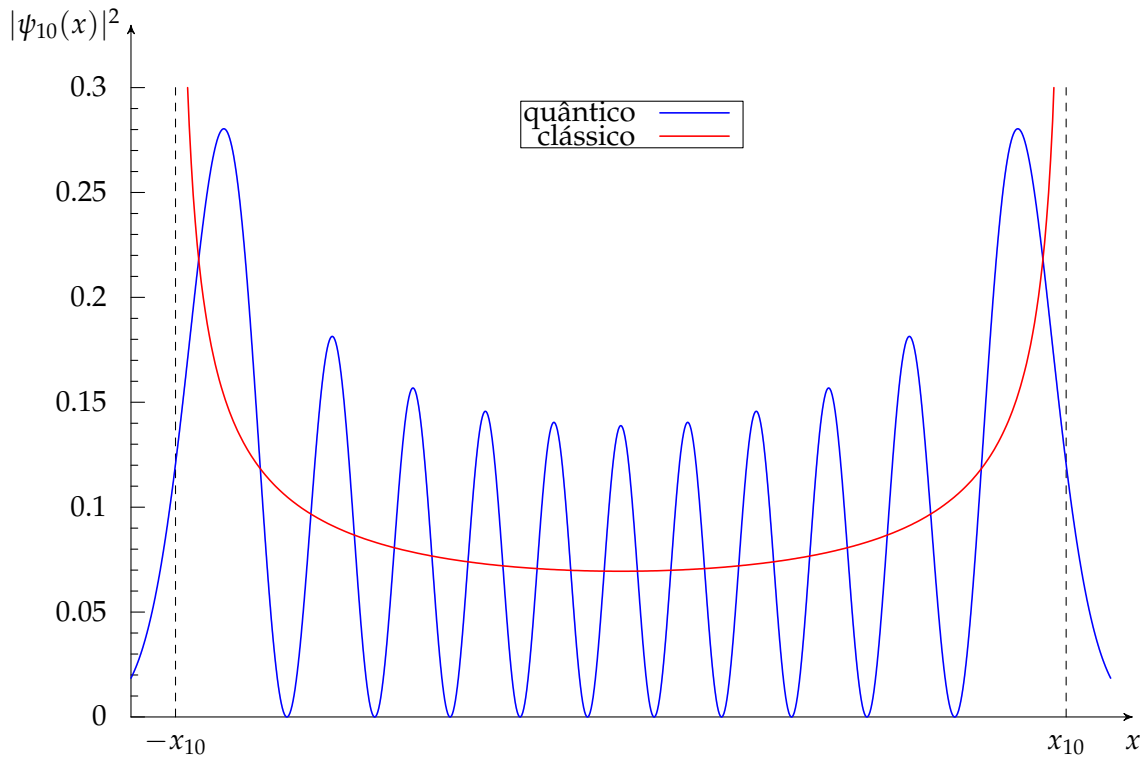
Estados excitados

## Estados fortemente excitados



Estados excitados

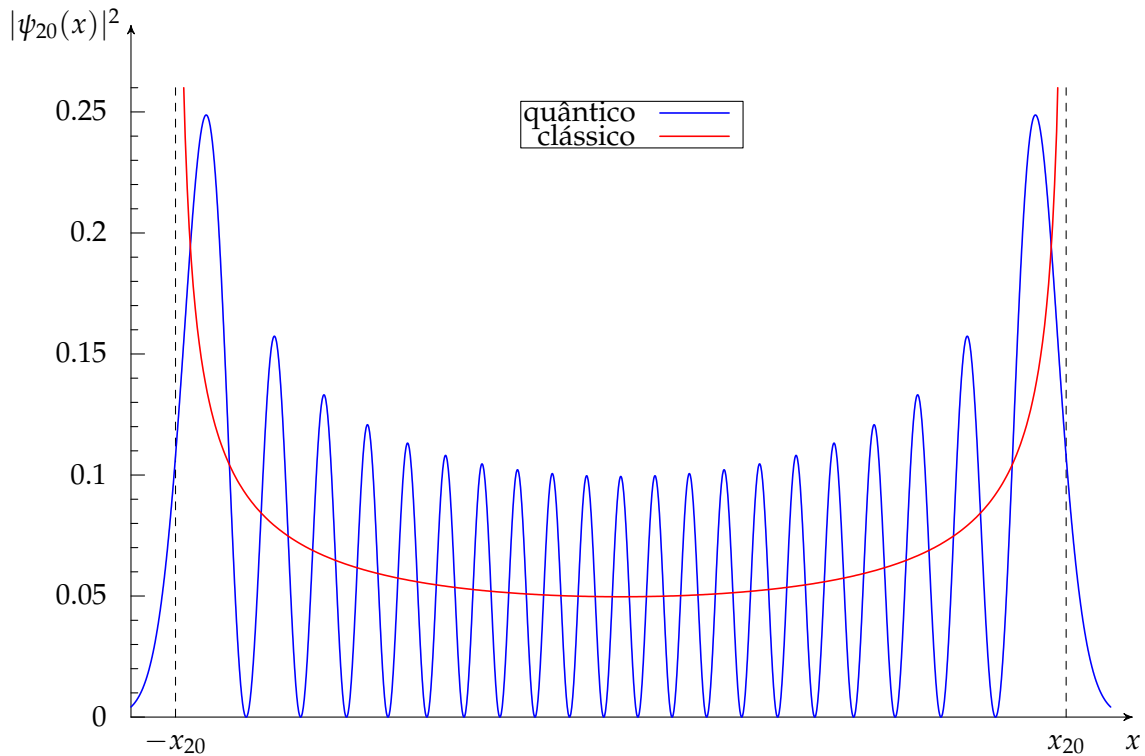
## Estados fortemente excitados



Estados excitados

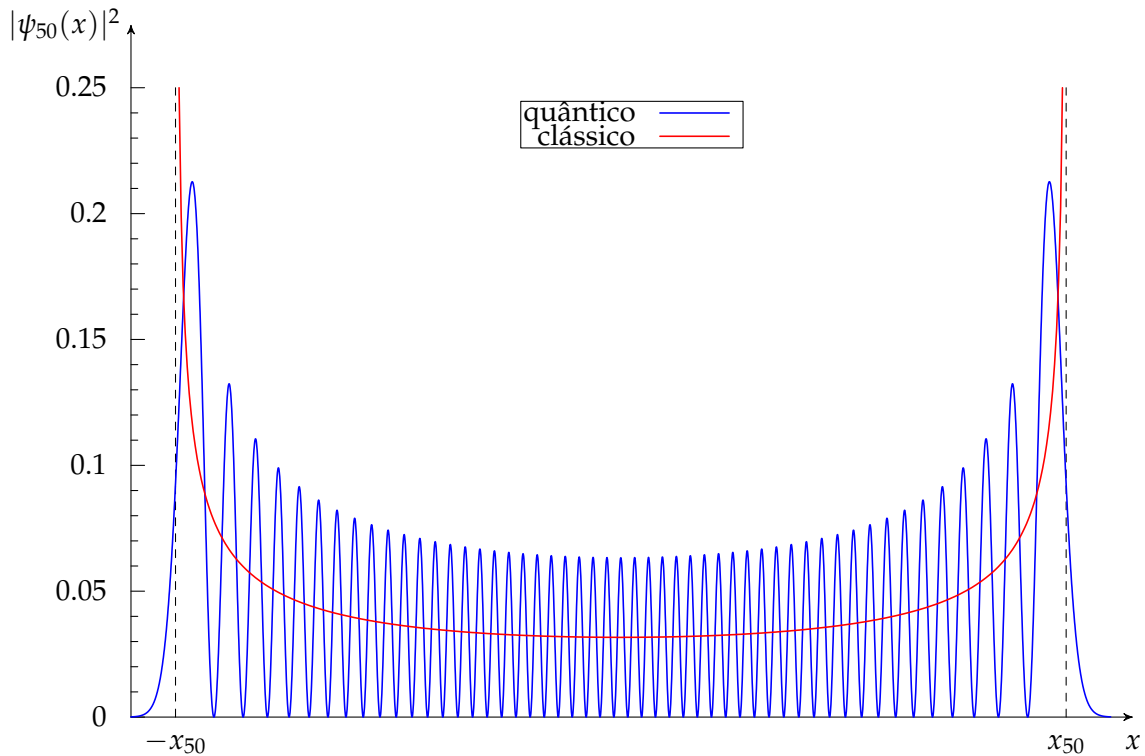


# Estados fortemente excitados



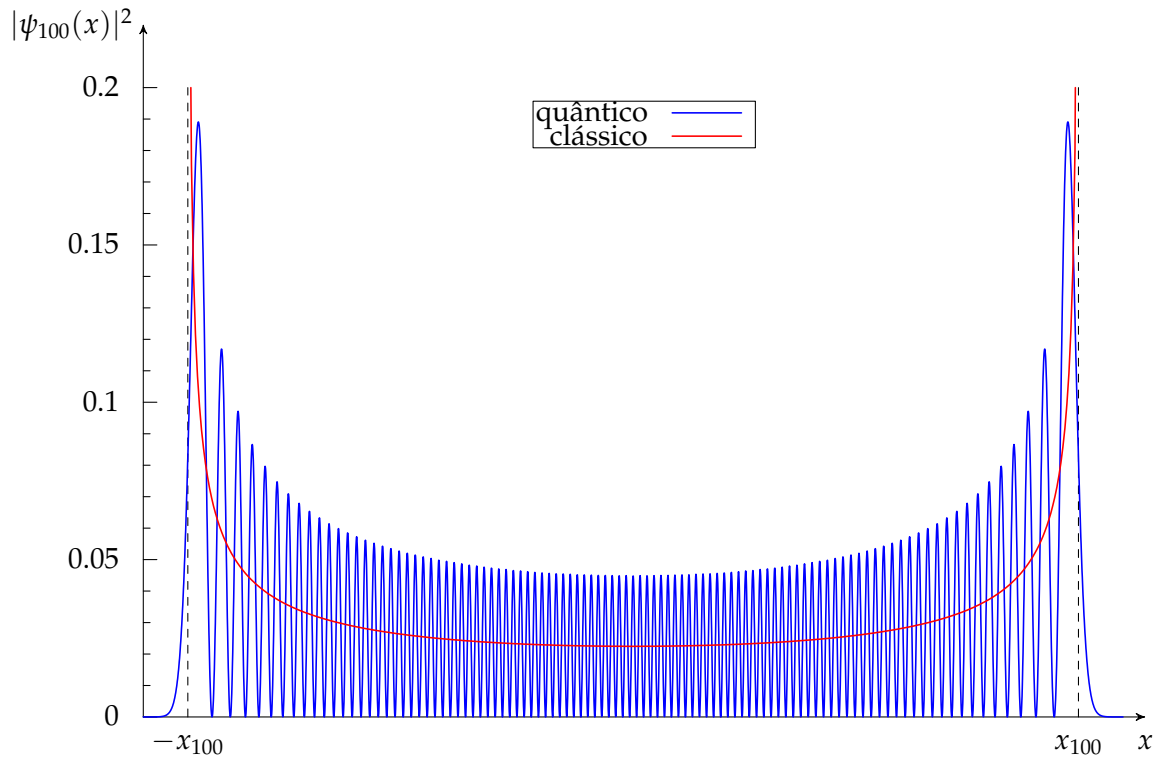
Estados excitados

# Estados fortemente excitados



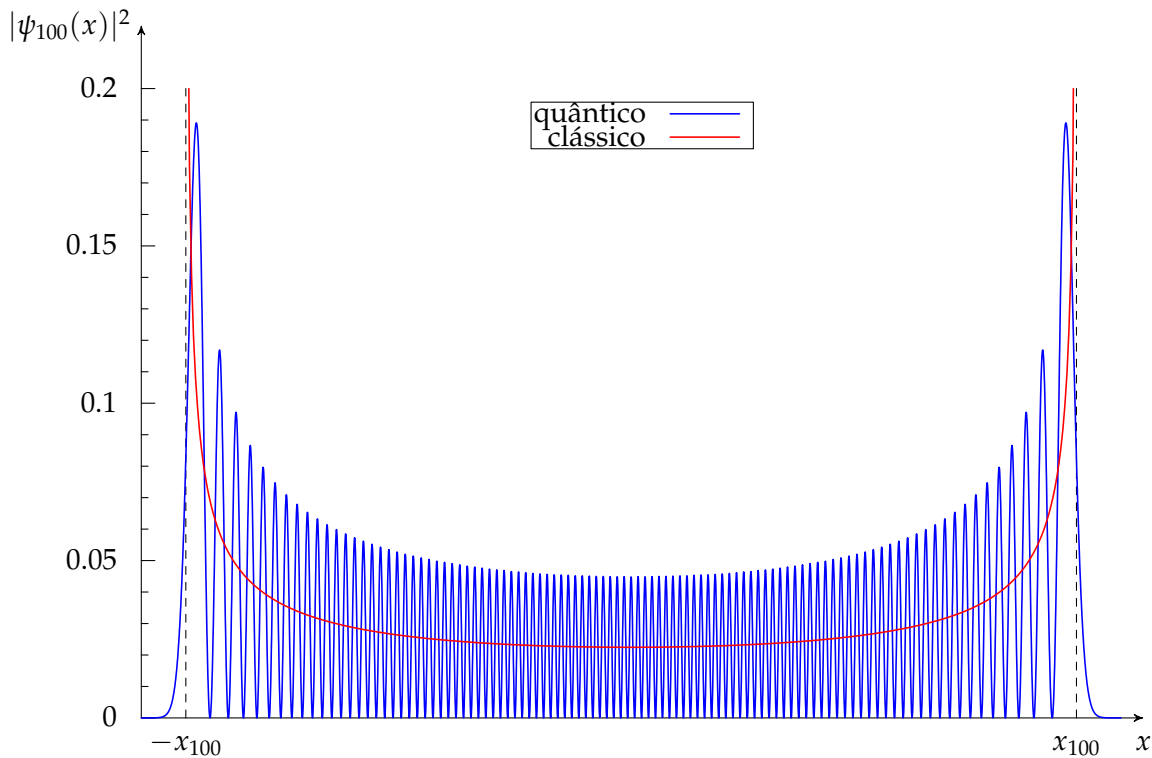
Estados excitados

# Estados fortemente excitados



Estados excitados

## Estados fortemente excitados



Quanto maior a energia, mais próximo (na média) da probabilidade clássica

# Limite clássico

- Assim, do slide anterior, o **limite clássico** é atingido se a partícula está num estado  $\psi_n$  com  $n$  muito grande
- A energia  $E_n$  dessa partícula é

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

- Logo, no limite clássico ( $n \rightarrow \infty$ ) teremos

$$E_n \gg \hbar\omega$$

- ▶ lembrando que  $E_0 = \hbar\omega/2$  é a energia do estado fundamental ( $n = 0$ )

# Mais exercícios

## Exercícios

27. Uma pequena massa de 2 g é atada a uma mola, gerando uma extensão de 1 cm.
- (a) Calcule a constante de mola  $k$  (adote  $g = 10 \text{ m/s}^2$ ).
  - (b) Ache a frequência  $\omega$  de pequenas oscilações verticais da massa em torno da posição de equilíbrio.
  - (c) Mostre que a condição  $E \gg \hbar\omega$  para a validade do limite clássico é facilmente satisfeita para uma amplitude de oscilação de 1 mm.
28. Um modelo simples da molécula de HCl indica que o íon de hidrogênio é mantido num potencial harmônico com constante de mola  $k = 470 \text{ N m}^{-1}$ .
- (a) Calcule a frequência de oscilação do íon de H no limite clássico (desprezando o movimento do íon de Cl).
  - (b) A amplitude de oscilação é  $\approx 10^{-11} \text{ m}$ , ou um décimo da distância interatômica. A aproximação clássica é válida?
  - (c) Obtenha uma expressão para os níveis de energia vibracionais usando a teoria quântica.
  - (d) Qual é o limite clássico para a amplitude de vibração quando  $n = 0$ ?
  - (e) Calcule a frequência e o comprimento de onda da radiação eletromagnética (fóton) emitida quando o átomo salta de um desses níveis de energia para outro imediatamente abaixo. *Dica:* use a relação de Einstein ( $E = h\nu$ ) e a relação  $c = \lambda\nu$ , sendo  $c$  a velocidade da luz.
29. Gases nobres como Ne, Ar, Kr e Xe, em temperaturas baixas, cristalizam em estruturas simples, tal que as interações entre os íons do cristal podem ser aproximadas pelo potencial de Lennard-Jones,

$$V(r) = 4V_0 \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right].$$

sendo  $r$  a distância medida a partir de um dos íons e  $V_0$  e  $\sigma$  dados na Tabela abaixo. Encontre uma aproximação para a energia do estado fundamental de um dos íons desses cristais. *Dica:* próximo ao ponto de mínimo de  $V(r)$ , pode-se aproximar o potencial de Lennard-Jones por um potencial harmônico.

	Ne	Ar	Kr	Xe
$V_0$ (eV)	0,0031	0,0104	0,0140	0,0200
$\sigma$ (Å)	2,74	3,40	3,65	3,98