

Sistemas em uma dimensão:
estados ligados

Sistemas em uma dimensão: estados ligados

METAS:

- Explicar o que é estado ligado na mecânica quântica.
- Desenvolver a teoria do movimento de uma partícula em um poço infinito.
- Desenvolver a teoria do oscilador harmônico.

OBJETIVOS:

Ao fim da aula os alunos deverão ser capazes de:

- explicar porque as autofunções do hamiltoniano representam estados ligados;
- calcular os autovalores do hamiltoniano e encontrar autofunções normalizadas para uma partícula em um poço infinito;
- obter o espectro do hamiltoniano para o oscilador harmônico;
- encontrar autofunções normalizadas para o oscilador harmônico;
- calcular valores esperados para esses sistemas.

PRÉ-REQUISITOS:

- equação de Schrödinger;
- equação de Schrödinger independente do tempo;
- observáveis.

6.1 Introdução

Para sistemas com potencial independente do tempo, o método de separação de variáveis nos permite encontrar um conjunto amplo de soluções para a equação de Schrödinger, se for possível, é claro, encontrar o espectro do hamiltoniano e as soluções correspondentes da equação de Schrödinger independente do tempo. Em uma dimensão, a equação de Schrödinger independente do tempo é relativamente simples. Porém, o número de sistemas para os quais as soluções desta equação se exprimem em termos de funções elementares é limitado. Na presente aula consideremos uma partícula em um poço infinito e, também, o oscilador harmônico. O operador hamiltoniano para esses sistemas não possui espectro contínuo o que facilita a resolução da equação e, também, a interpretação das soluções encontradas. Os estados estacionários associados com os autovalores do hamiltoniano são *estados ligados*.

6.2 Estados ligados

6.2.1 Estados ligados e espalhamento na mecânica clássica

Na mecânica clássica, conhecemos dois tipos de movimento, associados com *estados ligados* e *estados de espalhamento* do sistema, correspondentemente.

Estados ligados. Consideremos o movimento de um planeta do sistema solar. A distância entre o planeta e o Sol pode depender do tempo mas permanece *limitada*. O sistema “Sol-planeta” se encontra em um *estado ligado*.

Espalhamento. Um outro tipo de movimento também é possível. Um corpo “vindo do infinito” pode passar perto do Sol para depois se afastar de novo indo “ao infinito”. A distância entre o Sol e o corpo cresce ilimitadamente com o tempo. O sistema “Sol-corpo” não está em um estado ligado. Observamos um processo de espalhamento.

Sistemas em uma dimensão: estados ligados

Exemplo 6.1. Consideremos, em uma dimensão, uma partícula com massa m num campo de forças dado pelo potencial $V(x)$. A energia mecânica do sistema é conservada, isto é,

$$\frac{p^2}{2m} + V(x) = E,$$

onde a constante E é a energia do sistema. Sendo a energia cinética não-

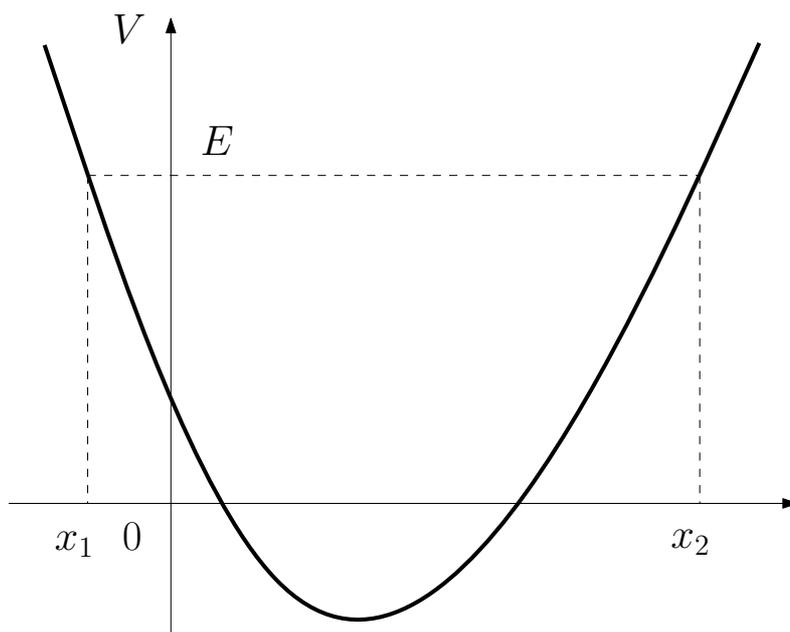


Figura 6.1: Todos os estados do sistema são estados ligados.

negativa, vale

$$V(x) \leq E,$$

logo a partícula não pode sair da região permitida $x_1 \leq x \leq x_2$ oscilando entre os pontos de retorno x_1 e x_2 . A partícula está em um estado ligado.

Exemplo 6.2. Consideremos agora o potencial na Figura 6.2. Uma partícula com energia positiva vindo “do infinito” é espalhada pelo potencial e se afasta da origem indo “ao infinito”. Vindo da esquerda, uma partícula com energia E_1 , menor que o valor máximo do potencial, é espalhada para a esquerda. A partícula com energia E_1 não penetra na região $x > x_1$. Por outro lado, uma

partícula com energia E_2 , vindo da direita, passa para a direita. Trata-se de processos de espalhamento.

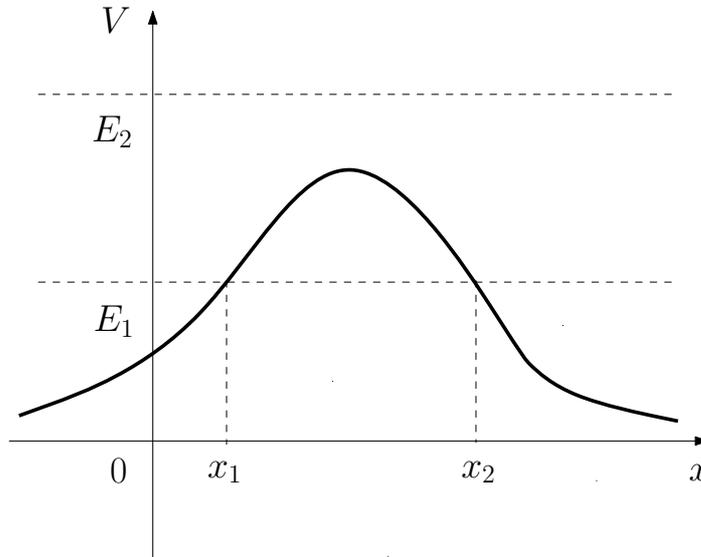


Figura 6.2: Um potencial, para o qual estados ligados não existem.

6.2.2 Estados ligados na mecânica quântica

Seja E um autovalor do operador hamiltoniano \hat{H} para uma partícula em um potencial V . Seja $\psi(x)$ uma função normalizada associada ao autovalor E . A função de onda

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \quad (6.1)$$

representa um estado ligado do sistema pois a densidade de probabilidade

$$P(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 = |\psi(x)|^2$$

é “localizada”. Porém, não existirá necessariamente uma “região permitida” tal que fora dessa região a densidade de probabilidade se anula. A densidade de probabilidade pode ser diferente de zero para todo x mas, sendo $\psi(x)$ quadrado-integrável, existe uma região apropriada no espaço, limitada e de

volume finito, tal que a probabilidade de encontrar a partícula fora dessa região é (desprezivelmente) pequena e não cresce com o tempo.

6.3 Poço infinito

Um poço de potencial quadrado (em um espaço de dimensão um) é dado por

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{se } x < 0, \\ 0 & \text{se } 0 < x < a, \\ V_0 & \text{se } a < x. \end{cases} \quad (6.2)$$

É possível resolver a equação de Schrödinger para esse potencial. O hamiltoniano do sistema possui espectro discreto (um conjunto finito de autovalores) como, também, espectro contínuo que ocupa o intervalo

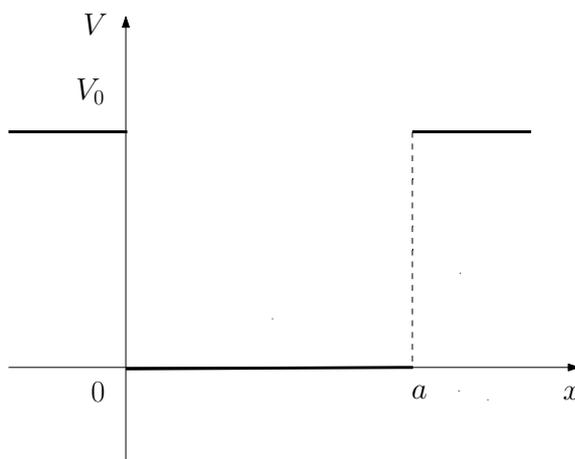


Figura 6.3: Poço quadrado finito.

$V_0 < E$.

$$V_0 < E. \quad (6.3)$$

É de esperar então que o hamiltoniano não terá espectro contínuo no limite $V_0 \rightarrow \infty$. Esse é o limite do “poço infinito” que vamos estudar. Os problemas técnicos na resolução da equação de Schrödinger são facilmente resolvidos nesse caso o que permite nos concentrar nos problemas de interpretação.

6.3.1 Equação de Schrödinger

No limite $V_0 \rightarrow \infty$ (um poço de potencial de profundidade infinita), a função de onda se anula para $x < 0$ e, também, para $x > a$. A função de onda não se anula identicamente apenas para $0 < x < a$ e satisfaz a equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t), \quad 0 < x < a, \quad -\infty < t < \infty. \quad (6.4)$$

Equação de Schrödinger independente do tempo. Usando o método de separação de variáveis, encontramos a equação de Schrödinger independente do tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x), \quad 0 < x < a. \quad (6.5)$$

Condições de contorno. Uma análise do poço *finito* mostra que, no limite $V_0 \rightarrow \infty$, a função $\Psi(x)$ satisfaz as condições de contorno

$$\psi(0) = 0, \quad \psi(a) = 0. \quad (6.6)$$

A equação (6.5) possui um par de soluções linearmente independente para todo valor de E . Porém, soluções de (6.5) que satisfazem também as condições de contorno (6.6) existem somente para alguns valores reais de E . Esses valores de E são os autovalores do hamiltoniano do sistema.

6.3.2 Autovalores e autofunções

Precisamos determinar os valores do parâmetro E para os quais a equação (6.5) possui soluções que satisfazem as condições de contorno (6.6). Esperamos que esses valores sejam reais pois o hamiltoniano é um operador hermitiano.

Autovalores. A equação (6.5) podemos reescrever na forma

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = 0, \quad 0 < x < a. \quad (6.7)$$

Sistemas em uma dimensão: estados ligados

Para $E < 0$, as funções

$$\psi_{\pm}(x) = e^{\pm\lambda x}, \quad \lambda = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad (6.8)$$

são soluções linearmente independentes de (6.7). Verifica-se que a única função que satisfaz a equação e as condições de contorno para valores não-positivos de E é a constante zero.

Para $E > 0$ um par linearmente independente de soluções da equação (6.7) é dado por

$$\phi_1(x) = \cos kx, \quad \phi_2(x) = \text{sen } kx, \quad (6.9)$$

onde

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

A solução geral da equação (6.7) é dada por

$$\psi(x) = A\phi_1(x) + B\phi_2(x) \equiv A \cos kx + B \text{sen } kx, \quad (6.10)$$

onde A, B são constantes complexas arbitrárias. As condições de contorno (6.6) implicam em

$$A = 0, \quad (6.11)$$

$$A \cos ka + B \text{sen } ka = 0, \quad (6.12)$$

logo

$$A = 0, \quad B \text{sen } ka = 0.$$

O coeficiente B não pode ser igual a zero (se $A = B = 0$, a combinação linear (6.10) representa a função nula). Portanto,

$$\text{sen } ka = 0,$$

logo

$$ka = \pi n, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (6.13)$$

donde

$$\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{\pi n}{a}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (6.14)$$

Para cada valor inteiro positivo de n a equação (6.14) possui uma única solução,

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (6.15)$$

Esses são os autovalores do hamiltoniano.

A energia de uma partícula em um poço de potencial infinito é quantizada.

Energia de ponto zero A energia do estado fundamental de um sistema é a *energia de ponto zero*. Para uma partícula no poço quadrado infinito essa energia é positiva (portanto, maior que o valor mínimo do potencial, que é igual a zero). Esse resultado pode parecer estranho, mas é explicável. Para um sistema quântico é válido o Princípio de incerteza. Uma partícula com energia zero teria momento angular determinado e igual a zero. Assim, a incerteza do momento seria igual a zero. Sendo a incerteza da coordenada da partícula no poço limitada (a largura a do poço é finita), o produto das duas incertezas seria igual a zero, o que é incompatível com o princípio de incerteza.

Autofunções. Encontraremos uma autofunção normalizada¹⁹ associada ao autovalor E_n . Decorre das equações (6.10), (6.11), (6.13) que a autofunção tem a forma

$$\psi_n(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x < 0, \\ B_n \text{ sen } \frac{\pi n x}{a} & \text{se } 0 < x < a, \\ 0 & \text{se } a < x, \end{cases} \quad (6.16)$$

¹⁹Para sistemas no espaço de dimensão um, duas autofunções do hamiltoniano associadas a um autovalor são linearmente dependentes.

onde a constante B_n escolhamos de tal modo que a função $\Psi_n(x)$ seja normalizada. Um valor apropriado para a constante é $B_n = \sqrt{2/a}$. A função

$$\psi_n(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x < 0, \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \frac{\pi n x}{a} & \text{se } 0 < x < a, \\ 0 & \text{se } a < x, \end{cases} \quad (6.17)$$

é uma autofunção normalizada do hamiltoniano associada ao autovalor E_n .

Sendo o hamiltoniano do sistema um operador hermitiano, duas autofunções associadas a dois autovalores diferentes são ortogonais, isto é,

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = 0 \quad \text{se } m \neq n. \quad (6.18)$$

A ortogonalidade das autofunções podemos verificar também por um cálculo direto.

6.3.3 Observáveis e valores esperados

No n -ésimo estado estacionário, representado pela função de onda

$$\Psi_n(x, t) = \psi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t},$$

a densidade de probabilidade P_n não depende do tempo:

$$P_n(x) = \frac{2}{a} \operatorname{sen}^2 \frac{\pi n x}{a}.$$

Um cálculo direto mostra que, no n -ésimo estado estacionário,

$$\langle x \rangle = \frac{a}{2}, \quad \langle p \rangle = 0. \quad (6.19)$$

Exemplo 6.3. Mostraremos que, no n -ésimo estado estacionário,

$$\sigma_x^2 = \frac{a^2}{12} \left[1 - \frac{6}{\pi^2 n^2} \right]. \quad (6.20)$$

Da definição do desvio padrão, temos

$$\sigma_x^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2.$$

Para o n -ésimo estado estacionário, encontramos

$$\sigma_x^2 = \langle \psi_n | \hat{x}^2 \psi_n \rangle - \left(\frac{a}{2} \right)^2, \quad (6.21)$$

onde

$$\langle \psi_n | \hat{x}^2 \psi_n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n(x) x^2 \Psi_n(x) dx = \frac{2}{a} \int_0^a x^2 \operatorname{sen}^2 \frac{\pi n x}{a} dx. \quad (6.22)$$

Calculando a integral,

$$\int_0^a x^2 \operatorname{sen}^2 \frac{\pi n x}{a} dx = \frac{a^3}{2\pi^2 n^2}$$

e substituindo em (6.22), (6.21), obtemos a resposta (6.20).

Quando o sistema não está em um estado estacionário, a densidade de probabilidade depende do tempo como mostra o exemplo a seguir.

Exemplo 6.4. A função de onda

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_1(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_1 t} + \psi_2(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_2 t} \right] \quad (6.23)$$

não é estacionária. A densidade de probabilidade depende do tempo:

$$\begin{aligned} P(x, t) &= |\Psi(x, t)|^2 \\ &= \frac{1}{2} \left[|\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2 + \psi_1(x) \psi_2(x) \left(e^{-\frac{i}{\hbar} (E_2 - E_1) t} + e^{\frac{i}{\hbar} (E_2 - E_1) t} \right) \right] \\ &= \frac{1}{a} \left[\operatorname{sen}^2 \left(\frac{\pi x}{a} \right) + \operatorname{sen}^2 \left(\frac{2\pi x}{a} \right) + 2 \operatorname{sen} \left(\frac{\pi x}{a} \right) \operatorname{sen} \left(\frac{2\pi x}{a} \right) \cos \left((E_2 - E_1) t \right) \right] \\ &= \frac{1}{a} \operatorname{sen}^2 \left(\frac{\pi x}{a} \right) \left[1 + 4 \cos^2 \left(\frac{\pi x}{a} \right) + 4 \cos \left(\frac{\pi x}{a} \right) \cos \left(\frac{3\pi^2 \hbar}{2ma^2} t \right) \right] \quad (6.24) \end{aligned}$$

Quando o sistema não está em um estado estacionário, os valores esperados dos observáveis, geralmente, dependem do tempo.

6.4 Oscilador harmônico

Porque o oscilador harmônico é importante? Na mecânica clássica ele é a ferramenta principal no tratamento de *pequenas oscilações*. Por mais complexo

que seja um sistema mecânico, se ele possuir um estado de equilíbrio estável, no estudo de pequenas oscilações ao redor da posição de equilíbrio, o sistema pode ser substituído por um conjunto de osciladores harmônicos. Na mecânica quântica, o oscilador harmônico é interessante pelo mesmo motivo. No estudo de pequenas oscilações²⁰ de uma molécula, por exemplo, a molécula pode ser substituída por um sistema de osciladores harmônicos.

O problema do oscilador harmônico na física clássica admite uma resolução completa com métodos elementares. A equação de Schrödinger independente de tempo para o oscilador harmônico é menos trivial, mas, mesmo assim, uma resolução completa é possível.

6.4.1 Hamiltoniano e equação de Schrödinger

A energia potencial (o “potencial”) do oscilador harmônico é dada por

$$V(x) = \frac{k}{2}x^2, \quad (6.25)$$

onde k é a “constante da mola”. Portanto, o hamiltoniano do sistema na mecânica quântica terá a forma

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{k}{2}\hat{x}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{k}{2}x^2, \quad (6.26)$$

em que m é a massa da partícula. A equação de Schrödinger para o sistema é

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) + \frac{k}{2}x^2\Psi(x,t) \quad (6.27)$$

e a equação de Schrödinger independente do tempo tem a forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{k}{2}x^2\psi(x) = E\psi(x). \quad (6.28)$$

A equação (6.28) não é uma equação com coeficientes constantes. Várias técnicas podem se usadas para encontrar os valores do parâmetro E para os

²⁰O que é oscilação pequena na mecânica quântica? O assunto é interessante e importante, mas foge do contexto desta disciplina introdutória.

quais a equação (6.28) possui soluções normalizáveis e, também, para encontrar as soluções. Apresentaremos um desses métodos que leva rapidamente às respostas e revela aspectos algébricos interessantes do problema.

6.4.2 O método algébrico

Usaremos o *método algébrico*²¹ para resolver o problema do oscilador harmônico.

Fatoração do hamiltoniano. O primeiro passo na aplicação do método é a fatoração do hamiltoniano. Reescrevemos o hamiltoniano (6.26) na forma

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

A expressão entre parênteses é uma soma de quadrados. A função hamiltoniana da mecânica clássica,

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

é facilmente representada na forma de um produto:

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

Isto é possível porque as variáveis x e p comutam. Os operadores \hat{x} e \hat{p} da mecânica quântica não comutam. Porém, vamos definir o operador

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (m\omega\hat{x} + i\hat{p}) \quad (6.29)$$

e o hermitiano conjugado de \hat{a}

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (m\omega\hat{x} - i\hat{p}). \quad (6.30)$$

²¹Ver, por exemplo, GRIFFITHS, D. J. *Mecânica Quântica*. São Paulo: Pearson, 2011, p. 31.

Calculando o produto $\hat{a}^\dagger \hat{a}$, encontramos

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

logo

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}). \quad (6.31)$$

Operadores de escada. As propriedades de \hat{a} e \hat{a}^\dagger fazem desses operadores objetos muito úteis no estudo do oscilador harmônico. O cálculo direto do comutador desses operadores mostra que

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1. \quad (6.32)$$

Esta relação e a representação (6.31) são usadas para exprimir o comutador de \hat{a} com \hat{H} :

$$\begin{aligned}[\hat{a}, \hat{H}] &= \left[\hat{a}, \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \right] = \hbar\omega \left[\hat{a}, \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right] = \hbar\omega [\hat{a}, \hat{a}^\dagger \hat{a}] \\ &= \hbar\omega (\hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a} - \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}) = \hbar\omega [(\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1) \hat{a} - \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}] = \hbar\omega \hat{a}.\end{aligned}$$

De modo análogo, calculamos o comutador $[\hat{a}^\dagger, \hat{H}]$. As relações de comutação

$$[\hat{a}, \hat{H}] = \hbar\omega \hat{a}, \quad [\hat{a}^\dagger, \hat{H}] = -\hbar\omega \hat{a}^\dagger \quad (6.33)$$

fazem dos operadores \hat{a} , \hat{a}^\dagger *operadores de escada*. Suponhamos que ψ é uma autofunção de \hat{H} associada a um dado autovalor E . Aplicando o operador hamiltoniano à função $\hat{a}\psi$, temos

$$\begin{aligned}\hat{H}(\hat{a}\psi) &= (\hat{H}\hat{a})\psi = (\hat{a}\hat{H} + [\hat{H}, \hat{a}])\psi = (\hat{a}\hat{H} - \hbar\omega\hat{a})\psi \\ &= \hat{a}(E\psi) - \hbar\omega\hat{a}\psi = (E - \hbar\omega)\psi.\end{aligned} \quad (6.34)$$

Como interpretar essa relação? Isso depende das propriedades da função $\hat{a}\psi$ que, em princípio, poderia ser

- (a) uma função não normalizável;
- (b) uma função normalizável (ou, seja, uma função quadrado-integrável e para a qual a integral do quadrado do módulo não se anula);
- (c) a função zero.

Um raciocínio simples mostra, que a primeira opção nunca se realiza para as autofunções do hamiltoniano (6.26). No caso (b), a equação (6.34) diz que $E - \hbar\omega$ é um autovalor de \hat{H} e que $\hat{a}\psi$ é uma autofunção associada a esse autovalor. O operador \hat{a} é chamado *operador de abaixamento* porque, quando aplicado a uma autofunção de \hat{H} , ele, geralmente, transforma essa função em uma autofunção associada a um autovalor menor. Porém, não se pode excluir a possibilidade (c), $\hat{a}\psi = 0$, equivalente à equação

$$\frac{d}{dx}\psi + \frac{m\omega}{\hbar}x\psi = 0. \quad (6.35)$$

A solução geral desta equação tem a forma

$$\psi(x) = Ae^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}, \quad (6.36)$$

onde A é uma constante arbitrária. Aplicando o hamiltoniano à função (6.36), temos

$$\hat{H}\psi = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \psi = \frac{1}{2} \hbar\omega \psi. \quad (6.37)$$

Logo,

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega \quad (6.38)$$

é um autovalor de \hat{H} . Não é difícil mostrar que E_0 é o *menor* autovalor de \hat{H} . O estado determinado de menor energia representado pela função normalizada

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \quad (6.39)$$

é o *estado fundamental* do oscilador harmônico.

De modo análogo, podemos determinar as propriedades do operador \hat{a}^\dagger . Suponhamos que ψ é uma autofunção associada a um dado autovalor E . Então

$E + \hbar\omega$ também é um autovalor de \hat{H} e $\hat{a}^\dagger\psi$ é uma autofunção associada a este autovalor. O operador \hat{a}^\dagger é chamado *operador de levantamento*.

Enquanto existe um autovalor mínimo do hamiltoniano, não existe autovalor máximo. Com efeito, se existisse um autovalor máximo, o operador de levantamento \hat{a}^\dagger , quando aplicado à respectiva autofunção, daria zero,

$$\hat{a}^\dagger\psi = 0. \quad (6.40)$$

Porem, nenhuma função normalizável satisfaz a eq. (6.40). Logo, não existe autovalor máximo.

6.4.3 Espectro e autofunções

O espectro do hamiltoniano do oscilador harmônico é, então, um conjunto infinito de autovalores *igualmente espaçados*,

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}, \quad E_1 = \hbar\omega + \frac{\hbar\omega}{2}, \dots,$$

ou

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (6.41)$$

Ressaltamos que o estado fundamental corresponde ao valor zero do número quântico n . O estado correspondente a $n = 1$ é o *primeiro estado excitado*, etc.

Os operadores de levantamento \hat{a}^\dagger e abaixamento \hat{a} permitem “movimentos” para cima e para baixo ao longo dessa “escada”.

Energia de ponto zero A energia do estado fundamental (o valor mais baixo da energia do oscilador, segundo a mecânica quântica) E_0 é positiva. Notamos que na mecânica clássica a energia do estado fundamental do oscilador (a partícula está em repouso na posição de equilíbrio) é igual a zero.

Autofunções. Uma autofunção associada ao autovalor E_n obteremos aplicando n vezes o operador de levantamento \hat{a}^\dagger à autofunção ψ_0 . Então, uma função normalizada representando o n -ésimo estado do oscilador será dada por

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{\langle (\hat{a}^\dagger)^n \psi_0 | (\hat{a}^\dagger)^n \psi_0 \rangle}} (\hat{a}^\dagger)^n \psi_0.$$

Usando a relação de comutação (6.32), podemos mostrar que

$$\langle (\hat{a}^\dagger)^n \psi_0 | (\hat{a}^\dagger)^n \psi_0 \rangle = n!.$$

Logo,

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n \psi_0. \quad (6.42)$$

Podemos encontrar a forma explícita das autofunções. Primeiro, fazendo a mudança da variável,

$$x = \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{1/2} \xi,$$

obteremos

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(m\omega x - \hbar \frac{d}{dx} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{\xi^2/2} \left(-\frac{d}{d\xi} \right) e^{-\xi^2/2}.$$

Aplicando o operador $\frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n$ à autofunção

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

temos

$$\begin{aligned} \psi_n &= \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n \Psi_0 \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n \cdot n!}} e^{\xi^2/2} \left(-\frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\xi^2/2} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\xi^2/2} \\ &= \frac{\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4}}{\sqrt{2^n \cdot n!}} e^{\xi^2/2} \left(-\frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\xi^2} \\ &= \frac{\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4}}{\sqrt{2^n \cdot n!}} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi), \end{aligned} \quad (6.43)$$

em que

$$H_n(\xi) = e^{\xi^2} \left(-\frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\xi^2} \quad (6.44)$$

é, um polinômio chamado *polinômio de Hermite*²² de grau n . Finalmente,

$$\psi_n(x) = \frac{\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}}{\sqrt{2^n \cdot n!}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} H_n\left(\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x\right). \quad (6.45)$$

Exemplo 6.5. Encontraremos a autofunção do hamiltoniano que representa o segundo estado excitado do oscilador harmônico. Substituindo na eq. (6.45) o polinômio de Hermite de grau dois,

$$H_2(\xi) = e^{\xi^2} \left(-\frac{d}{d\xi}\right)^2 e^{-\xi^2} = 4\xi^2 - 2. \quad (6.46)$$

obtemos

$$\psi_2(x) = \left(\frac{m\omega}{4\pi\hbar}\right)^{1/4} \left(2\frac{m\omega}{\hbar}x^2 - 1\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}. \quad (6.47)$$

Propriedades das autofunções. Autofunções de um operador hermitiano associados a autovalores diferentes são ortogonais²³, logo

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(x)\psi_n(x) dx \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(x)\psi_n(x) dx = 0, \quad \text{se } m \neq n. \quad (6.48)$$

Em cálculos que se referem ao oscilador harmônico é desejável, sempre que possível, evitar o uso da forma explícita das autofunções. Por exemplo, verificar a normalização da função ψ_2 , eq. (6.47) usando as fórmulas do Apêndice já exige um cálculo meio extenso. É muito mais simples usar as relações de comutação (6.32). A forma explícita das funções é útil em problemas que envolvem a densidade de probabilidade. Apresentaremos (sem demonstração) algumas propriedades das autofunções.

1. Os polinômios de Hermite de grau par são funções pares e os de grau ímpar são funções ímpares. Decorre da eq. (6.45) que, para todo x ,

$$\psi_n(-x) = (-1)^n \psi_n(x). \quad (6.49)$$

²²Os polinômios definidos pela eq. (6.44) são “polinômios de Hermite físicos”. Na teoria de probabilidade são usados “polinômios de Hermite probabilísticos” que podem ser obtidos dos “polinômios físicos” por um redimensionamento.

²³O teorema foi citado - sem demonstração - na aula anterior.

2. A densidade de probabilidade

$$P_n(x) = |\psi_n(x)|^2$$

é uma função par para todo n .

A função ψ_0 não tem nós, isto é, ela não se anula para nenhum x . A função ψ_1 possui um nó (na origem), A função ψ_n possui n nós. Como $\psi_n(x) \rightarrow 0$ quando $x \rightarrow \pm\infty$, a função ψ_n tem $n + 1$ extremos relativos. Consequentemente, em $n + 1$ pontos ocorrem valores máximos relativos da densidade de probabilidade P_n .

6.4.4 Valores esperados

O operador associado a um variável sempre pode ser expresso em termos dos operadores \hat{x} e \hat{p} . Por outro lado, \hat{x} e \hat{p} podemos exprimir em termos de \hat{a} e \hat{a}^\dagger , invertendo as fórmulas (6.29), (6.30):

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}). \quad (6.50)$$

O valor esperado de um observável em um estado determinado de energia podemos calcular usando a definição (6.42) e a relação de comutação (6.32). Dependendo do estado e do observável, o cálculo pode ser complicado, mas é geralmente, mais simples do que o baseado na forma explícita das autofunções (6.45).

Exemplo 6.6. Calcularemos o valor esperado da energia cinética

$$K = \frac{p^2}{2m}$$

no estado fundamental do oscilador harmônico. Usando a segunda das equações (6.50), temos

$$\hat{p}^2 = -\frac{\hbar m\omega}{2} (\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger \hat{a} - \hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a} \hat{a}),$$

logo,

$$\begin{aligned}\langle K \rangle &= -\frac{\hbar\omega}{4} \langle \psi_0 | \left(\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger \hat{a} - \hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a} \hat{a} \right) \psi_0 \rangle \\ &= -\frac{\hbar\omega}{4} \langle \psi_0 | \left(\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger - \hat{a} \hat{a}^\dagger \right) \psi_0 \rangle\end{aligned}$$

pois \hat{a} anula ψ_0 . Por outro lado,

$$\langle \psi_0 | \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \psi_0 \rangle = \langle \hat{a} \psi_0 | \hat{a}^\dagger \psi_0 \rangle = 0,$$

portanto

$$\langle K \rangle = \frac{\hbar\omega}{4} \langle \Psi_0 | \hat{a} \hat{a}^\dagger \psi_0 \rangle = \frac{\hbar\omega}{4} \langle \psi_0 | \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1 \right) \psi_0 \rangle = \frac{\hbar\omega}{4}.$$

A energia cinética é a metade da energia do sistema.

6.5 Conclusões

- As autofunções do hamiltoniano (as soluções quadrado-integráveis da equação de Schrödinger independente do tempo) representam estados ligados do sistema.
- O hamiltoniano de uma partícula em um poço quadrado infinito possui somente espectro discreto e não possui espectro contínuo.
- Os autovalores do hamiltoniano para uma partícula em um poço quadrado infinito são proporcionais aos quadrados dos valores inteiros positivos do número quântico n .
- E energia de ponto zero (a energia do estado fundamental do sistema é positiva).
- O hamiltoniano do oscilador harmônico possui somente espectro discreto (não possui espectro contínuo).
- Os autovalores do hamiltoniano do oscilador harmônico são igualmente espaçados.

- A energia de ponto zero do oscilador harmônico é igual a $\hbar\omega/2$.

6.6 Resumo

Lembramos o conceito de estado ligado na mecânica clássica. Explicamos como esse conceito é alterado na mecânica quântica. Definimos o poço quadrado infinito como um limite do poço de potencial quadrado. Resolvemos a equação de Schrödinger independente do tempo, encontramos os autovalores e as autofunções do hamiltoniano. Apresentamos um exemplo de cálculo de valor esperado. Introduzimos o oscilador harmônico na mecânica quântica. Introduzimos o hamiltoniano e os operadores de escada. Resolvemos a equação de Schrödinger independente do tempo pelo método algébrico. Apresentamos um exemplo de cálculo de valor esperado.

6.7 Glossário

- energia de ponto zero
- estado excitado
- estado fundamental
- operador de abaixamento
- operadores de escada
- operador de levantamento
- poço quadrado
- poço quadrado infinito

6.8 Atividades

ATIV. 6.1. Mostre que a única função que satisfaz a equação (6.7) e as condições de contorno (6.6) e a função $\psi(x) \equiv 0$.

ATIV. 6.2. Ache a equação que a constante B_n na eq. (6.16) precisa satisfazer para que a função $\psi_n(x)$ seja uma função normalizada.

ATIV. 6.3. Use a relação de comutação

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

e a definição dos operadores de escada \hat{a} , \hat{a}^\dagger para mostrar a relação de comutação (6.32).

ATIV. 6.4. Deduza a relação de comutação

$$[\hat{a}^\dagger, \hat{H}] = -\hbar\omega\hat{a}^\dagger.$$

6.9 Referências

1. EISBERG, R.; RESNICK, R. *Física Quântica: Átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas*. Rio de Janeiro: Campus, 1979.
2. GRIFFITHS, D. J. *Mecânica Quântica*. São Paulo: Pearson, 2011.
3. GREINER, W. *Quantum Mechanics: An Introduction*. Berlin: Springer-Verlag, 2000.