

# Polinômios de Hermite

## METAS

Introduzir os polinômios de Hermite, soluções da equação diferencial de Hermite, e explorar suas propriedades básicas. Analisar seu uso na resolução do problema do oscilador harmônico quântico.

## OBJETIVOS

Ao final desta aula, o aluno deverá ser capaz de: aplicar propriedades dos polinômios de Hermite para calcular valores esperados de grandezas quânticas e probabilidades de transição entre estados; efetuar cálculos com os operadores de criação e aniquilação.

## PRÉ-REQUISITOS

Operadores em espaços métricos, equações diferenciais ordinárias, teoria de Sturm-Liouville.

### INTRODUÇÃO

Há poucos problemas exatamente solúveis em mecânica quântica e, por isso mesmo, eles costumam ser tratados extensiva e repetidamente em cursos a nível de graduação de estrutura da matéria, ou introdução à física quântica, e em cursos de pós-graduação de mecânica quântica, mais formais e com maior aprofundamento matemático. Um desses problemas, que resolveremos detalhadamente nesta aula, consiste na solução da equação de Schrödinger para o potencial do oscilador harmônico unidimensional quântico, ou seja, envolve a determinação explícita das autofunções e autovalores daquela equação diferencial.

## 7.1 Oscilador Harmônico Quântico

Classicamente, uma força de restituição harmônica é dada pela expressão:

$$F = -kx;$$

diz-se que a força nesse caso obedece à lei de Hooke. Um sistema físico onde isso se verifica é o de um corpo preso numa mola, e que pode oscilar num plano horizontal sem atrito. Tal sistema físico é conhecido como o oscilador harmônico simples. Aqui, vamos nos restringir ao caso unidimensional: o corpo se move apenas em numa direção, podendo sua posição ser dada em termos de uma única variável  $x$ , que é o deslocamento em relação à posição de equilíbrio.

Lembrando que a força deriva de uma energia potencial  $V$ ,

$$F = -\frac{dV}{dx}$$

e, integrando,

$$V = -\int^x F dx = \frac{1}{2} k x^2.$$

Ainda classicamente, a função Hamiltoniana do problema do oscilador harmônico (que representa neste caso a energia mecânica do corpo preso na mola) é:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} k x^2,$$

e esse mesmo objeto é usado em mecânica quântica, evidentemente, após uma série de reinterpretações.

A transição da mecânica clássica para o formalismo quântico é feita na prática com o auxílio da "receita" seguinte.

Posição ( $x$ ) e momento linear ( $p$ ) são substituídos por operadores  $\hat{x}$  e  $\hat{p}$ , respectivamente, que representam essas grandezas físicas. Na representação de Schrödinger da mecânica quântica, tomamos  $\hat{x}$  como um operador de multiplicação,

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

e  $\hat{p}$  um operador diferencial,

$$\hat{p}\psi(x) = -i\hbar \frac{d}{dx} \psi(x).$$

Aqui,  $\hbar = h/2\pi$ ,  $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$  J.s é a constante de Planck.

Com essas alterações, passamos da função Hamiltoniana  $H$  ao operador Hamiltoniano  $\hat{H}$  para o oscilador harmônico unidimensional quântico,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2$$

e a equação de Schrödinger independente do tempo para esse problema, que nada mais é que uma equação de autovalores para  $\hat{H}$ , do tipo  $\hat{H}\psi = E\psi$ , se escreve:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2 \right] \psi(x) = E\psi(x).$$

As constantes  $k$  (a "constante da mola" no caso clássico) e  $\omega$  (frequência angular de oscilação) se relacionam,

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

e essa relação continua válida na versão quântica.

Façamos uma mudança de variáveis,

$$x \longrightarrow \rho = \alpha x, \quad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

e vamos renomear a variável dependente,

$$\psi(x) = \Phi(\rho).$$

Esta mudança de variável  $x \rightarrow \rho$  é o que se costuma chamar uma "mudança de escala", efetuada apenas para eliminar as constantes na equação de Schrödinger.

Em termos de  $\rho$ , a equação de Schrödinger se escreve:

$$\left[ -\frac{d^2}{d\rho^2} + \rho^2 \right] \Phi_\lambda(\rho) = \lambda \Phi_\lambda(\rho) \quad (7.1)$$

onde introduzimos o parâmetro adimensional

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}. \quad (7.2)$$

Há várias formas de se resolver essa equação diferencial 7.1. Escolhemos usar aqui um método um tanto artificioso, indireto, mas que envolve, em sua essência, os operadores de criação e aniquilação, que têm um emprego importante, por exemplo, na teoria quântica de campos.

Note que o operador diferencial contido entre os colchetes na equação de Schrödinger 7.1, pode ser colocado em duas formas alternativas:

$$-\frac{d^2}{d\rho^2} + \rho^2 = \left(\rho - \frac{d}{d\rho}\right) \left(\rho + \frac{d}{d\rho}\right) + 1 \quad (7.3)$$

ou

$$-\frac{d^2}{d\rho^2} + \rho^2 = \left(\rho + \frac{d}{d\rho}\right) \left(\rho - \frac{d}{d\rho}\right) - 1. \quad (7.4)$$

Para verificarmos tais relações envolvendo operadores diferenciais, é mais seguro incluir uma função de onda mais à direita. Na verdade, um operador diferencial por si só não significa muito, o que faz sentido é a aplicação do operador sobre uma dada função. Tomamos o lado direito da primeira forma, (7.3), aplicado sobre uma função  $\psi$  arbitrária,

$$\begin{aligned} \left(\rho - \frac{d}{d\rho}\right) \left(\rho + \frac{d}{d\rho}\right) \psi + 1 \psi &= \\ \left(\rho - \frac{d}{d\rho}\right) \left(\rho \psi + \frac{d\psi}{d\rho}\right) + \psi &= \\ \rho^2 \psi + \rho \frac{d\psi}{d\rho} - \frac{d}{d\rho} (\rho \psi) - \frac{d^2\psi}{d\rho^2} + \psi \end{aligned}$$

mas observe que, no terceiro termo, temos que calcular a derivada de um produto:

$$\frac{d}{d\rho} (\rho \psi) = \psi + \rho \frac{d\psi}{d\rho}.$$

Inserindo isso em nosso cálculo, chegamos a:

$$\rho^2 \psi + \rho \frac{d\psi}{d\rho} - \psi - \rho \frac{d\psi}{d\rho} - \frac{d^2\psi}{d\rho^2} + \psi = \left(\rho^2 - \frac{d^2}{d\rho^2}\right) \psi$$

que é igual ao lado esquerdo de (7.3), como queríamos provar.

A segunda forma (7.4) se prova de modo similar.

Retomamos a equação (7.3), mas agora com o operador entre colchetes escrito na forma (7.3),

$$\left(\rho - \frac{d}{d\rho}\right) \left(\rho + \frac{d}{d\rho}\right) \Phi_\lambda + \Phi_\lambda = \lambda \Phi_\lambda$$

ou, rearranjando os termos,

$$\left(\rho - \frac{d}{d\rho}\right) \left(\rho + \frac{d}{d\rho}\right) \Phi_\lambda = (\lambda - 1) \Phi_\lambda.$$

Vamos reescrever isso, apenas mudando o rótulo para  $\lambda'$ ,

$$\left(\rho - \frac{d}{d\rho}\right) \left(\rho + \frac{d}{d\rho}\right) \Phi_{\lambda'} = (\lambda' - 1) \Phi_{\lambda'}. \quad (7.5)$$

Fazendo algo similar, mas usando a forma (7.4) para o operador, teremos:

$$\left(\rho + \frac{d}{d\rho}\right) \left(\rho - \frac{d}{d\rho}\right) \Phi_\lambda = (\lambda + 1) \Phi_\lambda. \quad (7.6)$$

Aplicando o operador  $(\rho - d/d\rho)$  pela esquerda, nos dois lados da equação (7.6), obteremos:

$$\left(\rho - \frac{d}{d\rho}\right) \left(\rho + \frac{d}{d\rho}\right) \underbrace{\left(\rho - \frac{d}{d\rho}\right) \Phi_\lambda}_{\text{grifada}} = (\lambda + 1) \underbrace{\left(\rho - \frac{d}{d\rho}\right) \Phi_\lambda}_{\text{grifada}} \quad (7.7)$$

e, comparando com a equação (7.5), notamos que a função grifada em (7.7) corresponde a:

$$\left(\rho - \frac{d}{d\rho}\right) \Phi_\lambda = N_{\lambda'} \Phi_{\lambda'} \quad (7.8)$$

onde  $N_{\lambda'}$  é uma constante de normalização. Note que o valor de  $\lambda'$  é determinado pela igualdade do autovalor  $(\lambda + 1)$  da equação (7.7) com o autovalor  $(\lambda' - 1)$  da equação (7.5),

$$\lambda + 1 = \lambda' - 1$$

ou

$$\lambda' = \lambda + 2.$$

Assim,

$$\left(\rho - \frac{d}{d\rho}\right) \Phi_\lambda = N_{\lambda+2} \Phi_{\lambda+2}. \quad (7.9)$$

A equação (7.9), traduzida em palavras, nos diz que o operador  $(\rho - d/d\rho)$  quando aplicado a uma autofunção  $\Phi_\lambda$  eleva o índice de duas unidades, e a equação funciona portanto como uma relação de recorrência.

Vamos obter a primeira autofunção, da equação de autovalores (7.1). Para isso, tomamos  $\lambda' = 1$  na equação (7.5),

$$\left(\rho - \frac{d}{d\rho}\right) \left(\rho + \frac{d}{d\rho}\right) \Phi_1 = 0.$$

Esta é uma equação diferencial de segunda ordem; uma solução possível dela é dada pela solução de:

$$\left(\rho + \frac{d}{d\rho}\right) \Phi_1 = 0.$$

A solução desta última, pelas técnicas ensinadas em nossa primeira aula, dá:

$$\Phi_1(\rho) = A e^{-\rho^2/2}$$

onde  $A$  é a constante de normalização,

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

pois

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

( $\alpha > 0$ ).

Observe que normalizamos  $\Phi_1$  em termos da variável  $x$ , e não da variável  $\rho$ .

O autovalor correspondente a  $\Phi_1$  é (pondo  $\lambda = 1$  na equação (7.2)):

$$E_1 = \frac{\hbar\omega}{2};$$

diz-se que a autofunção  $\Phi_1$  corresponde ao estado fundamental do oscilador, que é o estado de energia mais baixa.

Partindo da função  $\Phi_1$ , e usando a relação de recorrência (7.9), podemos obter as outras autofunções, por exemplo  $\Phi_3$ ,

$$\Phi_3 = C_3 \left( \rho - \frac{d}{d\rho} \right) e^{-\rho^2/2}$$

e, generalizando, obteremos as autofunções de índices ímpares:

$$\Phi_{2n+1} = C_{2n+1} \left( \rho - \frac{d}{d\rho} \right)^n e^{-\rho^2/2}$$

com a constante de normalização  $C_{2n+1}$  sendo determinada a partir da condição:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} [\Phi_{2n+1}]^2 dx = 1.$$

Você notou que obtivemos apenas índices ímpares, nesse procedimento. Os índices pares não foram usados. Vamos então "renumerar" as autofunções e autovalores, da seguinte forma: o que era  $2n+1$  passa a ser  $n$  (1 passa a ser 0, 3 vira 1, etc.).

Em particular, os autovalores passam a ser escritos:

$$E_\lambda = \frac{\lambda \hbar \omega}{2} = \frac{(2n+1) \hbar \omega}{2} = E_n.$$

As funções  $\Phi_\lambda(\rho)$  passarão a ser escritas:

$$\Phi_n(\rho) = C_n e^{-\frac{\rho^2}{2}} H_n(\rho)$$

onde

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

são os polinômios de Hermite (esta última relação pode ser considerada a definição dessas funções).

Explicitamente, então, lembrando que  $\rho = \sqrt{m\omega/\hbar} x$ ,

$$\psi_n(x) = C_n e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)$$

são as autofunções do oscilador harmônico unidimensional quântico, associadas aos autovalores:

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



## 7.2 Propriedades dos Polinômios de Hermite

Falaremos um pouco mais sobre os polinômios de Hermite, agora desde outro ponto de vista. Eles são soluções da equação diferencial de Hermite,

$$\ddot{y} - 2x \dot{y} + 2n y = 0.$$

Notamos que o operador diferencial associado à essa equação diferencial não é de Sturm-Liouville, pois o coeficiente do segundo termo não é igual à derivada do coeficiente do primeiro termo. É bastante interessante que o operador em questão seja de Sturm-Liouville, ou seja autoadjunto, pois terá as seguintes características: possuirá autovalores reais; suas autofunções serão duas a duas ortogonais, e formarão um conjunto completo.

As soluções da equação diferencial de Hermite, que são os polinômios  $y = H_n(x)$  não são duas a duas ortogonais segundo o produto escalar usual,

$$(H_n, H_m) = \int_{-\infty}^{+\infty} H_n(x) H_m(x) dx.$$

O que fazemos, então, é introduzir mudanças de modo a transformar o operador em um do tipo Sturm-Liouville.

Uma transformação atende essa exigência:

$$\varphi_n(x) = e^{-\frac{x^2}{2}} y(x)$$

pois, substituída na equação de Hermite, transforma-a em:

$$\ddot{\varphi} + (2n + 1 - x^2) \varphi = 0$$

que é claramente de Sturm-Liouville. Mas essa é exatamente a equação de Schrödinger para o oscilador harmônico, que tratamos na seção anterior. Voltamos, portanto, à solução anteriormente discutida.

Note que o produto escalar para as funções  $\varphi$  se escreve:

$$(\varphi_n, \varphi_m) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) dx.$$

e essas sim serão duas a duas ortogonais. Podemos ver essa relação como sendo a relação de ortogonalidade para os polinômios de

Hermite, mas observe que existe uma função peso, dada pela Gaussiana  $e^{-x^2}$ .

A relação de ortonormalidade completa, é escrita:

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

A função geratriz para os polinômios de Hermite é:

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

e algumas relações de recorrência podem ser deduzidas a partir dela, como

$$H_{n+1}(x) = 2x H_n(x) - 2n H_{n-1}(x),$$

$$H'_n(x) = 2n H_{n-1}(x).$$

Os polinômios de Hermite têm uma paridade bem definida, obedecendo:

$$H_n(-x) = (-1)^n H_n(x).$$

Uma forma alternativa de calcular os vários polinômios é:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d}{dx^n} e^{-x^2}. \quad (7.10)$$

Os operadores

$$\left( \rho - \frac{d}{d\rho} \right), \quad \left( \rho + \frac{d}{d\rho} \right),$$

a menos de constantes, são chamados de operadores de elevação e diminuição de índices, já que seu efeito é o de passar de uma autofunção a outra, assim:

$$a^\dagger \Phi_n = \Phi_{n+1}$$

$$a \Phi_n = \Phi_{n-1}$$

e, se  $n = 1$ ,  $a \Phi_n = 0$ ;

$$a^\dagger = \beta_1 \left( \rho - \frac{d}{d\rho} \right)$$

e

$$a = \beta_2 \left( \rho + \frac{d}{d\rho} \right).$$

No contexto da teoria quântica de campos, o campo eletromagnético é quantizado, e os pequenos "tijolos" de que a radiação eletromagnética é constituída são os fótons (da mesma forma que a matéria é constituída de "blocos fundamentais", que são os átomos). Mas, quando o campo eletromagnético interage com a matéria, fótons podem ser absorvidos (como por exemplo no efeito fotoelétrico) ou emitidos (como no caso da produção dos raios X, ou "brehmstrahlung"), de modo que às vezes o número total de fótons muda. Matematicamente, usamos os operadores de criação e aniquilação, semelhantes a  $a^\dagger$  e  $a$ , para descrever tais processos. Aliás, o símbolo  $^\dagger$  não é na verdade um lembrete que se "soma" um ao índice, ele indica que  $a^\dagger$  é o operador adjunto de  $a$ . E  $a$  é o adjunto de  $a^\dagger$ .

Para finalizar, veja alguns exemplos de polinômios de Hermite:

$$\begin{aligned} H_0(x) &= 1; & H_1(x) &= 2x; & H_2(x) &= 4x^2 - 2 \\ H_3(x) &= 8x^3 - 12x; & H_4(x) &= 16x^4 - 48x^2 + 12. \end{aligned}$$

### ATIVIDADES

1. Calcule, com o auxílio da relação de normalização dos polinômios de Hermite, as constantes  $C_n$  que aparecem na expressão das autofunções  $\psi_n$  do oscilador harmônico quântico.
2. Calcule o polinômio  $H_2(x)$  usando a relação (7.10).
3. Calcule as constantes  $\beta_1, \beta_2$  que apareceram na definição dos operadores de criação e aniquilação  $a^\dagger$  e  $a$ .
4. Mostre, sem se preocupar com a questão dos domínios dos operadores, que  $a^\dagger$  é o adjunto de  $a$ .
5. Calcule a probabilidade de transição do estado  $m$  ao estado  $n$  de um oscilador harmônico. Ela é dada por:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) dx.$$

Mostre que essa integral é nula exceto quando  $m = n \pm 1$ .



## COMENTÁRIO SOBRE AS ATIVIDADES

A resposta do problema 1, para você conferir:

$$C_n = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} (2^n n!)^{-1/2}.$$

No problema 4, você obtém o adjunto de um operador  $A$  com o auxílio da expressão  $(A\varphi, \psi) = (\varphi, A^\dagger\psi)$  para quaisquer  $\varphi, \psi$ .

O produto escalar é dado por  $(\varphi, \psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^* \psi dx$ .

No problema 5, para a relação ficar mais parecida com a relação de ortonormalização dos polinômios de Hermite, use a relação de recorrência em que aparece  $xH_n(x)$ , que deve ser escrito como uma soma envolvendo  $H_{n+1}$  e  $H_{n-1}$ .

## CONCLUSÃO

Vimos nesta aula as propriedades básicas dos polinômios de Hermite, em particular chamamos a atenção para a relação de ortogonalidade, que permite calcular valores esperados de operadores representando grandezas físicas no domínio microscópico.

## RESUMO

Nesta aula você tomou contato com os polinômios de Hermite, que aparecem na solução do problema do oscilador harmônico quântico.

## PRÓXIMA AULA

Na próxima aula estudaremos os polinômios de Laguerre, funções especiais que aparecem na solução da equação de Schrödinger para átomos hidrogenóides.

## REFERÊNCIAS

AR KEN, George; WEBER Hans. Física Matemática. Rio de Janeiro: Elsevier, 2007.

BUTKOV, Eugene. Física Matemática. Rio de Janeiro: Guanabara 2, 1978.

