Notas de Aula de Física Quântica (BCK0103)

Prof. Dr. Marcelo Augusto Leigui de Oliveira

Oscilador harmônico simples unidimensional

I. OSCILADOR HARMÔNICO SIMPLES

A. *Caso clássico*

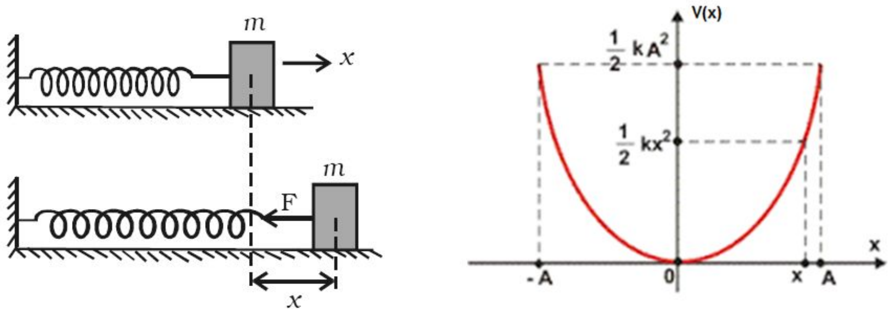

Figura 1: À esquerda: sistema massa-mola (sem atrito); à direita: o potencial do oscilador harmônico simples.

Seja um corpo de massa m preso a uma mola de constante elástica k, sujeito a uma força dada pela lei de Hooke, podemos calcular o potencial $V(x)$:

$$F(x) = -kx \Rightarrow V(x) = -\int_0^x F(x)\,dx = \int_0^x kx\,dx = \frac{1}{2}kx^2$$

Por outro lado, da segunda lei de Newton, a equação de movimento é:

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -kx \Rightarrow \frac{d^2x}{dt^2} + \frac{k}{m}x = 0 \Rightarrow \frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2 x = 0,$$

onde definimos a frequência angular $\omega = \sqrt{k/m}$.

As funções que satisfazem à esta equação diferencial são senos e cossenos de $\omega t + \varphi$, pois:

$$x(t) = A\,\cos(\omega t + \varphi) + B\,\mathrm{sen}(\omega t + \varphi) \Rightarrow$$

$$\frac{dx(t)}{dt} = -\omega A\,\mathrm{sen}(\omega t + \varphi) + \omega B\,\cos(\omega t + \varphi) \Rightarrow$$

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2} = -\omega^2 A\,\cos(\omega t + \varphi) - \omega^2 B\,\mathrm{sen}(\omega t + \varphi) = -\omega^2 x(t).$$

Se E é a energia total da partícula:

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \Rightarrow E = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2,$$

onde A é a *amplitude* da oscilação. Agora, a energia total é a soma da energia cinética e a energia potencial:

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \Rightarrow v = \sqrt{\frac{2}{m}\left(E - \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)}$$

Classicamente, medimos a probabilidade da partícula estar entre x e $x + dx$ proporcionalmente ao tempo gasto nesta posição, ou seja:

$$P(x)\,dx \propto dt = \frac{dx}{v} = \frac{dx}{\sqrt{\frac{2}{m}\left(E - \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)}}\text{ , com } E \geq 0.$$

B. *Caso quântico*

A equação de Schrödinger independente do tempo para o potencial do oscilador harmônico simples é:

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

Sua solução envolve uma matemática avançada que foge do escopo da nossa disciplina, portanto, vamos discutí-la apenas qualitativamente. Primeiramente, notemos que o potencial $V(x)$ é uma função par, assim o módulo quadrado da função de onda deve ter a mesma propriedade:

$$|\psi(x)|^2 = |\psi(-x)|^2 \Rightarrow \begin{cases} \psi(x) = +\psi(-x) & \text{(simétrica)} \\ \psi(x) = -\psi(-x) & \text{(antissimétrica)} \end{cases}$$

Na região limitada classicamente pela amplitude , o potencial $V(x)$ é menor que a energia total, então:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2\psi(x),\ \text{com } k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)] > 0,\ \text{em |x| < A.}$$

E, nesta região, a solução é uma **função oscilatória** da posição.

Na região para além da amplitude, o potencial $V(x)$ é maior que a energia total, então:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = +\alpha^2\psi(x),\ \text{com } \alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E] > 0,\ \text{em |x| > A.}$$

E, nesta região, a solução é uma **função exponencial decrescente** da posição.

Além disso, os valores permitidos de energia são:

$$\boxed{E_n = (n + 1/2)\hbar\omega},\ \ n = 0, 1, 2, ..., \tag{1}$$

com intervalo entre os níveis de: $\Delta E = \hbar\omega$. O nível de energia mais baixo — chamado *estado fundamental* — não é nulo: $E_0 = \hbar\omega/2$.

As soluções da equação de Schrödinger têm a forma:

$$\psi_n(x) = C_n e^{-m\omega^2x^2/2\hbar} H_n(x),$$

onde $H_n(x)$ são os *polinômios de Hermite*.

As soluções para os três primeiros níveis de energia são:

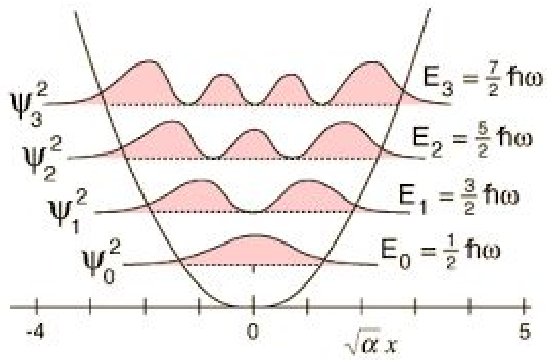

Figura 2: Funções de onda e níveis de energia quânticos do oscilador harmônico simples.

- $n = 0$: $\quad \psi_0(x) = A_0 e^{-m\omega^2 x^2/2\hbar}$
- $n = 1$: $\quad \psi_1(x) = A_1 \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x e^{-m\omega^2 x^2/2\hbar}$
- $n = 2$: $\quad \psi_2(x) = A_2 \left(1 - \frac{2m\omega x^2}{\hbar}\right) e^{-m\omega^2 x^2/2\hbar}$

Mostra-se também que:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(x)\, x\, \psi_n(x) dx \neq 0, \ \text{ para } n = m \pm 1, \tag{2}$$

o que implica que a radiação emitida ou absorvida por um oscilador harmônico simples possui uma **regra de seleção**:

$$\Delta n = \pm 1 \Rightarrow \Delta E = \pm \hbar\omega = \pm hf,$$

de forma equivalente às transições do corpo negro.

II. Exercícios

1. A energia de um oscilador harmônico linear é

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

onde m é a massa da partícula em movimento harmônico simples e ω é a frequência de oscilação.

(a) Mostre, usando a relação de incerteza $\Delta p \Delta x = \hbar/2$ (o mínimo valor do produto $\Delta p \Delta x$), que a energia média pode ser escrita como:

$$< E >= \frac{h^2}{32\pi^2 m < x^2 >} + \frac{1}{2}m\omega^2 < x^2 >;$$

(b) Mostre que a anergia mínima (ou energia do ponto zero) do oscilador harmônico linear é $\frac{1}{2}\hbar\omega$. Dica: minize E com relação a $< x^2 >$.

2. A expressão do operador hamiltoniano do oscilador harmônico é dada por:

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

onde o primeiro termo representa a energia cinética e o segundo a energia potencial. Sabendo que os estados do oscilador são ligados (e que $< p >= 0$ para estados ligados), deduza uma expressão para o valor esperado da energia em termos de Δp e de Δx. Dica: use também que, por simetria, $< x >= 0$.

Respostas:

1. (a) demonstração;
   (b) demonstração.
2. $E = \frac{\Delta p^2}{2m} + \frac{m\omega^2(\Delta x)^2}{2}$.