

MECÂNICA QUÂNTICA - AULA 9 - O OSCILADOR HARMÔNICO

De todos os modelos empregados na descrição dos fenômenos quânticos, dois são particularmente relevantes. Um deles, o spin (ou qubit), foi nosso principal guia nesta jornada através do mundo quântico, ao permitir que ilustrássemos de uma forma significativamente simples os pontos onde a nossa intuição clássica falhava e precisava ser revisitada. O outro modelo é o **oscilador harmônico**, que estudaremos nesta aula. É importante ter em mente que, diferentemente de um spin, um quark, ou um átomo de hidrogênio, o oscilador harmônico não representa um sistema em particular, mas sim um arcabouço matemático que pode ser utilizado para a compreensão de uma miríade de fenômenos.

Do ponto de vista pedagógico, o oscilador harmônico pode ser utilizado para ilustrar os conceitos que desenvolvemos durante o curso de uma maneira não-trivial. Do ponto de vista prático, ele possui aplicações importantes em quase todas as áreas da física moderna, por exemplo:

- * espectroscopia atômica e molecular;
- * física do estado sólido;
- * estrutura nuclear;
- * teoria quântica de campos;
- * supercordas;
- * óptica quântica;
- * mecânica estatística quântica;

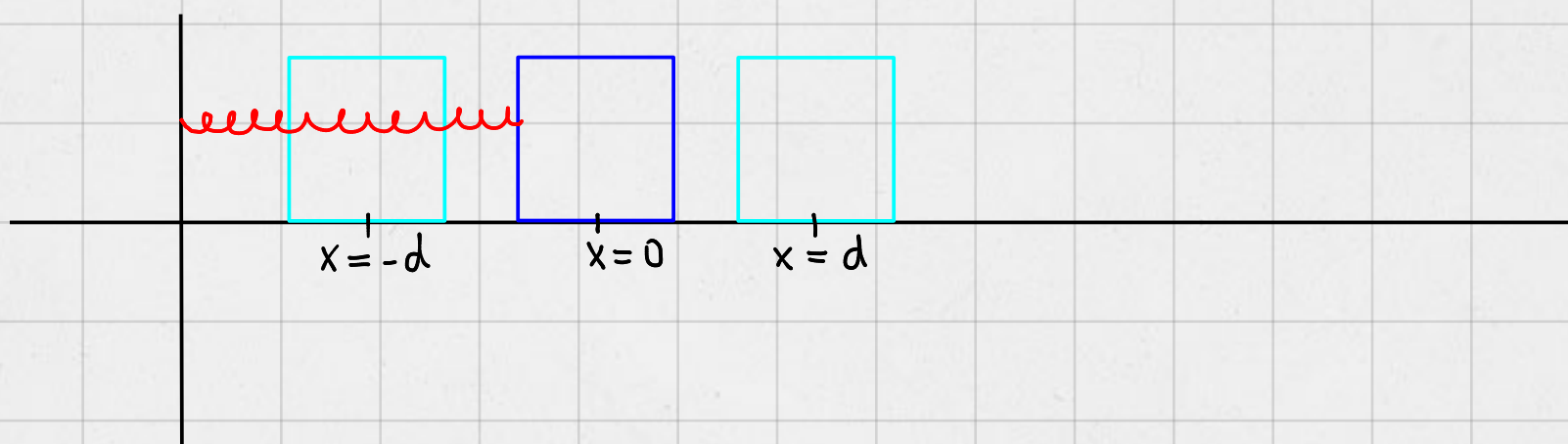
dentre muitos outros. A lista acima evidencia, que sistemas notadamente distintos admitem a mesma descrição matemática. Isso acontece porque quase qualquer função suficientemente suave pode ser aproximada por uma parábola com concavidade positiva nas proximidades de seus mínimos. Dessa forma, a função que descreve a energia da maioria dos sistemas

pele ser aproximada por uma parábola de uma variável que representa a distância ao ponto de equilíbrio. Conseqüentemente, quando perturbados, tais sistemas oscilam ao redor do ponto de equilíbrio.

9.1 - O Oscilador Harmônico Clássico

Naturalmente, o oscilador harmônico também constitui um modelo deveras importante no contexto clássico. Assim, antes de passarmos ao tratamento quântico, é fundamental que algumas características da contraparte clássica estejam devidamente claras.

Talvez o exemplo mais icônico de um oscilador harmônico clássico seja dado pelo movimento de um pequeno bloco de massa m preso numa das pontas de uma mola com constante elástica k sob pequenos deslocamentos de seu ponto de equilíbrio.



Uma mola ideal satisfaz a lei de Hooke, que afirma que a força exercida pela mola sob pequenas deformações é proporcional e contrária ao deslocamento a partir do ponto de equilíbrio, que tomamos sem perda de generalidade como $x=0$,

$$F = -kx.$$

Conseqüentemente, na ausência de atrito e resistência do ar, as trajetórias clássicas podem ser obtidas ao resolvermos a equação de Newton:

$$F = \dot{p},$$

com as condições iniciais adequadas. Neste caso,

$$m\ddot{x} = -kx \Rightarrow x(t) = A \cos(\omega t) + B \sin(\omega t),$$

onde $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ é a **frequência angular de oscilação** e as constantes A e B devem ser determinadas a partir das condições iniciais dadas.

Alternativamente, e tendo em vista a futura quantização do sistema, poderíamos ter empregado a descrição hamiltoniana para encontrar a equação de movimento. A hamiltoniana do oscilador harmônico pode ser facilmente obtida a partir de uma transformada de Legendre da lagrangiana correspondente. Recordamos que a lagrangiana é definida como a diferença entre as energias cinética e potencial do sistema, i.e.,

$$L = T - V.$$

Expressemos T e V em termos da **coordenada generalizada** x que empregamos para descrever a oscilação da massa m ao redor do ponto de equilíbrio $x=0$. Neste caso a energia cinética é simplesmente dada por:

$$T = \frac{1}{2} m \dot{x}^2.$$

Já a energia potencial é tal que seu gradiente é o oposto da força de Hooke:

$$V = \frac{k}{2} x^2 \Rightarrow -\partial_x V = -kx = F.$$

Logo,

$$L = T - V = \frac{1}{2} (m\dot{x}^2 - kx^2)$$

Para podermos efetuar a transformada de Legendre, precisamos encontrar o **momento canônico** associado à coordenada generalizada x :

$$p = \partial_{\dot{x}} \mathcal{L} = m\dot{x}.$$

Portanto, podemos reescrever a lagrangiana em função das **coordenadas canônicas** (x, p)

Como:

$$L = \frac{1}{2} \left[m \left(\frac{p}{m} \right)^2 - kx^2 \right] = \frac{p^2}{2m} - \frac{k}{2} x^2.$$

Conseqüentemente,

$$H = p\dot{x} - \mathcal{L} = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2} x^2,$$

ou em termos da frequência angular ω :

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

Note que no caso do oscilador harmônico a hamiltoniana coincide com a energia total,

$$H = T + V.$$

9.2 - A Descrição Quântica

Consideremos agora um análogo microscópico do sistema massa-mola analisado na seção anterior. Muitas moléculas são constituídas por dois átomos, um leve e um pesado. Naturalmente, existem forças mantendo tal molécula em equilíbrio, com os átomos separados por uma certa distância. Se por acaso o átomo mais leve for deslocado um pouco de sua posição de equilíbrio, ele será atraído (ou repellido) de volta a tal posição. Desta forma tal molécula funciona como um sistema massa-mola, mas cujas dimensões requerem um tratamento quântico.

Nossa primeira tarefa no desenvolvimento da abordagem quântica para o oscilador harmônico consiste em determinar o **espaço de estados** adequado. Conforme estudamos na última aula, o estado de uma partícula em movimento unidimensional $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ pode ser descrito pela respectiva função de onda na representação das posições:

$$\psi_\alpha(x) = \langle x | \alpha \rangle,$$

onde $|x\rangle \in \mathcal{D}(Q) \subseteq \mathcal{H}$ é um autoestado generalizado do operador posição Q . De uma

forma geral, a partícula pode ocupar qualquer posição ao longo da reta, sugerindo, pois, que tomemos:

$$\sigma(Q) = \mathbb{R}.$$

Portanto, devemos lidar com um espaço de funções $\psi_\alpha: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ tais que o seguinte produto interno

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx \bar{\psi}_\beta(x) \psi_\alpha(x)$$

esteja bem definido, e contenha um subconjunto denso no qual o operador posição seja autoadjunto.

É possível demonstrar que o **espaço das funções de quadrado integrável**:

$$L_2(\mathbb{R}) = \left\{ f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} \mid \langle f, f \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx |f(x)|^2 < \infty \right\}$$

é um espaço de Hilbert com respeito ao produto interno definido acima. Adicionalmente, podemos demonstrar que o operador posição é autoadjunto se tomarmos seu domínio como o seguinte conjunto denso de $L_2(\mathbb{R})$:

$$D(Q) = \left\{ f \in L_2(\mathbb{R}) \mid x \cdot f \in L_2(\mathbb{R}) \right\}.$$

Note também que, em virtude de

$$\psi_\alpha \in L_2(\mathbb{R}) \Rightarrow \langle \alpha | \alpha \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx \bar{\psi}_\alpha(x) \psi_\alpha(x) < \infty$$

lidamos com estados **normalizáveis**, que permitem, via axioma 3, a interpretação probabilística da MQ, pois devido ao axioma 1 sempre podemos escolher a função de onda representativa do estado $|\alpha\rangle$ tal que:

$$\int_{\mathbb{R}} \bar{\psi}_\alpha(x) \psi_\alpha(x) dx = 1.$$

Conseqüentemente, o espaço de estados do oscilador harmônico é:

$$\mathcal{H} = L_2(\mathbb{R}).$$

Nossa próxima tarefa consiste em descobrir como um dado estado do oscilador harmônico

evolui no tempo. Para tanto, o axioma 5 nos ensina que precisamos conhecer o operador hamiltoniano do sistema. Na última seção concluímos que a hamiltoniana do oscilador harmônico clássico é:

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

que podemos transformar em um operador quântico, o hamiltoniano, ao promovermos as funções x e p aos operadores posição Q e momento P , respectivamente,

$$H = \frac{1}{2m} P^2 + \frac{m\omega^2}{2} Q^2.$$

Notando que o operador momento também é autoadjunto em um conjunto denso de $L_2(\mathbb{R})$, podemos concluir (invocando o teorema de Kato-Relich) que o hamiltoniano definido acima é autoadjunto.

Na representação das posições a ação de Q e P em um dado estado $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ é:

$$Q|\alpha\rangle \rightarrow x\psi_\alpha(x),$$

$$P|\alpha\rangle \rightarrow -i\hbar \partial_x \psi_\alpha(x).$$

Conseqüentemente, na representação das posições, a ação do hamiltoniano do oscilador harmônico sobre $\forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ é:

$$H|\alpha\rangle \rightarrow \frac{1}{2m} [-i\hbar \partial_x (-i\hbar \partial_x \psi_\alpha(x))] + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \psi_\alpha(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \psi_\alpha(x) + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \psi_\alpha(x).$$

Com isso podemos escrever a equação de Schrödinger dependente do tempo para o oscilador harmônico:

$$i\hbar \partial_t |\alpha; t\rangle = H |\alpha; t\rangle \rightarrow i\hbar \partial_t \psi_\alpha(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \psi_\alpha(x, t) + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \psi_\alpha(x, t).$$

Como vimos anteriormente, não precisamos resolver explicitamente tal equação, uma vez que o hamiltoniano do oscilador harmônico **independe** do tempo, satisfazemos todas as hipóteses do caso 1 (vide aula 6), que garante que

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H} \Rightarrow |\alpha, t_0; t\rangle = \sum_{\lambda \in \sigma(H)} e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\lambda} \alpha_\lambda(t_0) |\lambda\rangle.$$

Logo, basta que encontremos os autovetores e autovalores do hamiltoniano, resolvendo a equação de Schrödinger independente do tempo:

$$H|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle.$$

Em termos da representação das posições,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \psi_\lambda(x) + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \psi_\lambda(x) = \lambda \psi_\lambda(x),$$

que fornece simultaneamente as **funções de onda** $\psi_\lambda(x) \in \mathcal{H}$ e os **níveis de energia** $\lambda \in \sigma(H)$.

Resolver essa equação é uma tarefa significativamente não-trivial, que abordaremos em breve.

9.3 - O Estado Fundamental

Antes de resolvermos a equação de Schrödinger independente do tempo para o oscilador harmônico, precisamos fazer uma observação significativamente relevante para a devida compreensão das diferenças contraintuitivas entre a MC e MQ. Considere, pois a seguinte questão:

Qual é o nível de energia mais baixo possível para um oscilador harmônico?

Do ponto de vista clássico, sabemos que, como a hamiltoniana contém apenas funções quadráticas das variáveis canônicas, i.e., H é uma soma de x^2 com p^2 , a energia não pode ser negativa.

Portanto, para minimizarmos a energia, é suficiente tomarmos $x = p = 0$.

Contudo, sabemos que no contexto quântico tal requerimento é impossível! O princípio da incerteza nos **proíbe** de saber o momento e a posição de um sistema com precisão absoluta, como imposto pela condição $x = p = 0$. Assim, o melhor que se pode fazer é encontrar um compromisso entre o momento e a posição do sistema de forma que não se encontrem demasiadamente espelhados.

Conseqüentemente, a menor energia possível será diferente de zero. Notando que os espectros:

$$\sigma(Q^2) \subseteq \mathbb{R}_+ \quad \text{e} \quad \sigma(P^2) \subseteq \mathbb{R}_+,$$

os níveis de energia do oscilador harmônico serão **estritamente positivos**.

Se todos os níveis de energia de um sistema são positivos, deve existir uma energia mínima permitida para o sistema. O estado associado a este nível mínimo de energia é denominado **estado fundamental** ou **vácuo**.

9.4 - Autoestados e Autovalores de Energia

Nesta seção vamos apresentar o método operatorial de Dirac para resolver a equação de Schrödinger independente do tempo para o oscilador harmônico. A ideia central deste método é empregar as propriedades dos operadores Q e P , em particular as suas relações de comutação para construir dois novos operadores: o operador de **criação** e o operador de **aniquilação**, cuja ação sobre um autoestado do sistema leve a um autovetor com energia, respectivamente, um quantum maior, e menor. De forma que seus papéis sejam o de criar ou destruir uma quantidade fundamental de energia.

Comecemos tentando decompor o hamiltoniano:

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

no produto de dois operadores. Se P e Q fossem quantidades comutantes poderíamos trivialmente usar que:

$$a^2 + b^2 = (a+ib)(a-ib).$$

Contudo,

$$[Q, P] = i\hbar$$

e temos que:

$$\begin{aligned} & \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(Q - \frac{i}{m\omega} P \right) \cdot \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(Q + \frac{i}{m\omega} P \right) \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar} \left[Q^2 + \frac{i}{m\omega} (QP - PQ) + \frac{1}{m^2\omega^2} P^2 \right] = \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{1}{2m} P^2 + \frac{m\omega^2}{2} Q^2 \right) + \frac{i}{2\hbar} [Q, P] \\ &= \frac{1}{\hbar\omega} H - \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Conseqüentemente, podemos fatorar o hamiltoniano da seguinte forma:

$$H = \hbar\omega \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(Q - \frac{i}{m\omega} P \right) \cdot \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(Q + \frac{i}{m\omega} P \right) + \frac{\hbar\omega}{2}.$$

Sugerindo que introduzamos os seguintes dois operadores não-hermitianos:

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(Q + \frac{i}{m\omega} P \right),$$

$$a^* = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(Q - \frac{i}{m\omega} P \right),$$

denominados operadores de **aniquilação** e **criação**, respectivamente. Em termos dos quais:

$$H = \hbar\omega \left(a^* a + \frac{1}{2} \right).$$

Tais operadores satisfazem a seguinte relação de comutação:

$$\begin{aligned} [a, a^*] &= \frac{m\omega}{2\hbar} \left[Q + \frac{i}{m\omega} P, Q - \frac{i}{m\omega} P \right] \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar} \left(-\frac{i}{m\omega} [Q, P] + \frac{i}{m\omega} [P, Q] \right) \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar} 2 \left(\frac{-i}{m\omega} \right) \cdot i\hbar \\ &= 1. \end{aligned}$$

Podemos simplificar ainda mais a expressão do hamiltoniano introduzindo o **operador número**:

$$N = a^* a.$$

Novamente, tal nome será justificado a posteriori. Não obstante, em termos de N o hamiltoniano assume a seguinte forma:

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

Calculamos, pois, os seguintes comutadores envolvendo nossos novos operadores: a , a^* e N :

$$[N, a] = [a^* a, a] = a^* [a, a] + [a^*, a] a = -a,$$

$$[N, a^*] = [a^* a, a^*] = a^* [a, a^*] + [a^*, a^*] a = a^*.$$

Com isso obtivemos a seguinte coleção de comutadores:

$$[a, a^*] = 1, \quad [N, a] = -a, \quad [N, a^*] = a^*.$$

Um conjunto de operadores fechados sob a ação de comutadores, como $\{a, a^*, N\}$ define uma

álgebra de comutadores. Tais álgebras exibem propriedades extremamente interessantes e úteis, tornando-as uma das ferramentas mais importantes de toda a física. Ilustraremos seu poder através do cálculo dos autovalores e autovetores de N e conseqüentemente de H .

O procedimento que utilizamos a seguir é remiñente de um processo de indução finita. Supomos, inicialmente, a existência de um autovetor de N com autovalor n , i.e.,

$$N|n\rangle = n|n\rangle.$$

Consideramos, então o vetor obtido pela ação de a^* sobre tal $|n\rangle \in \mathcal{H}$. Mostremos que $a^*|n\rangle$ também é um autoestado de N .

$$\begin{aligned} N(a^*|n\rangle) &= (Na^* - a^*N + a^*N)|n\rangle \\ &= ([N, a^*] + a^*N)|n\rangle \\ &= a^*(\mathbb{1} + N)|n\rangle \\ &= (n+1)a^*|n\rangle. \end{aligned}$$

A equação acima nos ensina que o estado $a^*|n\rangle$ é um **autovetor** de N com **autovalor** $(n+1)$. Em outras palavras, dado um autoestado do operador número com autovalor n podemos construir um novo autoestado com o autovalor **acrescido de 1 unidade**. Notando, adicionalmente da definição do vetor $|n\rangle$, que

$$N|n+1\rangle = (n+1)|n+1\rangle,$$

somos forçados a concluir a partir do axioma 1 que os vetores $|n+1\rangle$ e $a^*|n\rangle$ representam o mesmo estado de \mathcal{H} , pois diferem no máximo por uma constante multiplicativa, i.e.,

$$a^*|n\rangle = c|n+1\rangle, \quad c \in \mathbb{C}.$$

Determinaremos tal constante posteriormente. Por ora, observamos que podemos iterar tal procedimento para obter a seguinte seqüência infinita de autovetores de N :

$$|n\rangle, |n+1\rangle, |n+2\rangle, \dots$$

Similarmente, podemos considerar o vetor obtido pela ação de a sobre o autoestado $|n\rangle$.

Neste caso,

$$\begin{aligned} N(a|n\rangle) &= (Na - aN + aN)|n\rangle \\ &= ([N, a] + aN)|n\rangle \\ &= a(-1 + N)|n\rangle \\ &= (n-1)|n\rangle \end{aligned}$$

implica que o operador a produz um autoestado de N com o autovalor **decrecido em 1 unidade**. Conseqüentemente, o axioma 1 garante que:

$$a|n\rangle = d|n-1\rangle, \quad d \in \mathbb{C}.$$

Fornecendo a seguinte seqüência de autoestados do operador número:

$$|n\rangle, |n-1\rangle, |n-2\rangle, \dots$$

Antes de proseguirmos com a nossa análise de tais seqüências de estados, determinemos

c e d a partir da condição de normalização dos autoestados de N . Notadamente,

$$\langle n|a^*a|n\rangle = |d|^2 \langle n-1|n-1\rangle \Rightarrow \langle n|N|n\rangle = |d|^2 \Rightarrow n = |d|^2,$$

escolhendo $d \in \mathbb{R}_+$, concluímos que:

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle.$$

Analogamente,

$$a^*|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle.$$

Como H é uma função linear de N , pode obviamente ser diagonalizada simultaneamente. Logo,

$$H|n\rangle = \hbar\omega(N + 1/2\mathbb{1})|n\rangle = \hbar\omega(n + 1/2)|n\rangle.$$

Assim da seqüência de estados obtidos a partir da ação de a sobre $|n\rangle$ implica

$$H|n-m\rangle = \hbar\omega(n-m+1/2)|n-m\rangle.$$

Concluimos que para $m \in \mathbb{N}$ suficientemente grande teríamos um estado com energia **negativa** :

$$n - m + 1/2 < 0.$$

Contudo, da nossa discussão anterior sobre o estado fundamental do oscilador harmônico sabemos que não apenas inexitem estados com energia negativa, mas também não existe nenhum estado com energia nula. Portanto, a sequência de estados

$$|n\rangle, |n-1\rangle, |n-2\rangle, \dots$$

deve ser **finita**. A única forma de garantir que tal sequência eventualmente termine é se existir um estado $|n-m\rangle$ que seja **aniquilado** por a , i.e.,

$$a|n-m\rangle = 0.$$

Porém,

$$a|n-m\rangle = \sqrt{n-m} |n-m-1\rangle,$$

de onde inferimos que para o estado de menor energia devemos ter que $n=m$. Assim, é usual denotar o estado fundamental por $|0\rangle$.

Dois conclusões importantes seguem da consideração feita acima sobre o estado fundamental.

Primeiramente, a energia do estado fundamental é :

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \neq 0.$$

Em segundo lugar o espectro do hamiltoniano do oscilador harmônico :

$$\sigma(H) = \{ E_n = \hbar\omega(n + 1/2), n \in \mathbb{N} \} = \{ \hbar\omega/2, 3\hbar\omega/2, 5\hbar\omega/2, \dots \}$$

é **discreto**. A quantização dos níveis de energia do oscilador harmônico foi um dos primeiros e mais importantes resultados da MQ.

Os demais autoestados de H podem ser obtidos a partir de sucessivas aplicações do operador a^* sobre $|0\rangle$, cada uma **criando** um novo quantum de energia :

$$|1\rangle = a^* |0\rangle \rightarrow E_1 = \frac{3}{2} \hbar \omega$$

$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} a^* |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} a^{*2} |0\rangle \rightarrow E_2 = \frac{5}{2} \hbar \omega$$

$$|3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} a^* |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3!}} a^{*3} |0\rangle \rightarrow E_3 = \frac{7}{2} \hbar \omega$$

⋮

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} a^{*n} |0\rangle \rightarrow E_n = \hbar \omega (n + \frac{1}{2}).$$

Assim justificamos os nomes dados aos operadores:

(i) a^* (Criação): pois cria um novo quantum de energia;

(ii) a (Aniquilação): pois destrói um quantum de energia;

(iii) N (Número): pois conta o número de quanta de energia em um dado estado.

Como o hamiltoniano é autoadjunto e possui um espectro discreto, o teorema espectral implica que o conjunto de autovetores de N , $\{|n\rangle \in \mathcal{H}, n \in \mathbb{N}\}$ constitui uma base ortonormal.

Com isso podemos facilmente calcular os seguintes elementos de matriz:

$$\langle k | a | n \rangle = \sqrt{n} \delta_{k, n-1}, \quad \langle k | a^* | n \rangle = \sqrt{n+1} \delta_{k, n+1}.$$

Invertendo as relações definidoras de a e a^* , temos que:

$$Q = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^*),$$

$$P = i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (-a + a^*).$$

Conseqüentemente, os elementos de matriz para os operadores momento e posição são:

$$\langle k | Q | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n} \delta_{k, n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{k, n+1}),$$

$$\langle k | P | n \rangle = i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (-\sqrt{n} \delta_{k, n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{k, n+1}).$$

Note que nenhum dos operadores: Q , P , a e a^* é diagonal na base de autoestados do hamiltoniano. Claramente, tal resultado poderia ter sido antecipado, pois sabemos que nenhum destes operadores comuta com H ou N .

9.5 - Função de Onda na Representação das Posições

Podemos empregar os resultados abstratos obtidos na última seção através do método operatorial para obter as autofunções de energia no espaço das coordenadas. Partindo da definição do estado fundamental:

$$a|0\rangle = 0,$$

obtemos a seguinte expressão na representação das posições:

$$\langle x|a|0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \langle x|Q + \frac{i}{m\omega}P|0\rangle = 0,$$

que fornece a seguinte equação diferencial para a função de onda do estado fundamental

$$\psi_0(x) = \langle x|0\rangle:$$

$$(x + x_0^2 \partial_x) \psi_0(x) = 0,$$

onde introduzimos a seguinte constante:

$$x_0 := \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}},$$

que fornece a escala de comprimento natural do oscilador. A solução normalizada de tal equação diferencial é simplesmente:

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{x_0}} \cdot \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0}\right)^2\right].$$

Para obtermos as funções de onda na representação das posições para os estados excitados, ou seja, aqueles com $n > 0$ não precisamos resolver nenhuma equação diferencial, basta que apliquemos a potência adequada do operador de criação à solução do estado fundamental.

Para o primeiro estado excitado, temos que avaliar:

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= \langle x|1\rangle = \langle x|a^\dagger|0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \langle x|Q - \frac{i}{m\omega}P|0\rangle \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}x_0}\right) (x - x_0^2 \partial_x) \psi_0(x) \\ &= \sqrt{\frac{2}{x_0^3 \sqrt{\pi}}} x e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0}\right)^2}. \end{aligned}$$

A única diferença notável entre ψ_0 e ψ_1 é a presença do fator extra de x em ψ_1 , cuja

conseqüência é a existência de uma raiz em $x=0$ para a função de onda do primeiro estado excitado. Esse padrão continua conforme consideramos estados mais excitados, cada um apresentando uma raiz adicional. Vejamos isso calculando a função de onda para o segundo estado excitado:

$$\begin{aligned}\psi_2(x) &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) \langle x | a^{*2} | 0 \rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2!}}\right) \left(\frac{1}{\sqrt{2} x_0}\right)^2 \left(x - x_0^2 \partial_x\right)^2 \psi_0(x) \\ &\sim (-x_0^2 + 2x^2) e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}.\end{aligned}$$

De uma forma geral,

$$\psi_n(x) = \left(\frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{2^n n!}}\right) \left(\frac{1}{x_0^{n+1/2}}\right) \left(x - x_0^2 \partial_x\right)^n e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}.$$

É importante notar que toda autofunção é um polinômio em x multiplicado por $e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}$. Como a exponencial vai para zero muito mais rápido do que qualquer polinômio consegue divergir conforme $|x| \rightarrow \infty$, cada autofunção se aproxima assintoticamente de zero. Ademais, como o grau de cada polinômio é maior do que o do anterior por exatamente uma unidade, cada autofunção apresenta exatamente uma raiz a mais do que a anterior. A saber $\psi_n(x)$ possui exatamente n raízes. Isso também acarreta que as autofunções com n (im)par sejam (antis)simétricas, pois $\psi_0(x) \sim e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}$ é uma função par. Finalmente notamos que os polinômios que aparecem nesta seqüência são os **polinômios de Hermite**.

9.6 - Valores de Expectativa

Anteriormente utilizamos o princípio da incerteza para argumentar que o estado fundamental não poderia ter energia nula, sugerindo, pois, que tal estado fosse de incerteza mínima. Nesta seção verificamos esse fato ao calcularmos os valores esperados adequados. Avaliemos inicialmente os valores de expectativa de Q^2 e P^2 com respeito a $|0\rangle$. Notando que

$$Q^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} (a^2 + a^*a + aa^* + a^{*2})$$

e lembrando que

$$a|0\rangle = 0 \Rightarrow \langle 0|a^* = 0,$$

concluimos que apenas o termo aa^* contribui. Portanto,

$$\langle Q^2 \rangle = \langle 0|Q^2|0\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle 0|aa^*|0\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle 1|1\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} = \frac{x_0^2}{2}.$$

Um cálculo inteiramente similar fornece:

$$\langle P^2 \rangle = \frac{\hbar m\omega}{2}.$$

Conseqüentemente, o valor da energia cinética é:

$$\langle T \rangle = \left\langle \frac{P^2}{2m} \right\rangle = \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{1}{2} \langle H \rangle,$$

enquanto que o da energia potencial é dado por:

$$\langle V \rangle = \left\langle \frac{m\omega^2}{2} Q^2 \right\rangle = \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{1}{2} \langle H \rangle.$$

Em conformidade com o teorema do Virial. Como tanto P quanto Q não são diagonais na base de autoestados de H , segue trivialmente que

$$\langle P \rangle = \langle n|P|n\rangle = 0, \quad \langle Q \rangle = \langle n|Q|n\rangle = 0.$$

Com isso podemos calcular as incertezas de P e Q no estado fundamental:

$$\langle (\Delta Q)^2 \rangle = \langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2 = \frac{\hbar}{2m\omega},$$

$$\langle (\Delta P)^2 \rangle = \langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2 = \frac{\hbar m\omega}{2}.$$

Portanto,

$$\langle (\Delta Q)^2 \rangle \langle (\Delta P)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4},$$

confirmando que o estado fundamental satisfaz o princípio da incerteza com incerteza mínima.

É deixado como exercício para o leitor verificar que a incerteza para estados excitados é sempre maior:

$$\langle (\Delta Q)^2 \rangle \langle (\Delta P)^2 \rangle = (n + 1/2)^2 \hbar^2.$$