

O oscilador harmônico quântico

Prof. Luiz T. F. Eleno

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



2019

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

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

- ω é a *frequência de oscilação*, dada por

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

- o *período de oscilação* da partícula é

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

- Repare que o potencial pode ser reescrito em termos de ω :

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

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

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

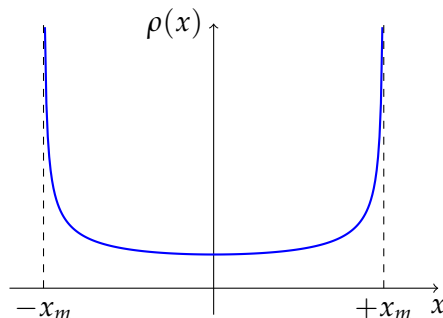
- Para ir de $-x_m$ a x_m , a partícula gasta meio período de oscilação ($T_{1/2} = \pi/\omega$)

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

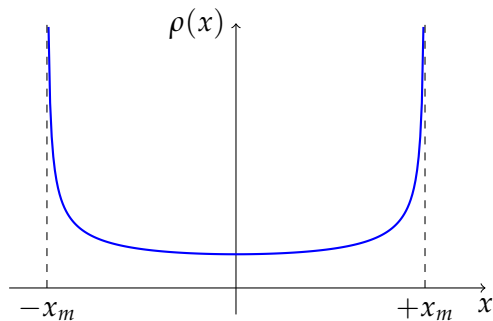
$$\rho(x) dx = \frac{dt}{T_{1/2}}$$

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

- ▶ $\rho(x) = 0$ 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

→

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

O 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*

O 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 fatoraço 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 ψ 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 ψ 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 ψ_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) ψ_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

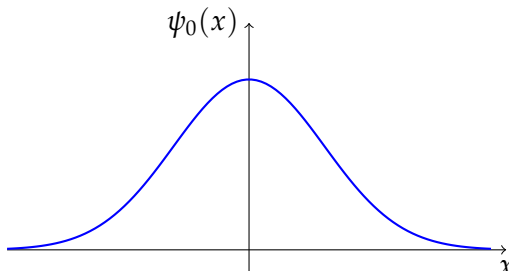
$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

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

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

- 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 dos 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 δ_{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:

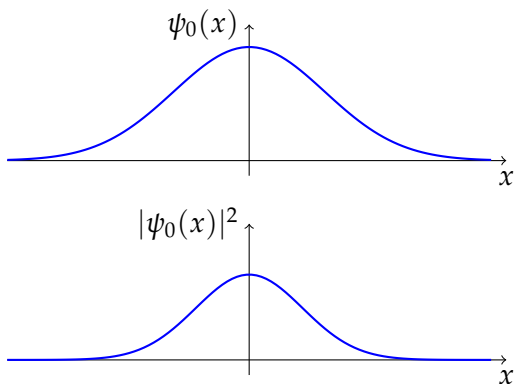
$$\psi_1(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

com

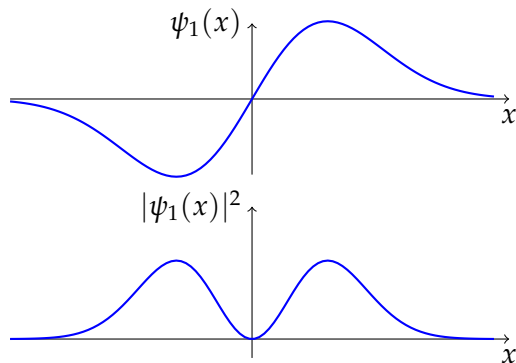
$$E_1 = 3\hbar\omega/2$$

Primeiro estado excitado

- Estado fundamental:



- Primeiro estado excitado:



- Repare que

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

Exercícios

- Construa $\psi_2(x)$.
- Esboce $\psi_2(x)$ e $|\psi_2(x)|^2$.
- Verifique a ortonormalidade de ψ_0 , ψ_1 e ψ_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 ψ_0 e ψ_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:

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

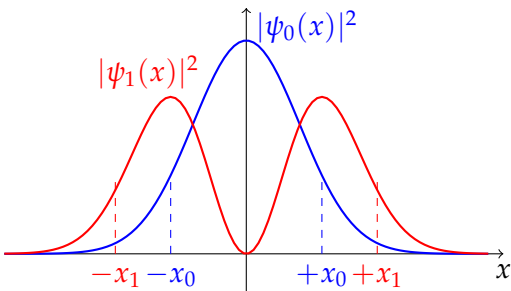
Tunelamento

- 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:

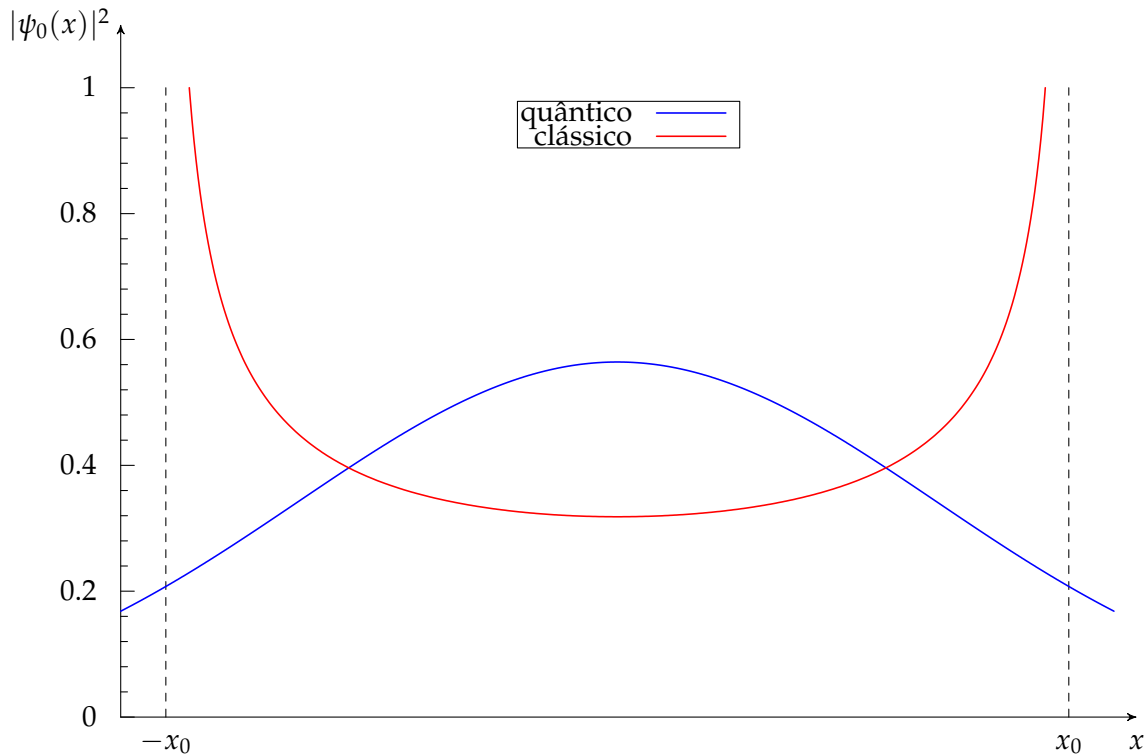
$$P_n(|x| > x_n) = \int_{-\infty}^{-x_n} |\psi_n(x)|^2 dx + \int_{x_n}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx$$

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

Exercícios

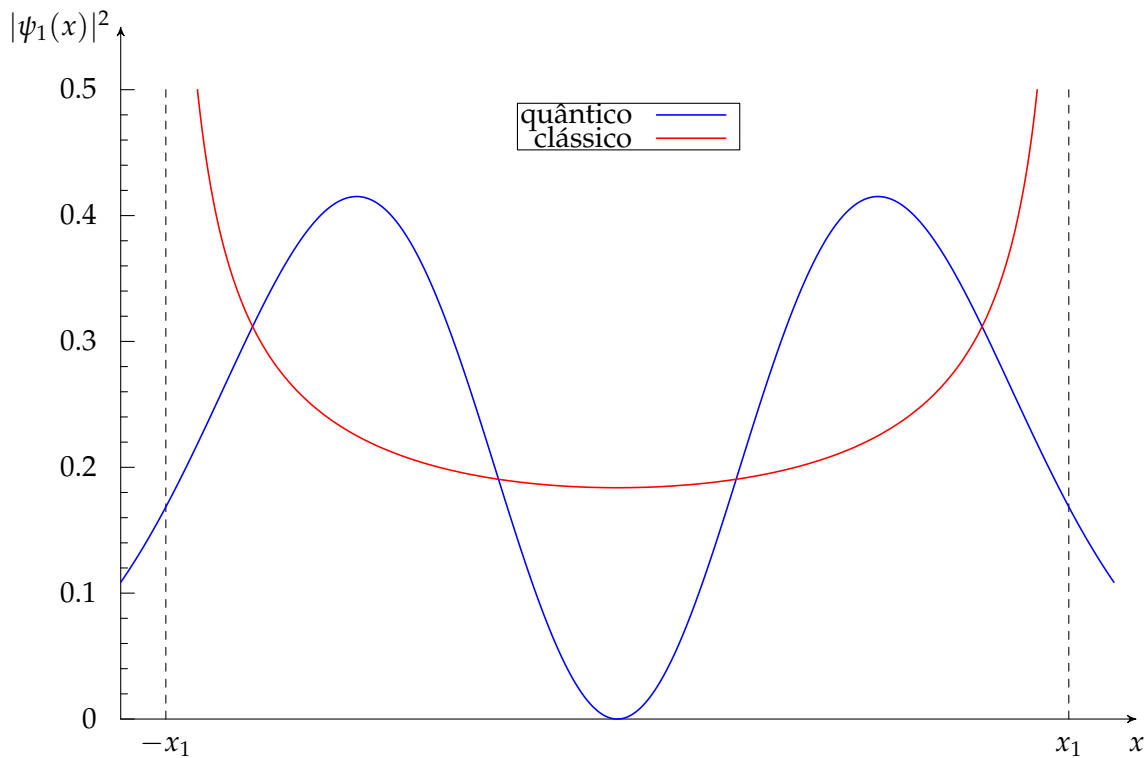
26. Determine $P_0(|x| > x_0)$, $P_1(|x| > x_1)$ e $P_2(|x| > x_2)$. Resolva as integrais numericamente ou usando uma tabela da função erro.

Estados fortemente excitados



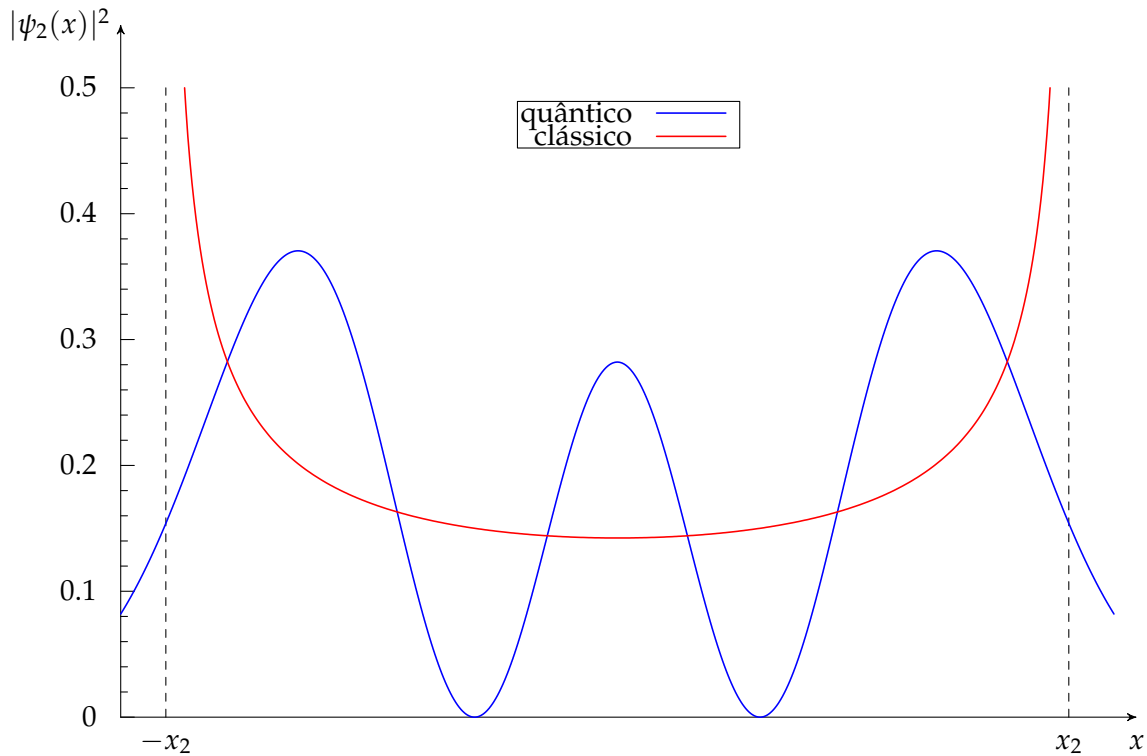
Estado fundamental

Estados fortemente excitados



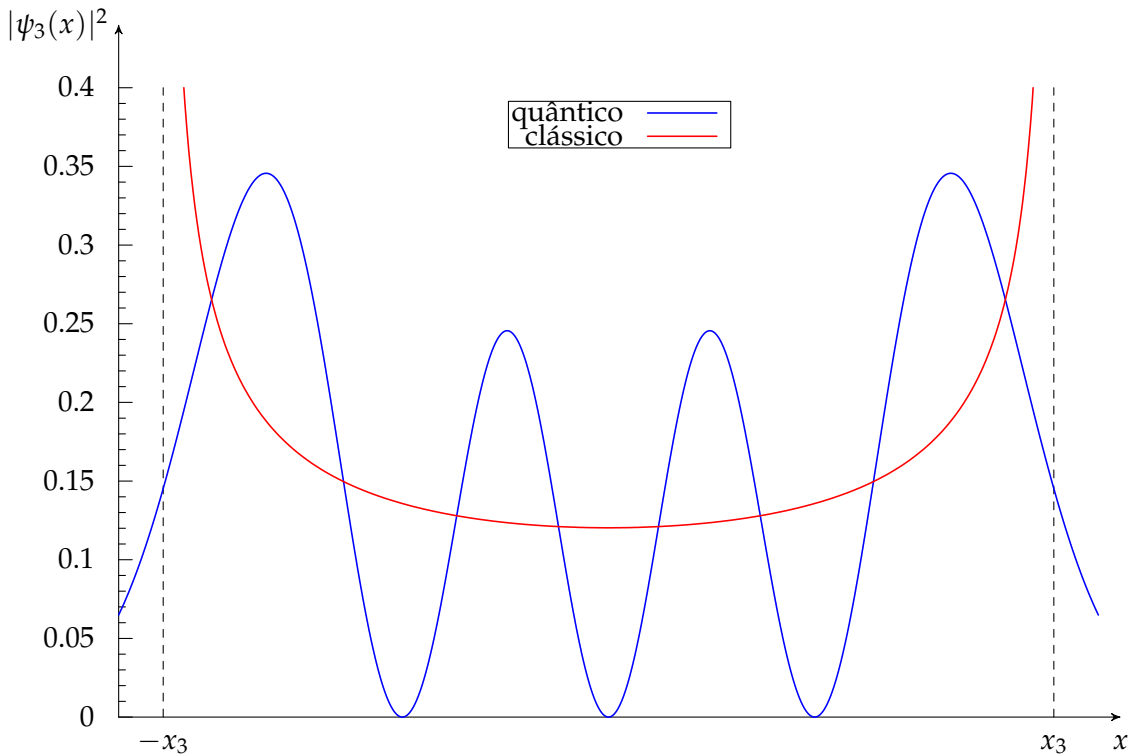
Estados excitados

Estados fortemente excitados



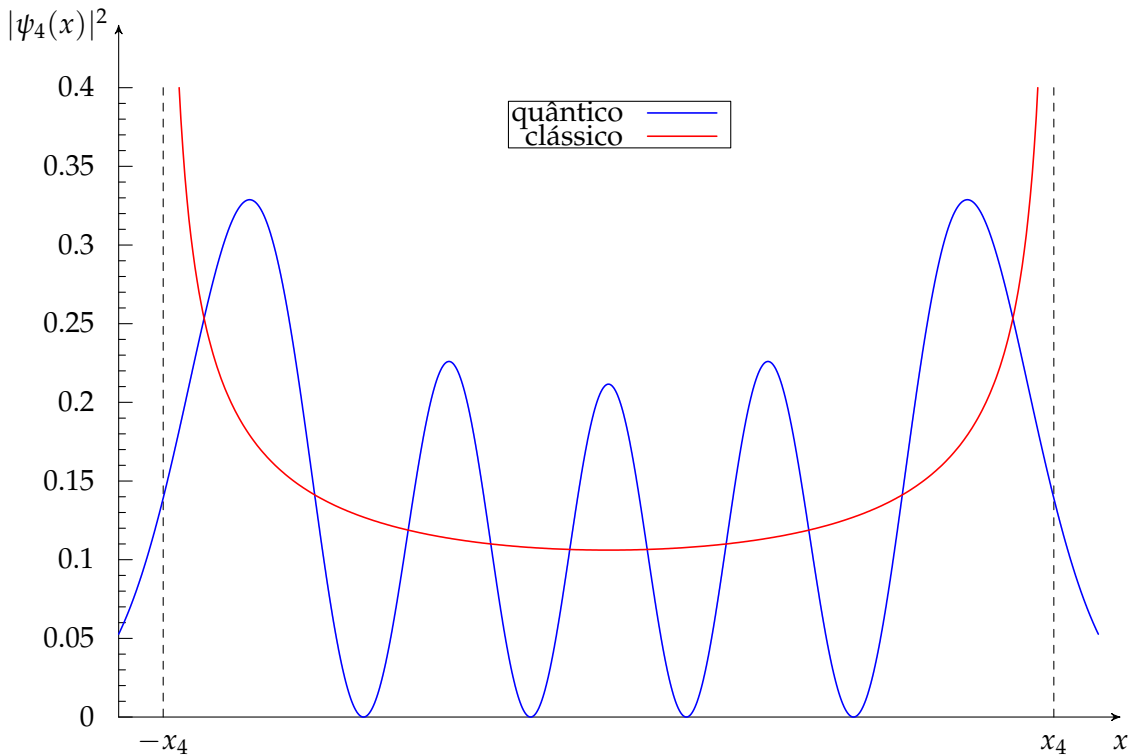
Estados excitados

Estados fortemente excitados



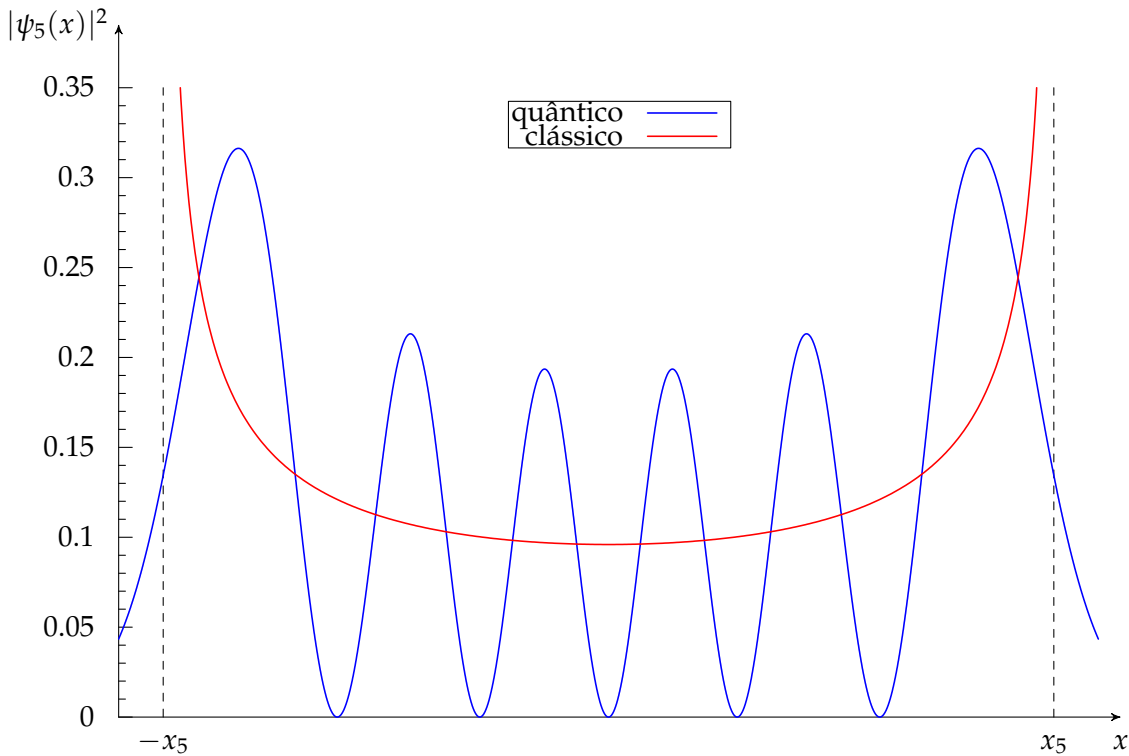
Estados excitados

Estados fortemente excitados



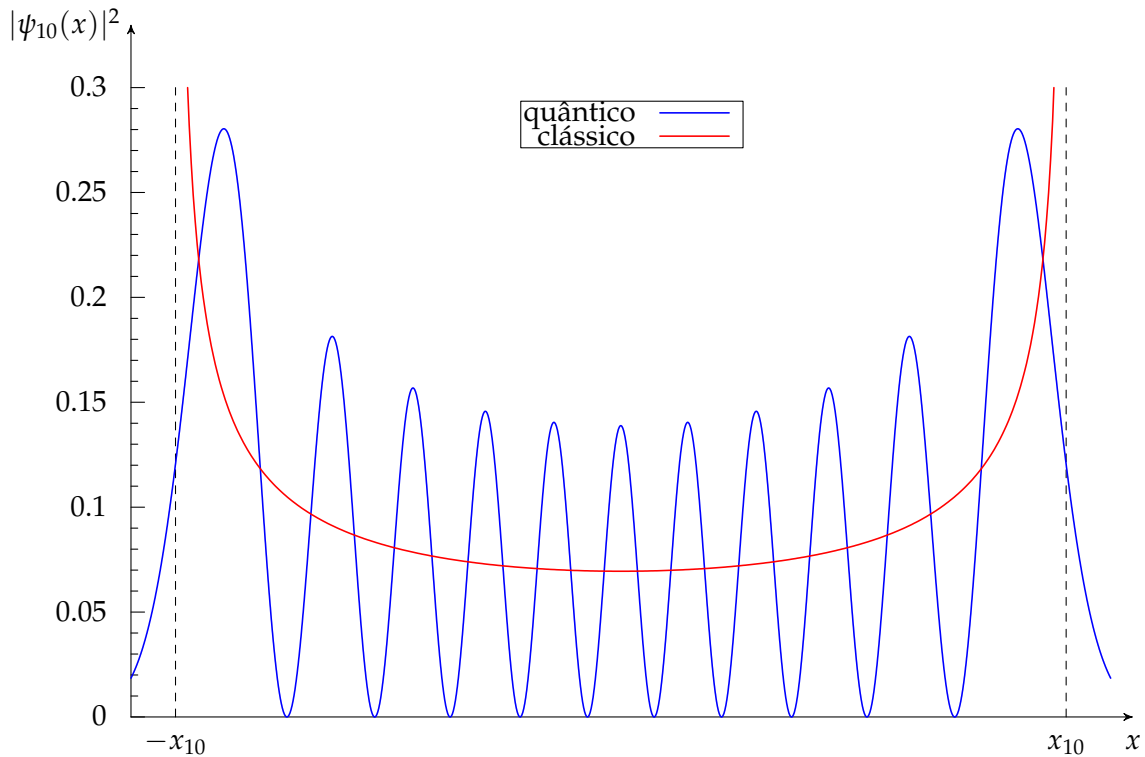
Estados excitados

Estados fortemente excitados



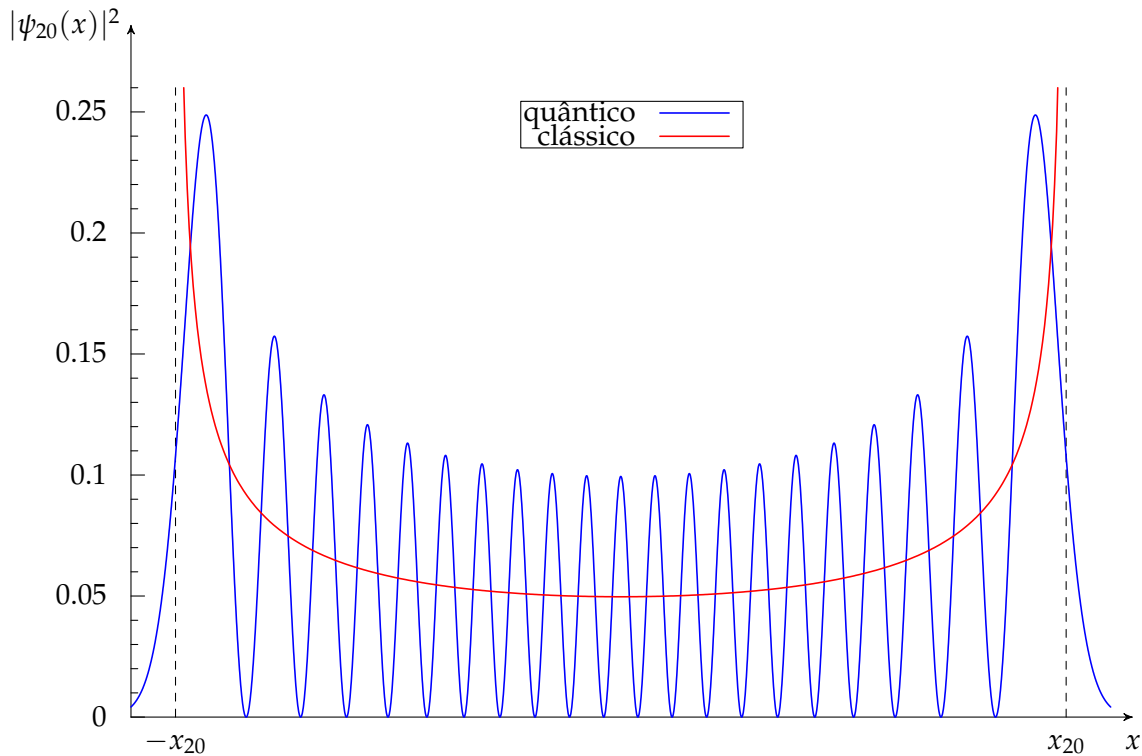
Estados excitados

Estados fortemente excitados



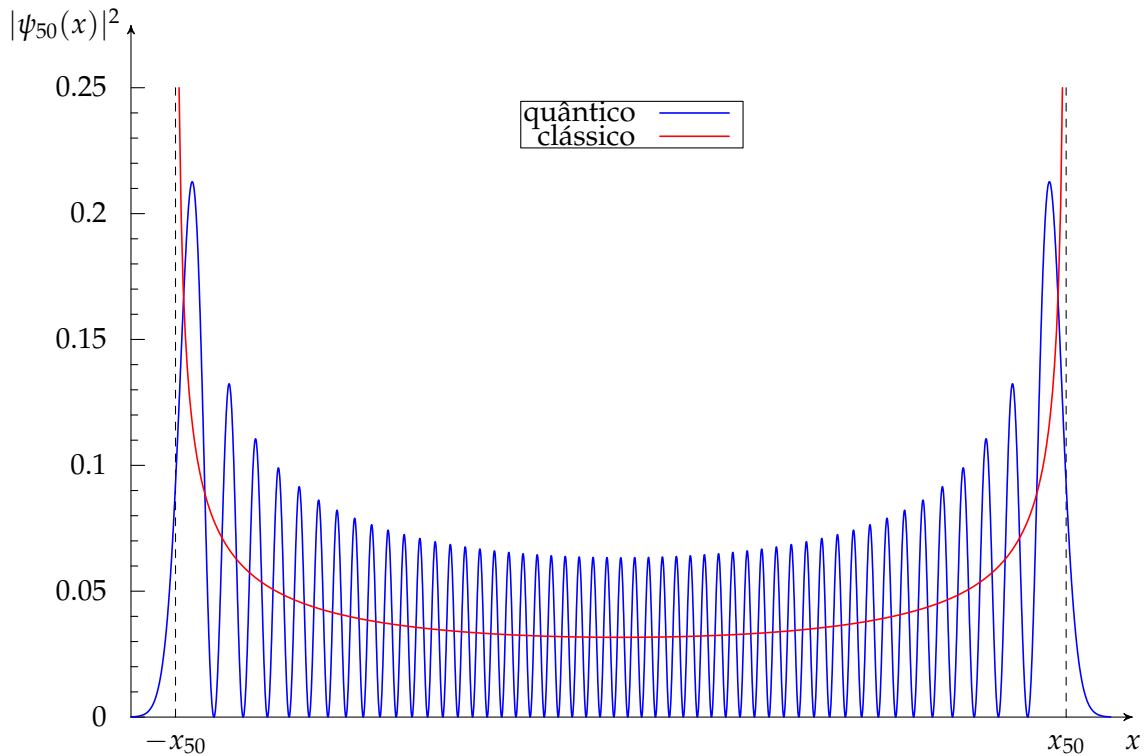
Estados excitados

Estados fortemente excitados



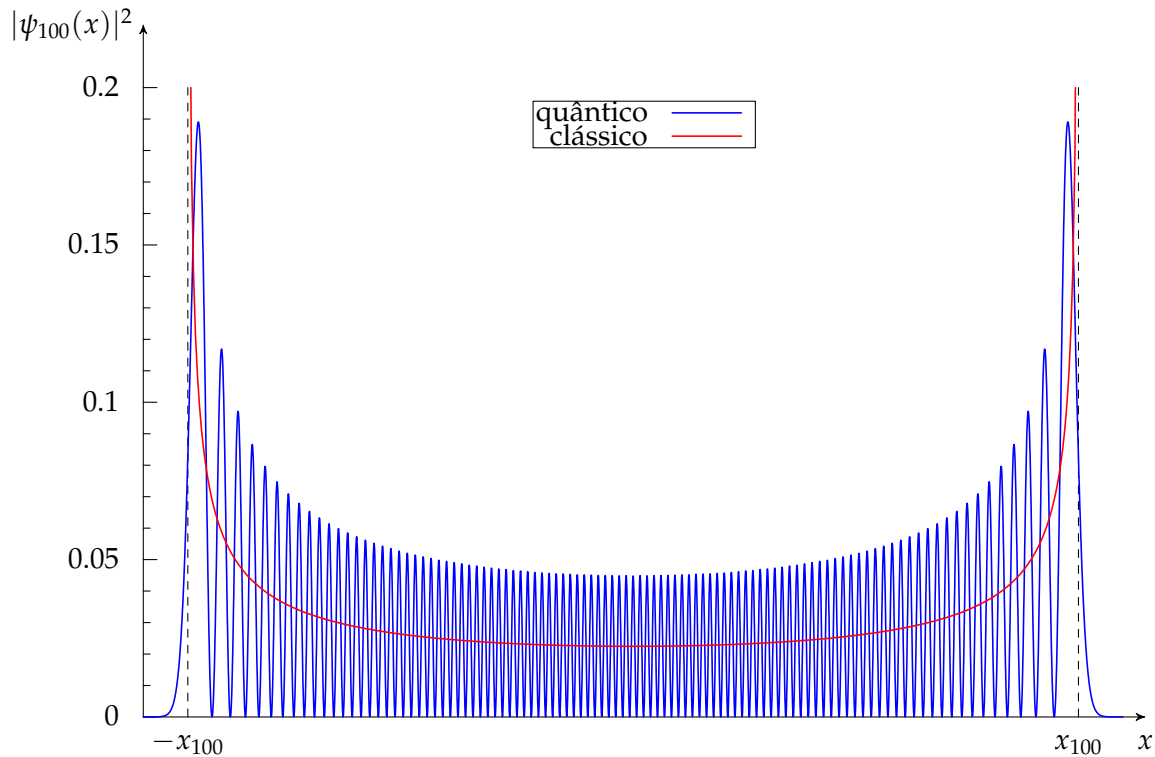
Estados excitados

Estados fortemente excitados



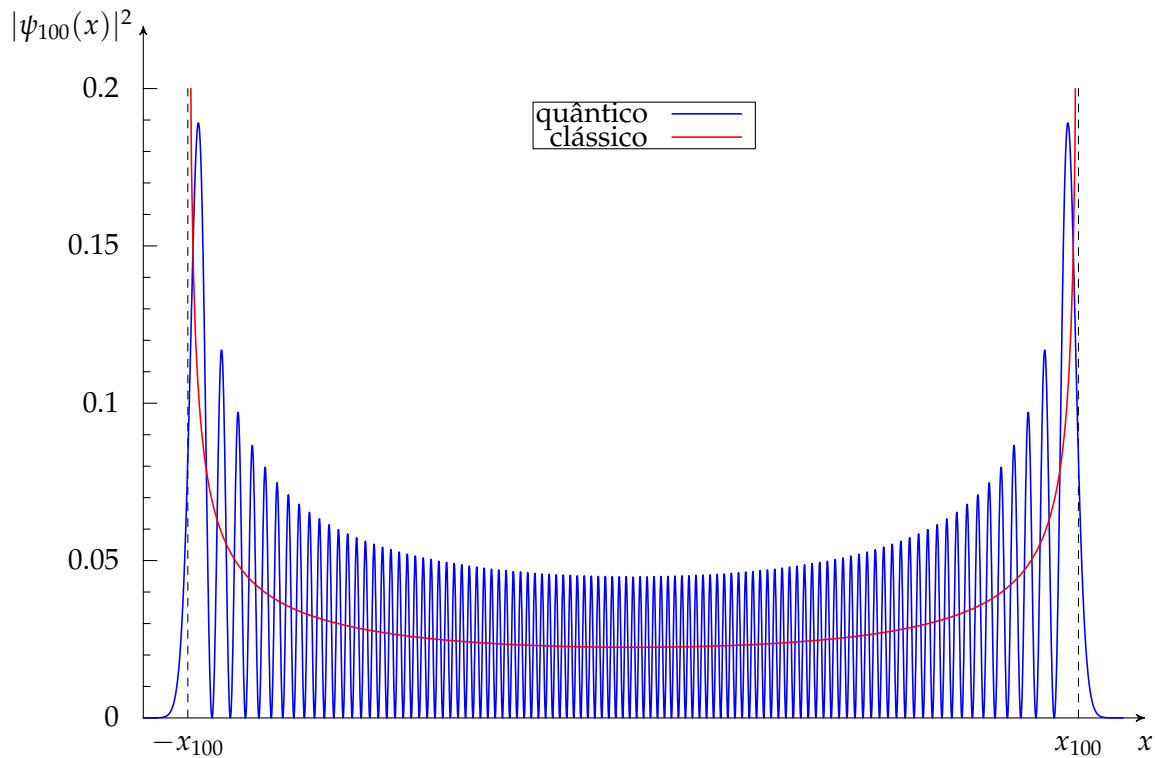
Estados excitados

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 ψ_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 ($n = 0$)

Exercícios

27. Uma pequena massa de 2 g é atada a uma mola, gerando uma extensão de 1 cm.
- Calcule a constante de mola k (adote $g = 10 \text{ m/s}^2$).
 - Ache a frequência ω de pequenas oscilações verticais da massa em torno da posição de equilíbrio.
 - 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 $k = 470 \text{ N m}^{-1}$.
- Calcule a frequência de oscilação do íon de H no limite clássico (desprezando o movimento do íon de Cl).
 - A amplitude de oscilação é $\approx 10^{-11} \text{ m}$, ou um décimo da distância interatômica. A aproximação clássica é válida?
 - Obtenha uma expressão para os níveis de energia vibracionais usando a teoria quântica.
 - Qual é o limite clássico para a amplitude de vibração quando $n = 0$?
 - 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 σ 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
σ (Å)	2,74	3,40	3,65	3,98