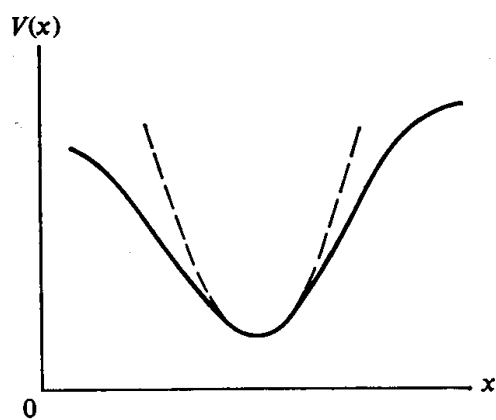




Oscilador harmônico: o retorno

$$U(x) = U(a) + \frac{1}{2} K(x-a)^2$$

$$U(x) = \frac{1}{2} Kx^2 = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{1}{2} m\omega^2 x^2 - E \right) \psi$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{1}{2} Kx^2 - E \right) \psi = \frac{mK}{\hbar^2} \left(x^2 - \frac{2E}{K} \right) \psi \Rightarrow \frac{\hbar}{\sqrt{mK}} \frac{d^2\psi}{dx^2} = \left(\frac{\sqrt{mK}}{\hbar} x^2 - \frac{2E}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{K}} \right) \psi$$

Nova variável: $\xi^2 = \frac{\sqrt{mK}}{\hbar} x^2$

Novo parâmetro: $\lambda = \frac{2E}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{K}} = \frac{2E}{\hbar\omega}$

$$\left. \begin{array}{l} \xi^2 = \frac{\sqrt{mK}}{\hbar} x^2 \\ \lambda = \frac{2E}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{K}} = \frac{2E}{\hbar\omega} \end{array} \right\} \Rightarrow \frac{d^2\psi}{d\xi^2} = (\xi^2 - \lambda) \psi$$

Situação clássica: $|x| \leq A$ (amplitude). O máximo correspondente à variável ξ :

$$\xi^2 = \frac{\sqrt{mK}}{\hbar} A^2 \quad \text{com a correspondência clássica entre amplitude e energia:}$$

Oscilador harmônico: o retorno

$\xi^2 = \frac{\sqrt{mK}}{\hbar} \frac{2E}{K} = \lambda$ (clássico). O que nos mostra que essas quantidades adimensionais estão relacionadas na física clássica.

$$\text{Schrödinger: } \frac{d^2\psi}{d\xi^2} = (\xi^2 - \lambda)\psi$$

Voltando às nossas análises das propriedades das autofunções, podemos ver que, por causa do fator $(\xi^2 - \lambda)$, a segunda derivada da função de onda deve ter sinal contrário ao da função se $(\xi^2 < \lambda)$ e o mesmo sinal se $(\xi^2 > \lambda)$, lembrando que $\xi^2 = \lambda$ corresponde ao limite da amplitude clássica. E que a função e sua derivada devem ser contínuas nessa transição.

Além disso esperamos que a autofunção tenda a zero suavemente para o caso $(\xi^2 > \lambda)$, que corresponde à região classicamente proibida.

Uma solução possível, que satisfaz estas características, é a função gaussiana:

$$\psi(\xi) = e^{-\xi^2/2}, \text{ cuja derivadas são: } \frac{d\psi}{d\xi} = -\xi e^{-\xi^2/2} \text{ e}$$

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = \xi^2 e^{-\xi^2/2} - e^{-\xi^2/2} = (\xi^2 - 1)e^{-\xi^2/2}$$

Vemos, então, que essa função pode ser solução da nossa equação, desde que o parâmetro λ tenha o valor $\lambda_0 = 1$.

A relação entre λ e E nos fornece o autovalor da energia para esse estado:

$$E_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2} \lambda_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2}$$

Essa autofunção corresponde a uma função de onda dada por:

$$\Psi_0(x, t) = \left(\frac{mK}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{1/8} e^{-\frac{\sqrt{mK}}{2\hbar} x^2} e^{-\frac{iE_0}{\hbar} t}$$

A solução anterior corresponde ao estado fundamental do oscilador, sendo que a energia E_0 corresponde à energia de ponto zero do sistema.

Soluções para estados de energia mais alta devem apresentar o mesmo fator gaussiano para garantir a atenuação da autofunção nas regiões classicamente proibidas.

Para introduzir os nós necessários, precisamos de um polinômio:

$$\psi(\xi) = H(\xi)e^{-\xi^2/2} \quad \text{Assim:} \quad \frac{d\psi}{d\xi} = \frac{dH}{d\xi} e^{-\xi^2/2} - H\xi e^{-\xi^2/2} \quad e$$

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = \frac{d^2H}{d\xi^2} e^{-\xi^2/2} - 2\frac{dH}{d\xi} \xi e^{-\xi^2/2} - H e^{-\xi^2/2} + H\xi^2 e^{-\xi^2/2}$$

Podemos usar esses resultados para montar nossa equação:

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = (\xi^2 - \lambda)\psi$$

Ficando:
$$\left[\frac{d^2 H}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH}{d\xi} + (\xi^2 - 1)H \right] e^{-\xi^2/2} = (\xi^2 - \lambda) H e^{-\xi^2/2}$$

Assim, a nossa proposta de autofunção será solução se a função desconhecida, H , satisfizer a seguinte equação:

$$\frac{d^2 H}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH}{d\xi} + (\lambda - 1)H = 0$$

O resultado para o estado fundamental é a solução imediata de $H = \text{cte}$ (qualquer), e $\lambda = 1$.

As soluções fisicamente aceitáveis (que mantêm $\psi \rightarrow 0$ para $\xi \rightarrow \infty$) são aquelas nas quais H é um polinômio. Vamos introduzir um inteiro, n , para indicar a ordem do polinômio.

Como $V(x)$ é uma função simétrica em x , as autofunções dos estados estacionários devem ter paridade bem definida.

Como a gaussiana é uma função par, cada polinômio $H(\xi)$ deve ser uma função par ou ímpar de ξ e, portanto, deve ter potências só pares ou só ímpares de ξ . Então:

$$H_n(\xi) = \begin{cases} \sum_{k=0, \text{ par}}^n a_k \xi^k & \text{para } n \text{ par} \\ \sum_{k=1, \text{ ímpar}}^n a_k \xi^k & \text{para } n \text{ ímpar} \end{cases}$$

Vamos examinar o caso de n par:

$$H_n = a_0 + a_2 \xi^2 + a_4 \xi^4 + a_6 \xi^6 + \dots + a_n \xi^n, \text{ com } a_n \neq 0$$

E as derivadas são:

$$H'_n = 2a_2 \xi + 4a_4 \xi^3 + 6a_6 \xi^5 + \dots + na_n \xi^{n-1}$$

$$H''_n = 2a_2 + 12a_4 \xi^2 + 30a_6 \xi^4 + \dots + n(n-1)a_n \xi^{n-2}$$

Substituindo na eq. para H :

$$\frac{d^2 H}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH}{d\xi} + (\lambda - 1)H = 0$$

$$\left[2a_2 + 12a_4\xi^2 + \dots + n(n-1)a_n\xi^{n-2} \right] - 2\xi \left[2a_2\xi + 4a_4\xi^3 + \dots + na_n\xi^{n-1} \right] + (\lambda - 1) \left[a_0 + a_2\xi^2 + a_4\xi^4 + \dots + a_n\xi^n \right] = 0$$

A soma dos coeficientes de cada potência de ξ tem que se anular, para todas as potências, para que a igualdade valha para qualquer valor de ξ .

O coeficiente de ξ^n leva à seguinte condição:

$$-2na_n + (\lambda - 1)a_n = 0 \Rightarrow \boxed{\lambda = 2n + 1} \text{ pois } a_n \neq 0.$$

Com os outros coeficientes de ξ podemos obter:

$$2a_2 + (\lambda - 1)a_0 = 0 \text{ (de } \xi^0)$$

$$12a_4 - 4a_2 + (\lambda - 1)a_2 = 0 \text{ (de } \xi^2)$$

$\vdots$

Essas equações nos permitem identificar cada coeficiente a_{k+2} em função do seu antecessor, a_k :

$$a_2 = \frac{1-\lambda}{2} a_0 = -n a_0 ; \quad a_4 = \frac{5-\lambda}{12} a_2 = \frac{2-n}{6} a_2 ; \dots$$

Essas relações podem ser generalizadas, definindo uma relação de recorrência entre coeficientes sucessivos:

$$a_{k+2} = \frac{2(k-n)}{(k+1)(k+2)} a_k$$

Podemos combinar a equação para os polinômios $H(\xi)$, com a relação entre λ e n :

$$\left. \begin{array}{l} \frac{d^2 H}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH}{d\xi} + (\lambda - 1)H = 0 \\ \& \quad \lambda = 2n + 1 \end{array} \right\} \Rightarrow \frac{d^2 H_n}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH_n}{d\xi} + 2nH_n = 0$$

Essa é a equação de Hermite, cujas soluções são os chamados polinômios de Hermite, matemático francês do séc. XIX.

Polinômios de Hermite:

$$H_0(\xi) = 1$$

$$H_1(\xi) = 2\xi$$

$$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2$$

$$H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi$$

⋮

$$E_n = \frac{\hbar\omega_0}{2} \lambda_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

$$E_{n+1} - E_n = \hbar\omega_0$$

