

## Química Teórica & Estrutural

Departamento de Química, Universidade de Coimbra

2013/2014

### Oscilador harmónico

1. Determine a constante de normalização para  $\psi_{v=0}$ .

**Res.:** A função de onda do estado  $v$  para o oscilador Harmónico é dada por

$$\psi_v(x) = N_v H_v(\alpha x) \exp\left(-\frac{\alpha^2 x^2}{2}\right)$$

com  $\alpha = (mk/\hbar^2)^{1/4}$  e  $H_v(z)$  o polinómio de Hermite associado ao estado  $v$ . Para o estado  $v = 0$ , tem-se  $H_0(z) = 1$ , ficando:

$$\psi_{v=0}(x) = N_{v=0} \exp\left(-\frac{\alpha^2 x^2}{2}\right)$$

A constante de normalização pode ser obtida pelo integral:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{v=0}^*(x) \psi_{v=0}(x) dx &= 1 \\ \int_{-\infty}^{\infty} N_{v=0}^2 \exp(-\alpha^2 x^2) dx &= 1 \end{aligned}$$

Pela tabela de integrais  $\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2) = (\pi/a)^{1/2}$ , logo  $a = \alpha^2$  e

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} N_{v=0}^2 \exp(-\alpha^2 x^2) dx &= 1 \\ N_{v=0}^2 (\pi/\alpha^2)^{1/2} &= 1 \\ N_{v=0} &= \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \end{aligned}$$

2. Mostre que  $\psi_{v=0}$  é função própria do operador Hamiltoniano para o oscilador harmónico.

**Res.:** Para demonstrar que  $\psi_{v=0}$  é função própria do operador Hamiltoniano teremos que verificar a condição:

$$\hat{H}\psi_{v=0} = E\psi_{v=0}$$

Sabendo que  $\psi_{v=0} = (\alpha/\sqrt{\pi})^{1/2} \exp(-\alpha^2 x^2/2)$  e  $\hat{H} = -(\hbar^2/2m)d^2/dx^2 + kx^2/2$ :

$$\begin{aligned}
\hat{H}\psi_{v=0} &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}d^2/dx^2 + \frac{1}{2}kx^2\right) \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \exp(-\alpha^2 x^2/2) \\
\frac{d^2}{dx^2} \exp(-\alpha^2 x^2/2) &= (\alpha^4 x^2 - \alpha^2) \exp(-\alpha^2 x^2/2) \\
\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}d^2/dx^2 \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \exp(-\alpha^2 x^2/2) \\
&= -\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \frac{\hbar^2}{2m}d^2/dx^2 = -\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \frac{\hbar^2}{2m}(\alpha^4 x^2 - \alpha^2) \exp(-\alpha^2 x^2/2) \\
&= \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \exp(-\alpha^2 x^2/2) - \underbrace{\frac{mk}{\hbar^2}}_{\equiv \alpha^4} x^2 \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \frac{\hbar^2}{2m} \exp(-\alpha^2 x^2/2) \\
&= \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 \psi_{v=0} - \frac{1}{2}kx^2 \psi_{v=0}
\end{aligned}$$

Logo

$$\begin{aligned}
\hat{H}\psi_{v=0} &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}d^2/dx^2 + \frac{1}{2}kx^2\right) \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \exp(-\alpha^2 x^2/2) \\
&= \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 \psi_{v=0} - \frac{1}{2}kx^2 \psi_{v=0} + \frac{1}{2}kx^2 \psi_{v=0} \\
\hat{H}\psi_{v=0} &= \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 \psi_{v=0} = \text{cte.} \times \psi_{v=0} \quad \text{cdd}
\end{aligned}$$

3. Repita o exercício para  $v = 1$ .

**Res.:** Exercício idêntico ao anterior apenas com  $H(\alpha x) = 2\alpha x$ .

4. Sabendo que  $H_4(\alpha x) = 16(\alpha x)^4 - 48(\alpha x)^2 + 12$  determine os nodos da função de onda do oscilador harmônico.

**Res.:** Os nodos, ou zeros, da função de onda são pontos em que a ela se anula, ou seja,  $\psi_v(x) = 0$ . Dado que a constante de normalização nunca é zero e a função Gaussiana nunca se anula, logo, os nodos da função de onda são resultado da equação  $H_v(\alpha x) = 0$ . Para o caso concreto,

$$H_4(\alpha x) = 16(\alpha x)^4 - 48(\alpha x)^2 + 12 = 0$$

Fazendo  $y = (\alpha x)^2$ , a equação resume-se a  $16y^2 - 48y + 12 = 0$ , com as soluções

$$y = (48 \pm \sqrt{48^2 - 4 \times 16 \times 12}) / (32)$$

$$x = \pm (48 \pm \sqrt{48^2 - 4 \times 16 \times 12}) / (32\alpha^2)$$