

Oscilador harmónico: Exemplos práticos

Química Teórica e Estrutural

P.J.S.B. Caridade & U. Miranda

24/10/2013

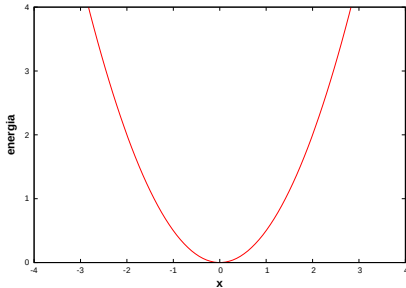
Postulados da Mecânica Quântica

- ▶ Para sistemas protótipo, é possível obter as soluções da mecânica quântica naturalmente:
 - ▶ Partícula na caixa de potencial nas suas variantes; (movimento translacional e estados ligados)
 - ▶ **Oscilador harmónico**; (movimento vibracional)
 - ▶ Rotor rígido. (movimento rotacional)
- ▶ Tirando estes casos, átomo de hidrogénio e alguns sistemas monoelétrónicos, não há soluções exactas.
- ▶ As bases da mecânica quântica é baseada em **7 postulados**, sendo obtidos por indução, *não há demonstrações rigorosas*.
- ▶ A aferição da falha ou demonstração dos postulados baseia-se apenas na concordância dos resultados obtidos com os experimentais (Bosão de Higgs).

Como resolver problemas em Mecânica Quântica

1. Escrever o Hamiltoniano clássico: $H = T + V$
2. Escolher o sistema de coordenadas mais apropriado para o problema: cartesianas? polares?
3. Usando o 2º postulado converter H no operador Hamiltoniano $\hat{H}$.
4. Escrever a equação diferencial e escolher as soluções genéricas desta.
5. Usando o conceito da normalização da função de onda e condições fronteira escrever a função de onda e os valores próprios de $\hat{H}$

Oscilador harmónico



- ▶ Movimento vibracional de moléculas;
- ▶ Estados ligados. Energia de ponto-zero.

Hamiltoniano clássico e operador Hamiltoniano

- ▶ Energia cinética:

$$T = \frac{p_x^2}{2\mu} \quad \mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$$

- ▶ Energia potencial, Lei de Hook ($F = -kx$ e $F = -dV/dx$):

$$V = \frac{1}{2} kx^2$$

- ▶ Operador Hamiltoniano ($p_x = -i\hbar d/dx$):

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{T} + \hat{V} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2 \end{aligned}$$

- ▶ Coordenadas cartesianas... OK! (1D!)

Equação de Schrödinger

$$\hat{H}\psi = E\psi$$
$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} \psi + \frac{1}{2} kx^2 \psi = E\psi$$

Dois métodos podem ser aplicados para resolver esta equação:

- ▶ Factorização do Hamiltoniano, introduzindo o conceito de operador criação-aniquilação.
- ▶ Expressar as soluções em termos de polinómios na coordenada x .

As soluções da equação diferencial são:

$$\psi_v(x) = N_v H_v(\alpha x) \exp(-\alpha^2 x^2 / 2) \quad v = 0, 1, 2, \dots$$

com $\alpha = (\mu k / \hbar^2)^{1/4}$, N_v a constante de normalização e H_v o polinómio de Hermite para v .

Constante de normalização

1. Determine a constante de normalização para $\psi_{v=0}$.
2. Mostre que $\psi_{v=0}$ é função própria do operador Hamiltoniano para o oscilador harmónico.
3. Repita o exercício para $v = 1$.
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 harmónico.

Dados:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-az^2) dz = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} z^2 \exp(-az^2) dz = \frac{\pi^{1/2}}{2a^{3/2}}$$

$$H_0(z) = 1$$

$$H_1(z) = 2z$$

Energia

A energia para um oscilador Harmónico vem dada por

$$E = \left(v + \frac{1}{2} \right) h\omega \quad v = 0, 1, \dots$$

e $\omega = (k/\mu)^{1/2}$. Note que $\omega = \nu/2\pi$.

1. Escreva uma expressão genérica para a diferença energética entre o estado $n + 1$ e n para um oscilador harmónico.

Funções de onda e estados energéticos

