UTILIZAÇÃO DO MÉTODO ANALÍTICO NA RESOLUÇÃO DO PROBLEMA DO OSCILADOR HARMÔNICO QUÂNTICO

João Marcos Kuhn (Aluno/ UTFPR/PG) E-mail: jm_kuhn@hotmail.com
Thiago Gilberto do Prado (Orientador/ UTFPR/PG) E-mail: thiagoprado@utfpr.edu.br
Sani de Carvalho Rutz da Silva (Orientador/ UTFPR/PG) E-mail: sani@utfpr.edu.br

Resumo: O oscilador harmônico quântico é um dos problemas mais importantes da mecânica quântica, devido à a partir dele ser possível resolver uma grande gama de problemas desta teoria. Dentre os métodos matemáticos que possibilitam a solução do problema do oscilador harmônico na mecânica quântica, o método analítico é uma dos que mais se destaca, pois não é um método muito complexo e permite a resolução total do problema, desde a determinação da equação de onda até a energia do oscilador. Neste artigo estaremos aplicando o método analítico na resolução do problema do oscilador harmônico quântico. Como resultado obtemos os níveis quânticos de energia e as funções de onda para cada nível quantizado.

Palavras-chave: Oscilador, Schrödinger, Analítico, Frobenius.

USE OF ANALYTICAL METHOD IN RESOLVING THE PROBLEM OF QUANTUM HARMONIC OSCILLATOR

Abstract: The quantum harmonic oscillator is one of the most important problems of quantum mechanics, due to him from being able to resolve a wide range of problems of this theory. Among the mathematical methods that enable the solution of the harmonic oscillator in quantum mechanics, the analytical method is the one that stands out, it is not a very complex method and allows the full resolution of the problem, since the determination of the wave equation energy to the oscillator. In this article we will be applying the analytical method in solving the problem of the quantum harmonic oscillator. As a result we obtain the quantum energy levels and wave functions for each quantized level.

Keywords: Oscillator, Schrödinger, Analytical, Frobenius.

1. INTRODUÇÃO

É difícil dizer com exatidão quando realmente a mecânica quântica surgiu. Os primeiros indícios de uma nova teoria tornaram-se evidentes quando Max Planck, no final do século XIX, propôs que a energia não era contínua, mas sim quantizada (ASHBY, 1970). A partir disso, vários problemas até então sem solução, de acordo com a teoria clássica, foram resolvidos, dentre os quais se destacam a catástrofe do ultravioleta, explicado pelo próprio Planck, e também o efeito fotoelétrico, observado por Heinrich Hertz e explicado por Albert Einstein (PFEFFER, 2000).

Esta nova descoberta possibilitou o desenvolvimento de inúmeras outras pesquisas e experimentos, além da fundamentação para novas teorias mais abrangentes assim como a Cromodinâmica Quântica (QCD) e a Eletrodinâmica Quântica (QED) . Neils Bohr, por exemplo, propôs um novo modelo atômico, onde um átomo era composto por um núcleo de carga positiva e pela eletrosfera, que era dividida em níveis, chamados níveis de energia, pois uma partícula somente poderia “saltar” de um nível para outro mais carregado se tivesse uma quantia exata de energia (EISBERG, 1963).

Com a descoberta de tantas novas propriedades que não se encaixavam na teoria clássica, fez-se necessária à apresentação de uma nova teoria que explicasse, ou pelo menos que tentasse explicar, o que acontecia no mundo quântico.

Dentre as teorias mais aceitas, encontra-se a Mecânica Quântica de Schrödinger, que relaciona a função de onda de uma partícula com suas energias potenciais e cinéticas. Porém, não é tão simples determinar a energia e a equação de onda de uma partícula, de modo que é preciso procurar algum meio que possibilite isso (TIPLER, 1978).

O oscilador harmônico quântico é utilizado como ferramenta de estudo em diversas pesquisas da mecânica quântica. Silvestrelli (2013) utilizou este modelo para desenvolver um novo método de estudo da Teoria de Densidade Funcional que superasse as limitações impostas à esta teoria pelas interações de Van der Waals. Wang (2013) aplica o oscilador harmônico quântico como método de comparação para um novo método matemático para aprimorar o sistema de operadores escada de Paul Dirac, que é outra forma de expressar a mecânica quântica. Já para Verger e Villaseñor (2009), que revisam aplicações este modelo na teoria de campos, o oscilador harmônico quântico possui importância fundamental na mecânica quântica porque é capaz de explicar a dinâmica de muitos sistemas físicos.

Portanto, o objetivo deste trabalho é utilizar o método analítico na resolução do problema do oscilador harmônico quântico, para se determinar a equação de onda Ψ(x,t) e os energia quânticos do oscilador.

2. O OSCILADOR HARMÔNICO

A equação de Schrödinger dependente do tempo é dada por

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x,t)\ , \tag{1}$$

onde Ψ(x,t) é a equação de onda, V(x) é o potencial, m é a massa da partícula e ħ representa h/2π, sendo h a constante de Planck. Devido à equação (1) ser uma equação diferencial parcial separável, tem-se que

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t) \tag{2}$$

onde *ψ(x)* é a parte dependente apenas da posição e φ(t) é a parte dependente apenas do tempo (LEVINE, 2000).

Sendo assim, a equação (1) pode ser reescrita a partir de duas equações diferenciais ordinárias. A primeira, dependente apenas do tempo, é escrita como

$$i\hbar\frac{1}{\varphi}\frac{d\varphi}{dt} = E\ , \tag{3}$$

onde *E* é a energia associada à Ψ.

De acordo com Boyce (2001), um método para resolver a equação (3) é através da integração, pelo qual obtém-se a solução

$$\varphi(t) = e^{\frac{-iEt}{\hbar}} \tag{4}$$

Segundo Lowe (2006), a segunda equação, dependente apenas da posição, é chamada de *Equação de Schrödinger independente do tempo*, dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)\quad . \tag{5}$$

Sendo esta uma equação diferencial ordinária de segunda ordem, sua solução não é direta, de modo que é preciso utilizar algumas ferramentas matemáticas mais avançadas para tornar isso possível. Uma destas ferramentas para obter soluções de (5) é conhecida como método analítico.

O método analítico consiste na análise do comportamento das equações quando condições extremas são aplicadas às variáveis, através de aproximações e outros conceitos matemáticos.

Para amplitudes pequenas, qualquer movimento oscilatório é aproximadamente um oscilador harmônico simples (GRIFFTHS, 2005). Deste modo, utilizar-se-á o potencial de um oscilador harmônico, dado por

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{6}$$

onde *m* é a massa do corpo e ω é a frequência angular de oscilação. (HALLIDAY, 2009)

Substituindo a equação (6) em (5), obtém-se

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi(x) = E\psi(x) \tag{7}$$

Inserindo os termos $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ e $K = \frac{2E}{\hbar\omega}$ na equação (7), obtém-se

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = (\xi^2 - K)\psi \quad , \tag{8}$$

que possui solução dada por

$$\psi(\xi) = Ae^{-\frac{\xi^2}{2}} + Be^{+\frac{\xi^2}{2}} \tag{9}$$

sendo *A* e *B* constantes (KREYSZIG, 2000).

Porém, a equação de onda precisa ser normalizável, ou seja, tender a zero no infinito. Isto implica que a constante *B* deve ser zero, pois o termo $e^{+\frac{\xi^2}{2}}$ não é normalizável. Assim, para que a igualdade seja mantida, o termo *A* deve corresponder a alguma função *h(ξ)*. Substituindo esta solução na equação (8), tem-se (GRIFFTHS, 2005)

$$\frac{d^2h}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dh}{d\xi} + (K-1)h = 0 \tag{10}$$

De acordo com Butkov (1973), um dos métodos para resolver (10) é através do método de série de potências. Escrevendo *h(ξ)* na forma de série de potência e calculando as derivadas de primeira e segunda ordem, obtém-se

$$h(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j \tag{11}$$

$$\frac{dh}{d\xi} = \sum_{j=0}^{\infty} j a_j \xi^{j-1} \tag{12}$$

$$\frac{d^2h}{d\xi^2} = \sum_{j=0}^{\infty} (j+1)(j+2)a_{j+2}\xi^j \tag{13}$$

Substituindo as equações (11), (12) e (13) na equação (10), esta é reescrita como

$$\sum_{j=0}^{\infty} [(j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + (K-1)a_j]\xi^j = 0 \tag{14}$$

Como o termo ξ^j jamais será zero, para que a igualdade seja mantida, a soma dos coeficientes deve ser nula. Portanto, isolando-se o termo a_{j+2}, tem-se que

$$a_{j+2} = \frac{2j+1-K}{(j+1)(j+2)}a_j \tag{15}$$

Esta equação implica que todos os termos pares sejam gerados pelo termo a_0 e que todos os termos ímpares sejam gerados pelo termo a_1.

Fazendo uma aproximação, para valores muito altos de *j*, a equação (15) é simplificada para

$$a_{j+2} \approx \frac{2}{j} a_j \tag{16}$$

Isto implica que o termo a_j é, aproximadamente,

$$a_j \approx \frac{C}{\left(\frac{j}{2}\right)!} \tag{17}$$

onde C é alguma constante. Deste modo, para altos valores de *j*, a função *h(ξ)* torna-se, aproximadamente,

$$h(\xi) \approx C e^{\xi^2} \tag{18}$$

Esta é exatamente o termo da equação (9) que foi descartada, pois não é normalizável. Deste modo, é necessário que a série de potência seja limitada, para que esta possa ser normalizável.

Sendo *n* o maior valor de *j* para a série, isto implica que a_{n+2} deve ser zero e que a série de paridade diferente de *n* também deve ser nula. Deste modo, para o termo a_{n+2}, o numerador da equação (15) deve ser zero, já que o termo a_n não é nulo. Para que isto ocorra, *K* deve obedecer à relação:

$$K = 2n + 1 \tag{19}$$

Portanto, a energia E do sistema, em função algum *n* inteiro não negativo, será (GRIFFITHS, 2005)

$$E_n = (n + \tfrac{1}{2})\hbar\omega \tag{20}$$

Substituindo (19) em (15), tem-se

$$a_{j+2} = \frac{-2(n-j)}{(j+1)(j+2)} a_j \tag{21}$$

Os polinômios da função *h(ξ)* gerados a partir da equação (21) são chamados de *Polinômios de Hermite* e são, por convenção, escritos de modo que o termo correspondente à maior potência do polinômio seja uma potência de dois (HOLLAUER, 2007).

Um dos meios para se determinar os polinômios de Hermite é através da fórmula de Rodrigues, dada por

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \left(\frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2} \tag{22}$$

Os cinco primeiros polinômios de Hermite estão listados abaixo.

$$H_0 = 1$$

$$H_1 = 2\xi$$

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

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

$$H_4 = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12$$

$$H_5 = 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi$$

$$H_6 = 64\xi^6 - 480\xi^4 + 720\xi^2 - 120$$

Utilizando os polinômios de Hermite, a solução de (7), já normalizada, será

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{\frac{-\xi^2}{2}}$$

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Conforme os cálculos apresentados, substituindo (4) e (23) em (2), obtem-se que a função de onda de uma partícula quântica submetida a um potencial harmônico, é dada por

$$\Psi_n(x,t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{\frac{-\xi^2}{2}} e^{\frac{-iE_n t}{\hbar}} \quad (24)$$

Este resultado é o mesmo que o obtido pelo método algébrico (GRIFFITHS, 2005), ou por outros caminhos, como os utilizados por Levine (2000) e Lowe (2006). Isto mostra que, independente do método aplicado ou do caminho escolhido, o resultado é sempre o mesmo.

Já para a energia, a equação (20) mostra que os níveis de energia de um oscilador harmônico quântico seguem o enunciado de Planck. Estes níveis estão ilustrados na figura 1.

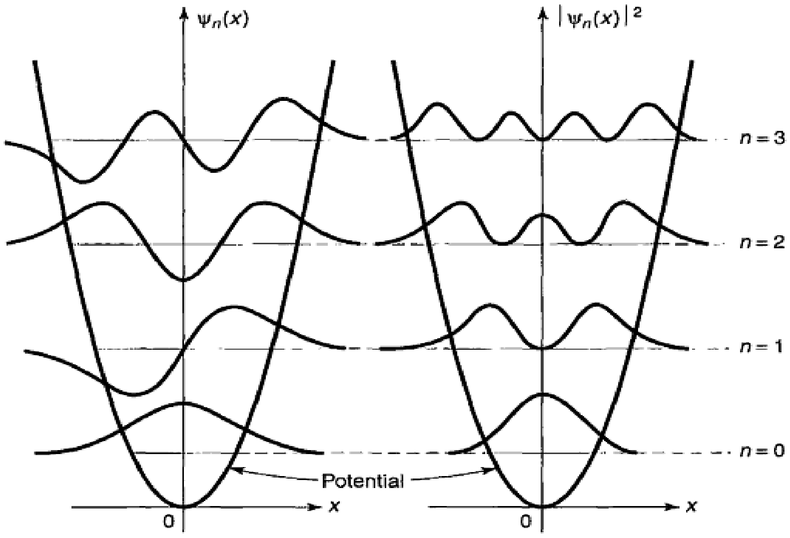

Figura 1 - Relação da função de onda com os níveis de Energia da partícula

Fonte: Griffithis, 2005

Conforme Figura 1, vemos que para cada função de onda existe um único nível de energia associado. Se forem utilizados valores para a energia diferente dos permitidos, de acordo com a equação (20), as funções de onda que seriam encontradas não seriam normalizáveis. A figura 2 exemplifica isso, onde (a) representa a função de onda em termos de ξ para $E = 0{,}49\hbar\omega$ e (b) representa a função de onda em termos de ξ para $E = 0{,}51\hbar\omega$.

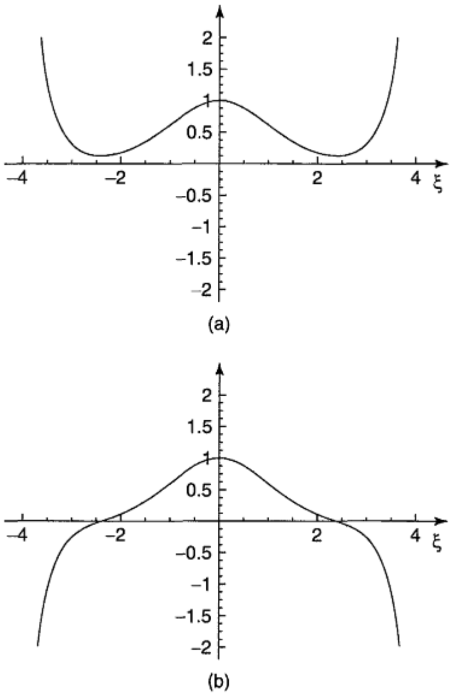

Figura 2 - Soluções para a equação de Schrödinger

Fonte: Griffithis, 2005

Ainda de acordo com a equação (20), observa-se que a energia varia na ordem da constante de Planck. Para sistemas quânticos, essa diferença é significativa. Porém, a níveis macroscópicos, esta diferença torna-se tão pequena que a energia parece se comportar de forma contínua. Este é o motivo pelo qual a teoria Clássica é válida para sistemas macroscópicos e não é satisfatória para sistemas quânticos.

4. CONCLUSÃO

De acordo com os cálculos apresentados, observa-se que o método analítico é uma ferramenta eficiente na aplicação oscilador harmônico na resolução da equação de Schrödinger, pois, conforme foi demonstrado, possibilita a determinação de dois pontos fundamentais desta teoria: a energia e a equação de onda de uma partícula quântica.

O método analítico é mais prático apenas para valores baixos de *n*, pois quanto mais este é acrescido, mais difícil e trabalhoso é encontrar os polinômios de Hermite para a solução do problema, de modo que é mais favorável a aplicação de outros métodos nestes casos.

AGRADECIMENTOS

Ao apoio do CNPQ pela bolsa de iniciação científica (J.M. Kuhn); Universidade Tecnológica Federal do Paraná/PG; Departamento Acadêmico de Matemática UTFPR/PG.

REFERÊNCIAS

ASHBY, N. *Principles of modern physics*. São Francisco: Holden-Day, 1970.

BOYCE, W; DI PRIMA, R. *Elementary Differential Equations*. 7ª ed. John Willey & Sons, 2001.

BUTKOV, E. *Mathematical Physics*. Massachusets: Addison-Wesley, 1973.

EISBERG, R. M. *Fundamentals of Modern Physics*. 3ªed. Nova Iorque: John Willey & Sons, 1963.

GRIFFITHS, D. J. *Introduction to Quantum Mechanics*. 2ªed. Editora Pearson Education, 2005.

HALLIDAY, D; RESNICK, R; WALKER, J. *Fundamentos da Física*. Vol.2. 8ª Ed. Rio de Janeiro: LTC, 2009.

HOLLAUER, E. *Química Quântica.* Rio de Janeiro: LTC, 2007.

KREYSZIG, E. *Advanced Engineering Mathematics*. 9ªed. John Willey & Sons, 2006.

LEVINE, I. N. *Quantum Chemistry*. 5ªed. Nova Jersei: Prentice-Hall, 2000.

LOWE, J. P; PETERSON, K.A. *Quantum Chemistry*. 3ªed. Elsevier, 2006.

PFEFFER, J. I. *Modern Physics: An Introductory Text*. Londres: Imperial College Press, 2000.

SILVESTRELLI, P. L. *Van der Waals Interactions in Density Functional Theory by combining the Quantum Harmonic Oscillator-model with Localized Wannier Functions*. Disponível em: <http://lanl.arxiv.org/pdf/1305.7035.pdf>. Acesso em: 08 jul. 2013.

TIPLER, P. A. *Modern Physics*. Worth Publishers, 1978.

VERGEL, D. G; VILLASEÑOR, E. J. S. *The time-dependent quantum harmonic oscillator revisited: Applications to quantum field theory*. Disponível em: < http://lanl.arxiv.org/pdf/0903.0289.pdf>. Acesso em: 08 jul. 2013.

WANG, Y. *Unified Representation of Quantum Mechanics on One-dimensional Harmonic Oscillator*. Disponível em: < http://lanl.arxiv.org/ftp/arxiv/papers/1303/1303.1618.pdf>. Acesso em: 08 jul. 2013.