3.17 Oscilador armónico en una dimensión

Hasta el momento analizamo potenciales cuadrados ya que la resolución de la ecuación diferencial independinete del tiempo a la que arribamos tiene solución sencilla. En mecánica cuántica (y luego en teoría cuántica campos), los potenciales del tipo oscilador juegan un papel central. También en física nuclear. Dicho potencial para el caso unidimensional es

$$U(x) = \frac{1}{2}kx^2,$$

recordemos que en el caso clásico está asociado a una fuerza restauradora $F(x) = -\frac{d}{dx}U(x) = -kx$ que tiende a volver a la partícula de masa m al punto de equilibrio $x = 0$ y que describia un movimieto $x(t) = Acos(\omega t+\delta), \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$. Es un potencial que no depende explicitamente del tiempo y nuevamente se cumple que tenemos estados estacionarios autoestados de energía $\psi(x,t) = \psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ y debemos solucionar la ecuación independiente del tiempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + \frac{1}{2}kx^2\psi(x) = E\psi(x),$$

donde haciendo el cambio de variables

$$u = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x,\ u' = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}},\ \psi(u) = e^{-\frac{u^2}{2}}\xi(u),$$

obtenemos

$$\begin{aligned}\xi''(u) - 2u\xi'(u) + 2\lambda\xi(u) &= 0,\\ 2\lambda &= \frac{2E}{\hbar\omega}-1.\end{aligned}$$

Vamos a proponer una solución en serie y sus derivadas

$$\begin{aligned}
\xi(u) &= \sum_{n=0}^{\infty} a_n u^n,\\
u\xi'(u) &= \sum_{n=1}^{\infty} n a_n u^n,\\
\xi''(u) &= \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1)a_n u^{n-2} = \sum_{n'=0}^{\infty}(n'+2)(n'+1)a_{n'}\\
n' \to n \Rightarrow \sum_{n=0}^{\infty}(n+2)(n+1)a_{n+2}u^n - 2\sum_{n=1}^{\infty} n a_n u^n + 2\lambda\sum_{n=0}^{\infty} a_n u^n &= 0\\
n = 0 \Rightarrow 2a_2 + 2\lambda a_0 &= 0 \Rightarrow a_2 = \frac{-2\lambda}{2}a_0\\
n \geq 1 \Rightarrow \sum_{n=1}^{\infty}\left[(n+2)(n+1)a_{n+2} + (-2n+2\lambda)a_n\right]u^n &= 0 \Rightarrow a_{n+2} = \frac{(2n-2\lambda)}{(n+2)(n+1)}a_n, n = 1, ...
\end{aligned}$$

$$\Downarrow$$

$$a_{n+2} = \frac{(2n-2\lambda)}{(n+2)(n+1)}a_n, \quad n = 0, 1, ...$$

donde a_0, a_1 estan indeterminados y representan las dos constantes arbitrarias que se asocian a cualquier ecuación de 2do orden.

Ahora si $n \gg 1$ tenemos que $\frac{a_{n+2}}{a_n} \to \frac{2}{n} \Rightarrow \sum_{n\gg1}^{\infty} a_n u^n \to \sum_{n\gg1}^{\infty}(\frac{2}{n})u^n = e^{u^2}$ y como los términos dominantes para n grandes corresponden a u grandes $u \to \infty \psi(u) = e^{-\frac{u^2}{2}}\xi(u) \to e^{u^2/2} \to \infty$ y no corresponde a un estado ligado como debe ser. Para resolver esto pedimos que la serie se corte y de un polinomio que combinado con el factor e^{-u^2}de una función de onda de cuadrado integrable

$$\Rightarrow \quad 2n - 2\lambda \quad = 0 \Rightarrow \frac{2E}{\hbar\omega} - 1 = 2n$$

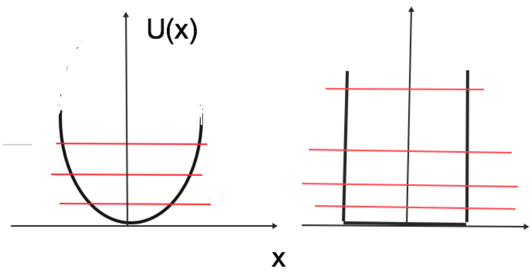
$$\boxed{E_n \quad = \quad (n + \frac{1}{2})\hbar\omega, n = 0, 1, 2, ...}$$

Donde vemos la necesidad de cuantificar y discretizar el espectro para tener estados ligados.

Algunas observaciones interesantes

- $E_{n+1} - E_n = \hbar\omega \Rightarrow$ niveles equidistantes a diferencia por ejemplo del pozo infinito donde la separación crece con n

$$E_{n+1} - E_n \quad = \quad \frac{(n+1)^2\hbar^2}{2mL^2} - \frac{n^2\hbar^2}{2mL^2} = (2n+1)\frac{\hbar^2}{2mL^2}, n = 1, 2, 3, ...,$$



- El estado de menor energía es $E_0 = \hbar\omega/2 \neq 0$ como clásicamente debería de esperarse de una partícula quieta en $x = 0$. Notemos que si asumimos el principio de incerteza debe cumplirse

$$\Delta x \Delta p \quad \geq \quad \hbar$$
$$\Delta x \quad \geq \quad \frac{\hbar}{\Delta p}$$

y por lo tanto nuestra incerteza en medir la energía sería

$$\Delta E = \frac{1}{2}k\Delta x^2 + \frac{1}{2m}\Delta p^2 \geq \frac{1}{2}k\frac{\hbar^2}{\Delta p^2} + \frac{1}{2m}\Delta p^2,$$

y dicha incerteza será mínima si

$$\begin{aligned}
\frac{d\Delta E}{d\Delta p} &= 0 \Rightarrow -m\omega^2\frac{\hbar^2}{\Delta p^3} + \frac{\Delta p}{m} = 0 \Rightarrow \Delta p^2 = m\hbar\omega \\
&\Downarrow \\
\Delta E_{min} &\geq \frac{1}{2}m\omega^2\frac{\hbar^2}{\Delta p^2} + \frac{1}{2m}\Delta p^2 = \hbar\omega > E_0.
\end{aligned}$$

- Dado que el potencial $U(x) = \frac{1}{2}kx^2$ es par entonces si $\psi(x)$ es solución de la ecuación de Scrödinger, también lo será $\psi(-x)$ pues la derivada segunda no cambia al hacer y también lo será $-\psi(-x)$ con lo cual habrá autofunciones pares e impares. La paridad la dará el orden del polinomio que resulta de cortar la serie.

Los polinomios $H_n(u = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x) = \sum_{i=0}^{n} a_n(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x)^i$ son los denominados polinomios de Hermite. Las autofunciones de la energía E_n quedarán

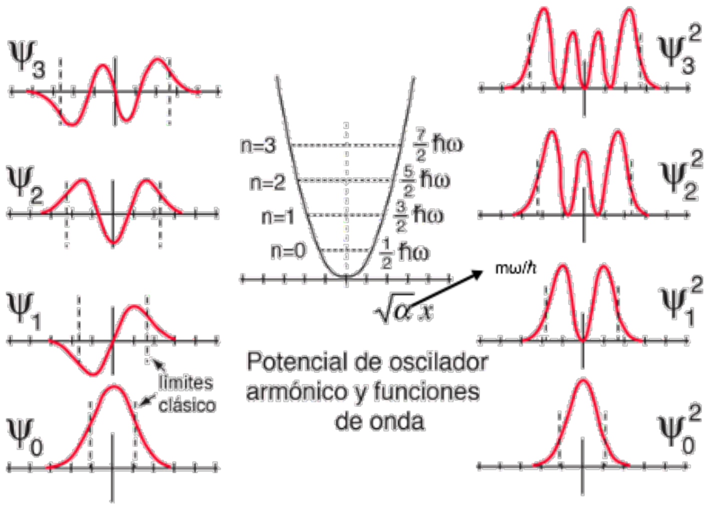
$$\psi_n(x) = C_n e^{-\frac{n\omega x^2}{2\hbar}} H_n(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x),$$

siendo C_n una constante de normalización y

$$\begin{aligned}
H_0(u) &= 1 \\
H_1(u) &= 2u \\
H_2(u) &= -2 + 4u^2 \\
&\cdots \\
&\cdots
\end{aligned}$$

y así

$$\begin{aligned}
\psi_0(x) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} exp(\frac{-m\omega}{2\hbar}x^2) \\
\psi_1(x) &= \left(\frac{4}{\pi}\left[\frac{m\omega}{\hbar}\right]\right)^{1/4} xexp(\frac{-m\omega}{2\hbar}x^2) \\
&\cdots
\end{aligned}$$



Ψ_3
Ψ_2
Ψ_1
Ψ_0
límites
clásico
n=3
n=2
n=1
n=0
$\frac{7}{2}\hbar\omega$
$\frac{5}{2}\hbar\omega$
$\frac{3}{2}\hbar\omega$
$\frac{1}{2}\hbar\omega$
$\sqrt{\alpha}\,x$
$m\omega/\hbar$
Potencial de oscilador
armónico y funciones
de onda
Ψ_3^2
Ψ_2^2
Ψ_1^2
Ψ_0^2

3.18 Problemas tridimensionales y separación de variables

Cuando tengamos que resolver un problema tridimensional donde el potencial puede separarse como

$$U(\boldsymbol{r}) \quad = \quad X(x) + Y(y) + Z(z)$$

tendremos la ecuación de Scrödinger independiente del tiempo

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + (E - U(\mathbf{r}))\psi(\mathbf{r}) \quad = \quad 0,$$

donde si proponemos $\psi(\boldsymbol{r}) = \phi(x)\xi(y)\Theta(z)$ obtendremos

$$\begin{aligned}
&\xi(y)\Theta(z)\frac{\hbar^2}{2m}\phi''(x) && + \\
&\phi(x)\Theta(z)\frac{\hbar^2}{2m}\xi''(y) && + \\
&\phi(x)\xi(y)\frac{\hbar^2}{2m}\Theta''(z) && -\xi(y)\Theta(z)\phi(x)(Y(x) + Z(x) + X(x)) + E \quad \phi(x)\xi(y)\Theta(z) = 0
\end{aligned}$$

dividiendo por $\psi(\boldsymbol{r})$

$$\begin{aligned}
\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\phi''(x)}{\phi(x)} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\xi''(y)}{\xi(y)} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Theta''(z)}{\Theta(z)} - X(x) - Y(y) - Z(z) \quad +E &= \quad 0 \\
\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\phi''(x)}{\phi(x)} - X(x) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\xi''(y)}{\xi(y)} - Y(y) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Theta''(z)}{\Theta(z)} - Z(z) + E \quad &= \quad 0
\end{aligned}$$

$$\boxed{\begin{array}{c}
\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\phi''(x)}{\phi(x)} - X(x) \quad +\epsilon_x = 0 \quad , \qquad \dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\xi''(y)}{\xi(y)} - Y(y) + \epsilon_y = 0, \qquad \dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\Theta''(z)}{\Theta(z)} - Z(z) + \epsilon_z = 0 \\
E \quad = \quad \epsilon_x + \epsilon_y + \epsilon_z, \qquad \psi(\boldsymbol{r}) = \phi(x)\xi(y)\Theta(z)
\end{array}}$$

Este procedimiento también se usa en problemas con simetrías esféricas donde por ejemplo $U(\boldsymbol{r}) = U(r)$, potenciales centrales. En este caso asumimos que

$$\psi(\boldsymbol{r}) \quad = \quad = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi),$$

escribimos el Laplaciano cinético ∇^2en esféricas y proponemos una separación en ecuaciones diferenciales que involucran a cada variable. Ya lo estudiaremos cuando analicemos el átomo de hidrógeno.