7 El oscilador armónico simple revisitado

7.1 Autovalores y autovectores

Es un sistema físico que se presenta en espectroscopia atómica, estado sólido, óptica cuántica, física nuclerar y teoría de campos como mencionamos antes. Su cuantificación ya viene desde Max Planck quien propuso pensar a la radiación electromagnética como osciladores con unidades descretas de energía. Vamos a resolver el problem de otra manera. Propongamos primeramente el Hamiltoniano unidimensional para una partícula de masa m sometida a un potencial de oscilador armónico simple

$$\hat{H}(\hat{x}, \quad \hat{p}) = \frac{\hat{p^2}}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2, \tag{179}$$

donde $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ es la frecuencia clásica de oscilación conectada a la constante de resorte k, que en cada problema concreto estará conectada a quien genere la fuerza elástica. Como vemos $\hat{H}$ es hermítico ya que $\hat{x}, \hat{p}$ lo son. Para encontrar el espectro de autovalores y autovectores de $\hat{H}$ prodriamos resolver la ecuación de Scrödinger independiente del tiempo como hicimos antes y hallar las autofunciones por el método de desarrollo en série, sin embargo seguiremos ahora en forma alternativa el método de operadores propuesto por Dirac.

Par esto se proponen dos operadores de *creación y aniquilación* de algo que ya veremos

$$\hat{a} \;=\; \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(\hat{x} + i\frac{\hat{p}}{m\omega}),\ \hat{a}^{\dagger} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(\hat{x} - i\frac{\hat{p}}{m\omega}), \tag{180}$$

que no son hermíticos (por lo tanto no serán observables) y que cumplen ser uno hermítico conjugado del otro. Además no conmutan entre sí, uds. tendrán que demostrar en la práctica que usando las relaciones canónicas de conmutación

$$[\hat{x}, \hat{p}] \;=\; i\hbar\hat{I},\ [\hat{x}, \hat{x}] = 0,\ [\hat{p}, \hat{p}] = 0,$$

que

$$\left[\hat{a}, \hat{a}^{\dagger}\right] \;=\; \hat{I}.$$

Si ahora también defino el llamado operador número $\hat{N} = \hat{a}^{\dagger}\hat{a}$, porque destruye algo y vuelve a crear donde hay ese algo, además lo hará tantas veces como número de ese algo haya y así examina ese número. Notemos que ese operador número es hermítico y así observable si encontramos una base de autoestados. Podemos pasar

$$\hat{x}, \hat{p} \;\rightarrow\; \hat{a}, \hat{a}^{\dagger}$$

y reescribir el Hamiltoniano (179) teniendo en cuenta que

$$
\begin{aligned}
\hat{N}=\hat{a}^\dagger\hat{a} &= \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(\hat{x}-i\frac{\hat{p}}{m\omega})\right]\left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(\hat{x}+i\frac{\hat{p}}{m\omega})\right] \\
&= \frac{m\omega}{2\hbar}\left(\hat{x}^2+\frac{\hat{p}^2}{m^2\omega^2}+i\frac{[\hat{x},\hat{p}]}{m\omega}\right) \\
&= \frac{\hat{H}}{\hbar\omega}-\frac{1}{2}
\end{aligned}
$$

donde hemos usado nuevamente las relaciones canónica de conmutación y al operador número. Así tendremos

$$
\boxed{\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{N}+\frac{1}{2}\right), \qquad (181)}
$$

donde hemos relacionado la energía con el número de ese algo y $\hbar\omega$.

Notemos que $\left[\hat{N},\hat{H}\right]=0$ y asi pueden ser diagonalizados conjuntamente, es decir formarán si no hay degeneración un COCOOCO. Asi tendremos

$$
\begin{aligned}
\hat{N}\left|n\right\rangle &= n\left|n\right\rangle \\
\hat{H}\left|n\right\rangle &= (E_n=(n+1/2)\,\hbar\omega)\;\left|n\right\rangle,
\end{aligned}
$$

aunque todavia no fijamos propiedades de n. Ahora usando la realción de conmutación entre $\hat{a},\hat{a}^\dagger$ se pueden obtener relaciones adicionales

$$
\begin{aligned}
\left[\hat{N},\hat{a}\right] &= -\hat{a} \\
\left[\hat{N},\hat{a}^\dagger\right] &= \hat{a}^\dagger,
\end{aligned}
$$

y usando ésto pueden denostrar (lo harán en la práctica)

$$
\begin{aligned}
\hat{N}\hat{a}^\dagger\left|n\right\rangle &= (n+1)\hat{a}^\dagger\left|n\right\rangle \\
\hat{N}\hat{a}\left|n\right\rangle &= (n-1)\hat{a}\left|n\right\rangle,
\end{aligned}
$$

lo que muestra que $\hat{a}^\dagger\left|n\right\rangle$ ($\hat{a}\left|n\right\rangle$) son autovectores también con autovalores de $\hat{N}$ donde n se incrementa(decrementa) en 1, de allí el nombre de operadores creación y aniquilación. Esto significa que $\hat{a}\left|n\right\rangle=c\left|n-1\right\rangle$, donde fijaremos la constante por normalización para cada estado

$$
\begin{aligned}
\left|c\right|^2\left\langle n-1\right|\left.n-1\right\rangle &= \left\langle n\right|\hat{a}^\dagger\hat{a}\left|n\right\rangle=\left\langle n\right|\hat{N}\left|n\right\rangle=n \\
\left|c\right|^2 &= n \\
c &= \sqrt{n},
\end{aligned}
$$

y así $\hat{a}\left|n\right\rangle=\sqrt{n}\left|n-1\right\rangle$ donde dado que una fase no tiene significado tomamos a c real y positivo. De igual manera puede comprobarse que $\hat{a}^\dagger\left|n\right\rangle=\sqrt{n+1}\left|n+1\right\rangle$.

Ahora podriamos aplicar sucesivamente en operador de destrucción bajando desde n a $n-1, n-2, ...$ pero como debe cumplirse

$$n = \left\langle n \middle| \hat{N} \middle| n \right\rangle = \left\langle n \left| \hat{a}^{\dagger}\hat{a} \right| n \right\rangle = \left\| \hat{a} \left| n \right\rangle \right\|^2 \geq 0,$$

por lo tanto $n \geq 0\epsilon\mathbb{Z}$. Ahora podriamos encontrar que los autovectores normalizados finalmente son

$$\boxed{\left| n \right\rangle = \frac{\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^n}{\sqrt{n!}} \left| 0 \right\rangle, \ E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega, \ n = 0, 1, 2, (182)}$$

donde $\left| 0 \right\rangle$ es el estado fundamental o de menor energía $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ que *contiene* $n = 0$ *excitaciones*. Podriamos ahora que conocemos los autoestados definir los elementos de matriz de $\hat{x}, \hat{p}$ entre dichos autoestados. Notemos que podemos invertir (180) para obtener

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\hat{a} + \hat{a}^{\dagger}\right), \ \hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(-\hat{a} + \hat{a}^{\dagger}\right), \tag{183}$$

entonces considerando que los autoestados son ortonormales $\left\langle n \right| n' \rangle = \delta nn'$ se pueden hallar los elementos de matriz (usando lo visto antes)

$$\begin{aligned} \left\langle n' \right| \hat{a} \left| n \right\rangle &= \sqrt{n} \left\langle n' \right| n-1 \rangle = \sqrt{n}\delta_{n',n-1} \\ \left\langle n' \right| \hat{a^{\dagger}} \left| n \right\rangle &= \sqrt{n+1} \left\langle n' \right| n+1 \rangle = \sqrt{n}\delta_{n',n+1}, \end{aligned}$$

y ahora usando ésto y la (183) podemos hallar facilmente los elementos de matriz $\left\langle n' \right| \hat{x}, \hat{p} \left| n \right\rangle$ que llamaríamos representación $\hat{N}$. Dado que como vimos arriba $\left[\hat{a}; \hat{a}^{\dagger}, \hat{N}\right] \neq 0$, puede verse que también $\left[\hat{x}; \hat{p}, \hat{N}\right] \neq 0$ con lo cual su matriz representativa no será diagonal.

7.2 Funciones de onda

Para Hallar las funciones de onda de los autoestados (cosa que obtuvimos resolviendo la ec. Scrödinger independiente del tiempo) consideremos que como el estado fundamental no contiene excitaciones

$$\hat{a} \left| 0 \right\rangle = 0,$$

y el representación de posición

$$\begin{aligned} \left\langle x \right| \hat{a} \left| 0 \right\rangle &= \left\langle x \right| \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} (\hat{x} + i\frac{\hat{p}}{m\omega}) \left| 0 \right\rangle = 0 \\ &= \left\langle x \right| \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} (\hat{x} + i\frac{\hat{p}}{m\omega}) \int dx' \left| x' \right\rangle \phi_0(x') = 0 \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \int dx' \delta(x - x') \left(x' - \frac{i^2}{m\omega}\hbar\frac{d}{dx'} \right) \phi_0(x') = 0 \\ &\Downarrow \\ \left(x + x_0^2 \frac{d}{dx} \right) \phi_0(x) &= 0, \ x_0 \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \end{aligned}$$

cuya solución puede comprobarse que es $\phi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}} e^{-\frac{1}{2}(\frac{x}{x_0})^2}$. Y ahora podriamos seguir considerando que $|n=1\rangle = \hat{a}^\dagger |0\rangle$ y escribiendo la definición de $\hat{a}^\dagger$ entérminos de posición e impulso, y calculando $\phi_1(x) = \langle x |n=1\rangle$. En general se obtendría

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{1}{x_0^{n+1/2}}\right) \left(x - x_0^2 \frac{d}{dx}\right)^n e^{-\frac{1}{2}(\frac{x}{x_0})^2}, \tag{184}$$

que puede expresarse también como $\phi_n(x) = C_n e^{-\frac{1}{2}(\frac{x}{x_0})^2} H_n(x^2/x_0^2)$ donde H_n conocidos como polinomios de Hermite, siendo C_n nuevas constantes de normalización adecuadas, siendo

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

Notemos que si calculamos $\hat{x}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right)^2, \hat{p}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}\left(-\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right)^2$ usando las expresiones (183), puede verse que

$$\begin{aligned} \left\langle \hat{x}^2 \right\rangle &= \frac{x_0^2}{2},\ \langle 0| \hat{x} |0\rangle = 0, \\ \left\langle \hat{p}^2 \right\rangle &= \frac{\hbar^2}{4x_0^2},\ \langle 0| \hat{p} |0\rangle = 0, \\ \Delta\hat{x}\Delta\hat{p} &= \sqrt{\left(\langle \hat{x}^2\rangle - \langle \hat{x}\rangle^2\right)\left(\langle \hat{p}^2\rangle - \langle \hat{p}\rangle^2\right)} = \frac{\hbar}{2}, \end{aligned}$$

ya que la función de onda del fundamental es una Gaussiana. Vemos que se satisface el principio de incerteza.

7.3 Evolución temporal

Hasta el momento hemos trabajado en el esquema de Schrödinger. Si queremos comparar con el caso clásico ya sabemos que debemos pasar al de Heisenberg donde

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{x}^H(t)}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{x}^H(t), \hat{H}\right], \\ \frac{d\hat{p}^H(t)}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{p}^H(t), \hat{H}\right], \end{aligned}$$

como las relaciones de conmutación no cambian con el esquema y $\left[\hat{x}, \hat{H}\right] = \left[\hat{x}, \frac{\hat{p}^2}{2m}\right] = i\hbar\frac{\hat{p}}{m}$ y $\left[\hat{p}, \hat{H}\right] = \left[\hat{p}, \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2\right] = -i\hbar m\omega^2\hat{x}$, donde hemos usado las reglas de conmutación canónicas, tendremos

$$\frac{d\hat{x}^H(t)}{dt} = \frac{\hat{p}^H(t)}{m},\ \frac{d\hat{p}^H(t)}{dt} = m\omega^2\hat{x}^H(t), \tag{185}$$

que son ecuaciones acopladas. Sin embargo si usamos la representación en terminos de $\hat{a}^H(t), \hat{a}^{\dagger H}(t)$ se puede ver a partir de su definición en términos de $\hat{x}^H, \hat{p^H}$ que usando las (185)

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{a}^H}{dt} &= -i\omega\hat{a}^H, \\ \frac{d\hat{a}^{\dagger H}}{dt} &= i\omega\hat{a}^{\dagger H}, \end{aligned}$$

que estan desacopladas y tienen solución$\left(\hat{a}^H(0) = \hat{a}\right)$

$$\hat{a}^H(t) = \hat{a}e^{-i\omega t},\ \hat{a}^{\dagger H}(t) = \hat{a}^\dagger e^{i\omega t},$$

y de allí volviendo a la de posición e impulso tendremos

$$\hat{x}^H(t) = \hat{x}cos\omega t + \frac{\hat{p}}{m\omega}sen\omega t = \hat{x}^H(0)cos\omega t + \frac{\hat{p^H}(0)}{m\omega}sen\omega t,$$

similar a la ecuación clásica $x(t) = Acos(\omega t + \delta) = Acos\delta cos\omega t - Asen\delta sen\omega t = x_0 cos\omega t + \frac{p(0)}{m\omega}sen\omega t.$
De acuerdo a las (183) obtendremos $\langle n|\,\hat{x}^H\,|n\rangle = 0$ que no es una función oscilatoria en el tiempo porque son estados estacionarios. Pero si podriamos armar una superposición de estados como si fuera un paquete de ondas donde sí el valor esperado oscile con el tiempo como en el caso clásico, sin ensancharse. Dicho estado se llama *coherente* y se define como el autoestado de $\hat{a}$ (no hermítico)

$$\hat{a}\,|\lambda\rangle = \lambda\,|\lambda\rangle\,,$$

donde en general $\lambda\epsilon\mathbb{C}$. Pueden expandirse en la base $\{|n\rangle\}$ como

$$|\lambda\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} f(n)\,|n\rangle\,,$$

donde puede demostrarse que $|f(n)|^2 = \frac{\langle n\rangle^n}{n!}e^{-\langle n\rangle}$ que es una distribución de tipo Poisson con valor medio $\langle n\rangle$. Verán más sobre ésto en la práctica.