Capítulo 5. El oscilador armónico

5. El oscilador armónico

El estudio de las oscilaciones tiene gran importancia en la mecánica cuántica. Las oscilaciones armónicas se usan como modelo para describir las interacciones que presentan una posición de equilibrio y, en particular, son el modelo más usado para estudiar vibraciones.

5.1. *El oscilador armónico unidimensional*

Un oscilador armónico se caracteriza por un fuerza que es proporcional al desplazamiento, respecto a la posición de equilibrio. Por lo tanto, para este sistema se tiene un potencial cuadrático, $V(x)=\frac{1}{2}kx^2$. En este caso, la ecuación de valores propios de la energía, $\hat{H}u_E = Eu_E$, toma la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_E}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2u_E = Eu_E, \tag{5.1}$$

en donde $\omega^2 \equiv k/m$, así,

$$u_E'' - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2u_E = -\frac{2mE}{\hbar^2}u_E. \tag{5.2}$$

5.1.1. El cambio de escala

Esta ecuación diferencial de segundo orden con coeficientes polinomiales presenta varias combinaciones de constantes que pueden eliminarse mediante un cambio de escala (reescalamiento). Sea $\xi \equiv \alpha x$ la nueva variable independiente, con $\alpha > 0$, entonces $\frac{d}{dx}=\frac{d\xi}{dx}\frac{d}{d\xi}=\alpha\frac{d}{d\xi}$ y $u_E(x)=u_E(\xi/\alpha)=u(\xi)$. Mediante esta transformación la ecuación diferencial toma la forma

$$u'' - \left(\frac{m\omega}{\hbar\alpha^2}\right)^2\xi^2u = -\lambda u, \tag{5.3}$$

en donde $\lambda \equiv 2mE/(\hbar\alpha)^2 > 0$. Si se elige α de tal forma que $m\omega/(\hbar\alpha^2)=1$, entonces

$$u'' - \xi^2 u = -\lambda u\,, \tag{5.4}$$

con $\alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}$ y $E = \frac{1}{2}\hbar\omega\lambda$.

5.1.2. La solución en series

Para resolver la ecuación diferencial con coeficientes variables, ecuación (5.4), se usa el método de Frobenius (método generalizado de serie de potencias). En este método se propone una solución en series de la forma

$$u(\xi) = \xi^s \sum_{j=0}^{\infty} C_j \xi^j = \sum_{j=0}^{\infty} C_j \xi^{s+j}\,, \tag{5.5}$$

en donde $C_0 \neq 0$. Al sustituir el serie en la ecuación diferencial se tiene que

$$\begin{aligned} 0 &= C_0 s(s-1)\xi^{-2} + C_1(s+1)s\xi^{-1} + \left(C_2(s+2)(s+1) + C_0\lambda\right) \\ &\quad + \left(C_3(s+3)(s+2) + C_1\lambda\right)\xi + \sum_{j=2}^{\infty}\left[C_{j+2}(s+j+2)(s+j+1) - C_{j-2} + C_j\lambda\right]\xi^j\,, \end{aligned} \tag{5.6}$$

y al igualar los polinomios se obtienen las relaciones siguientes,

$$\begin{aligned} &C_0 s(s-1) = 0\,, && C_1 s(s+1) = 0\,, \\ &C_2(s+1)(s+2) + \lambda C_0 = 0\,, && C_3(s+2)(s+3) + C_1\lambda = 0\,, \\ &C_{j+2}(s+j+1)(s+j+2) - C_{j-2} + \lambda C_j = 0\,, && (j = 2,3,\ldots)\,. \end{aligned} \tag{5.7}$$

A la primera ecuación se le denomina ecuación indicial y permite determinar los valores de s, en este caso se tiene que $s = 0,1$. Debido a que se tiene un potencial simétrico, las funciones propias deben tener paridad definida, pero, por la forma de la serie de potencias, el factor que aparece fuera de la suma tiene la misma paridad que el parámetro s, por lo que la suma siempre debe ser una función par. Por esta razón, $C_1 = 0$, al igual que todos los coeficientes impares. Los coeficientes pares se obtienen a partir de las relaciones de recurrencia,

$$C_2 = -\frac{\lambda C_0}{(s+2)(s+1)}\,, \quad C_{j+2} = \frac{C_{j-2} - \lambda C_j}{(s+j+2)(s+j+1)}\,, \quad (j = 2,4,6,\ldots)\,. \tag{5.8}$$

Esta ecuación diferencial tiene una relación recursiva de tres términos y no es posible obtener una solución cerrada de los coeficientes. Por esta razón es necesario transformar la ecuación diferencial.

Una posibilidad consiste en separar su comportamiento asintótico (Anexo 5.1). Para valores grandes de $\left|x\right|$, $u'' \sim \xi^2 u$, por lo que la solución debe tener la forma $u \sim e^{-\alpha\xi^2}$. Así, $u' \sim -2\alpha\xi e^{-\alpha\xi^2}$ y

$$0 = u'' - \xi^2 u + \lambda u \sim e^{-\alpha\xi^2}\left[4\alpha^2\xi^2 - \xi^2 - 2\alpha + \lambda\right] \sim e^{-\alpha\xi^2}\left[4\alpha^2 - 1\right]\xi^2, \tag{5.9}$$

por lo que $4\alpha^2 = 1$, o bien $\alpha = \pm\frac{1}{2}$. Sólo para α negativa se tiene una solución normalizable, por tanto $u \sim \exp\left(-\xi^2/2\right)$.

El resultado anterior sugiere el cambio de variable

$$u\left(\xi\right) = e^{-\xi^2/2} H\left(\xi\right). \tag{5.10}$$

Así, $u' = -e^{-\xi^2/2}\xi H + e^{-\xi^2/2}H'$, $u'' = -e^{-\xi^2/2}H + e^{-\xi^2/2}\xi^2 H - 2e^{-\xi^2/2^2}\xi H' + e^{-\xi^2/2}H''$ y

$$0 = u'' + \left(\lambda - \xi^2\right)u = e^{-\xi^2/2}\left[H'' - 2\xi H' + \left(\xi^2 - 1\right)H + \left(\lambda - \xi^2\right)H\right], \tag{5.11}$$

por lo que $H\left(\xi\right)$ satisface la ecuación diferencial

$$H'' - 2\xi H' + \left(\lambda - 1\right)H = 0. \tag{5.12}$$

Esta ecuación diferencial produce una relación de recurrencia de dos términos, la cual si permite obtener soluciones cerradas.

Aplicando el método de Frobenius, en donde $C_0 \neq 0$, se obtiene

$$H = \sum_{j=0}^{\infty} C_j \xi^{j+s}, \qquad \xi H' = \sum_{j=0}^{\infty} C_j\left(s+j\right)\xi^{j+s},$$

$$H'' = \sum_{j=0}^{\infty} C_j\left(s+j\right)\left(s+j-1\right)\xi^{j+s-2} = \sum_{k=-2}^{\infty} C_{k+2}\left(s+k+2\right)\left(s+k+1\right)\xi^{s+k}, \tag{5.13}$$

en donde $k=j-2$. Por lo que

$$\begin{bmatrix} C_0(s-1)s\xi^{-2}+C_1(s+1)s\xi^{-1}+ \\ \sum_{k=0}^{\infty}\left\{C_{k+2}(s+k+2)(s+k+1)+C_k\left[(\lambda-1)-2(s+k)\right]\right\}\xi^k \end{bmatrix}\xi^s=0. \tag{5.14}$$

Al igualar a cero cada coeficiente, se tienen las ecuaciones siguientes:

$$\begin{aligned} &s(s-1)=0, && s=0,1\ , \\ &C_1 s(s+1)=0, && C_1=0, \qquad C_{2k+1}=0\ , \\ &C_{k+2}=\frac{2s+2k-\lambda+1}{(s+k+2)(s+k+1)}C_k, && (k=0,2,4,\ldots). \end{aligned} \tag{5.15}$$

Dado que la solución debe tener paridad, sólo hay términos pares. Así, la solución puede escribirse en la forma

$$H=\xi^s\sum_{m=0}^{\infty}A_m\xi^{2m}, \qquad A_{m+1}=\frac{4m+2s+1-\lambda}{(2m+2+s)(2m+1+s)}A_m, \qquad (m=0,1,2,\ldots), \tag{5.16}$$

en donde $A_m=C_{2m}$ y $s=0,1$.

5.1.3. Los valores propios

Dado que la solución debe ser finita, se compara la serie obtenida con una función exponencial,

$$e^{\alpha\xi^2}=\sum_{m=0}^{\infty}D_m\xi^{2m}, \qquad D_m=\frac{\alpha^m}{m!}, \qquad \frac{D_{m+1}}{D_m}=\frac{\alpha}{m+1}\sim\frac{\alpha}{m}. \tag{5.17}$$

En nuestro caso,

$$\frac{A_{m+1}}{A_m}\sim\frac{4m}{4m^2}=\frac{1}{m}\ , \tag{5.18}$$

y comparando ambos casos se tiene que $\alpha=1$. Así, para valores grandes de ξ, $H\sim e^{\xi^2}$ y $u\sim e^{\xi^2/2}\to\infty$. Entonces, si H es una serie, la función de onda diverge. Por lo tanto, H

debe ser un polinomio; es decir, existe un entero N, tal que $A_{N+1} = A_{N+2} = \cdots = 0$, con $A_N \neq 0$. Al sustituir esta condición en la relación de recurrencia, ecuación (5.16), se tiene que

$$0 = \frac{4N + 2s + 1 - \lambda}{(2N + 2 + s)(2N + 1 + s)} A_N, \qquad (N = 0,1,\ldots), \tag{5.19}$$

por tanto,

$$\lambda = 4N + 1 + 2s, \qquad (N = 0,1,\ldots). \tag{5.20}$$

O bien,

$$\lambda = \begin{cases} 4N+1, & \text{estado par}(s=0) \\ 4N+3, & \text{estado impar}(s=1) \end{cases} \Rightarrow \quad \lambda_n = 2n+1, \quad (n = 0,1,2,\ldots). \tag{5.21}$$

Esto implica que el espectro es discreto e igualmente espaciado,

$$E_n = \frac{1}{2}\hbar\omega(2n+1) = \hbar\omega\left(n + \tfrac{1}{2}\right), \tag{5.22}$$

además,

$$u_n(x) = u_n\left(\frac{\xi}{\alpha}\right) = u(\xi) = N_n e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n(\xi) = N_n e^{-\frac{(\alpha x)^2}{2}} H_n(\alpha x), \tag{5.23}$$

en donde las funciones H_n son polinomios de grado n, denominados polinomios de Hermite (Anexo 5.2), y los coeficientes N_n garantizan la normalización.

5.1.4. La normalización

Dado que las funciones propias deben estar normalizadas, el coeficiente de normalización toma la forma

$$N_n^{-2} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi)^2 \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi)^2 \frac{d\xi}{\alpha}. \tag{5.24}$$

Este tipo de integrales se puede obtener mediante el uso de la función generadora de los polinomios de Hermite (Anexo 5.2).[1] Considere la integral

$$\begin{aligned} I &= \int_{-\infty}^{\infty} G(s,\xi)G(t,\xi)e^{-\xi^2}\,d\xi = \sum_{n,m}\frac{s^n t^m}{n!m!}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2}H_n(\xi)H_m(\xi)\,d\xi \\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\xi^2+2\xi(s+t)-\left(s^2+t^2\right)\right]d\xi \end{aligned} . \tag{5.25}$$

Completando el cuadrado en el exponente, $\xi^2-2\xi(s+t)+s^2+t^2=\left[\xi-(s+t)\right]^2-2st$, se tiene que

$$I = e^{2st}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left[\xi(s+t)\right]^2}\,d\xi = e^{2st}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-w}\,dw = \sqrt{\pi}e^{2st}\ , \tag{5.26}$$

en donde $w=\xi-(s+t)$. Desarrollando este resultado en una serie de potencias, se tiene que

$$I = \sqrt{\pi}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2^n s^n t^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2}H_n(\xi)\,d\xi\,\frac{s^n t^m}{n!m!}\,, \tag{5.27}$$

e igualando coeficientes de ambas series,

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2}H_n(\xi)H_m(\xi)\,d\xi = \begin{cases} 0 & ,n\neq m \\ \sqrt{\pi}\,2^n n! & ,n=m \end{cases} = \sqrt{\pi}\,2^n n!\,\delta_{mn} = \delta_{mn}\frac{\alpha}{N_n^2}\,, \tag{5.28}$$

por lo tanto,

$$N_k^2 = \alpha\frac{1}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2}H_k^2(\xi)\,d\xi} = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\,2^k k!}\,, \qquad N_k = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\,2^k k!}}\,. \tag{5.29}$$

Observe que estos coeficientes cumplen las relaciones siguientes

$$\frac{N_i}{N_j} = \sqrt{\frac{2^{j-i}j!}{i!}}\,; \qquad \frac{N_i}{N_{i+1}} = \sqrt{2(i+1)}\,; \qquad \frac{N_i}{N_{i-1}} = \sqrt{\frac{1}{2i}}\,. \tag{5.30}$$

---

[1] La función generadora de los polinomios de Hermite (Anexo 5.2) tiene la forma

$$G(\xi,s) \equiv e^{\xi^2-(s-\xi)^2} = e^{-s^2+2s\xi} \equiv \sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(\xi)}{n!}s^n\ .$$

Finalmente, las funciones propias toman su forma final,

$$\left|k\right\rangle = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\,2^k k!}}e^{-\frac{1}{2}(\alpha x)^2}H_k(\alpha x), \qquad \left\langle n\middle|m\right\rangle = \delta_{nm}. \tag{5.31}$$

5.1.5. Los elementos de matriz

Para calcular los brakets se pueden utilizar las relaciones de recurrencia de los polinomios de Hermite (Anexo 5.2).[2] Por ejemplo, para los elementos de matriz del operador diferencial,

$$\begin{aligned}\left\langle n\middle|\frac{d}{dx}\middle|m\right\rangle &= \int N_n N_m e^{-\frac{1}{2}\xi^2}H_n(\xi)\frac{d}{dx}\left[e^{-\frac{1}{2}\xi^2}H_m(\xi)\right]dx\\ &= N_n N_m\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\xi^2}H_n(\xi)\frac{d\xi}{dx}\frac{d}{d\xi}\left[e^{-\frac{1}{2}\xi^2}H_m(\xi)\right]\frac{d\xi}{\alpha}.\\ &= N_n N_m\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2}H_n\left[-\xi H_m + H'_m\right]d\xi\end{aligned} \tag{5.32}$$

Dado que, $-\xi H_m + H'_m = -\frac{1}{2}H_{m+1} + mH_{m-1}$, entonces

$$\begin{aligned}\left\langle n\middle|\frac{d}{dx}\middle|m\right\rangle &= N_n N_m\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2}H_n\left[-\frac{1}{2}H_{m+1} + mH_{m-1}\right]d\xi\\ &= N_n N_m\left\{-\frac{1}{2}\sqrt{\pi}\,2^n n!\,\delta_{n,m+1} + m\sqrt{\pi}\,2^n n!\,\delta_{n,m-1}\right\}\\ &= -\frac{1}{2}N_n N_{n-1}\frac{\alpha}{N_n^2}\delta_{n,m+1} + mN_n N_{n+1}\frac{\alpha}{N_n^2}\delta_{n,m-1}\\ &= -\frac{\alpha}{2}\frac{N_m}{N_{m+1}}\delta_{n,m+1} + m\alpha\frac{N_m}{N_{m-1}}\delta_{n,m-1} = -\alpha\sqrt{\frac{m+1}{2}}\delta_{n,m+1} + \alpha\sqrt{\frac{m}{2}}\delta_{n,m-1}\end{aligned}. \tag{5.33}$$

En forma similar se pueden calcular el braket

$$\left\langle n\middle|x\middle|m\right\rangle = \frac{1}{\alpha}\sqrt{\frac{m+1}{2}}\delta_{n,m+1} + \frac{1}{\alpha}\sqrt{\frac{m}{2}}\delta_{n,m-1}, \tag{5.34}$$

[2] Los polinomios de Hermite tienen relaciones de recurrencia entre polinomios de diferente grado y con sus derivadas (Anexo 5.2):

$$H_{k+1}(\xi) = 2\xi\,H_k(\xi) - 2kH_{k-1}(\xi), \qquad H'_k(\xi) = 2kH_{k-1}(\xi).$$

y se puede verificar que se cumple la igualdad $m\left(E_n - E_k\right)\langle n|x|k\rangle = -\hbar^2 \langle n|\frac{d}{dx}|k\rangle$. Los promedios de la energía cinética y potencial también pueden calcularse por este método,

$$\langle T\rangle = \langle n|-\frac{\hbar^2}{2m}D^2|n\rangle = \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2\frac{2n+1}{2} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{m\omega}{\hbar}\left(n+\tfrac{1}{2}\right) = \tfrac{1}{2}\hbar\omega\left(n+\tfrac{1}{2}\right) = \tfrac{1}{2}E_n\,, \qquad (5.35)$$

$$\langle V\rangle = \langle n|\tfrac{1}{2}m\omega^2x^2|n\rangle = \tfrac{1}{2}m\omega^2\frac{1}{\alpha^2}\left(\frac{2n+1}{2}\right) = \tfrac{1}{2}m\omega^2\frac{\hbar}{m\omega}\left(n+\tfrac{1}{2}\right) = \tfrac{1}{2}E_n = \langle T\rangle\,. \qquad (5.36)$$

Esta expresión corresponde a la expresión del teorema virial para el oscilador armónico.

5.2. Los operadores de creación y de aniquilación

La ecuación diferencial del oscilador armónico se puede resolver usando un método algebraico, aprovechando las propiedades de conmutación de los operadores.

En la ecuación diferencial reescalada (5.4), $u'' - \xi^2 u = \left(D^2 - \xi^2\right)u = 0$, el operador de segundo orden tiene la forma algebraica de una diferencia de cuadrados. Esta observación sugiere usar los operadores que provendrían de la factorización hipotética,

$$\hat{a} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{\partial}{\partial\xi}\right), \qquad \hat{a}^+ \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{\partial}{\partial\xi}\right). \qquad (5.37)$$

En términos de la variables físicas, estos operadores tiene la forma

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha x + \frac{1}{\alpha}\frac{d}{dx}\right) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\hat{p}$$

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha x - \frac{1}{\alpha}\frac{d}{dx}\right) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\hat{p}\,, \qquad (5.38)$$

que pueden considerarse como parte de la factorización del operador hamiltoniano,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2\,. \qquad (5.39)$$

A partir de su definición, es posible demostrar que los operadores $\hat{a}$ y $\hat{a}^{+}$ no son hermitianos, pero uno es el adjunto del otro. Dado que estos operadores son combinaciones de los operadores físicos, están relacionados con ellos de forma simple ,

$$\hat{x}=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a}+\hat{a}^{+}\right), \qquad \hat{p}=i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\left(\hat{a}^{+}-\hat{a}\right). \tag{5.40}$$

Adicionalmente,

$$\begin{aligned}\hat{a}^{+}\hat{a}&=\frac{m\omega}{2\hbar}\hat{x}^{2}+\frac{i}{2\hbar}\hat{x}\hat{p}-\frac{i1}{2\hbar}\hat{p}\hat{x}+\frac{1}{2m\hbar\omega}\hat{p}^{2}=\frac{1}{\hbar\omega}\left[\frac{\hat{p}^{2}}{2m}+\frac{m\omega^{2}\hat{x}^{2}}{2}\right]+\frac{i}{2\hbar}\left[\hat{x},\hat{p}\right]\\&=\frac{\hat{H}}{\hbar\omega}-\tfrac{1}{2}\end{aligned}, \tag{5.41}$$

por tanto,

$$\hat{H}=\hbar\omega\left(\hat{a}^{+}\hat{a}+\tfrac{1}{2}\right). \tag{5.42}$$

Los nuevos operadores no conmutan,

$$\begin{aligned}\left[\hat{a},\hat{a}^{+}\right]&=\left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}+i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\omega\hbar}},\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}-i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\right],\\&=i\frac{1}{2\hbar}\left[\hat{p},\hat{x}\right]-i\frac{1}{2\hbar}\left[\hat{x},\hat{p}\right]=-\frac{i}{\hbar}\left[\hat{x},\hat{p}\right]=1\end{aligned} \tag{5.43}$$

así, a partir del conmutador, $\hat{a}\hat{a}^{+}-\hat{a}^{+}\hat{a}=1$, se tiene que

$$\hat{a}\hat{a}^{+}=\hat{a}^{+}\hat{a}+1=\frac{\hat{H}}{\hbar\omega}+\tfrac{1}{2}, \qquad \hat{H}=\hbar\omega\left(\hat{a}\hat{a}^{+}-\tfrac{1}{2}\right). \tag{5.44}$$

Definiendo al operador de número, $\hat{N}\equiv\hat{a}^{+}\hat{a}$, se puede observar que éste está relacionado con el hamiltoniano,

$$\hat{H}=\hbar\omega\left(\hat{N}+\tfrac{1}{2}\right), \qquad \left[\hat{H},\hat{N}\right]=0. \tag{5.45}$$

Analizando las propiedades de conmutación de estos objetos,

$$\left[\hat{N},\hat{a}\right]=\left[\hat{a}^{+}\hat{a},\hat{a}\right]=\hat{a}^{+}\left[\hat{a},\hat{a}\right]+\left[\hat{a}^{+},\hat{a}\right]\hat{a}=-\hat{a}, \qquad \left[\hat{H},\hat{a}\right]=-\hbar\omega\,\hat{a},$$

$$\left[\hat{N},\hat{a}^{+}\right]=\left[\hat{a}^{+}\hat{a},\hat{a}^{+}\right]=\hat{a}^{+}\left[\hat{a},\hat{a}^{+}\right]=\hat{a}^{+}\,, \qquad \left[\hat{H},\hat{a}^{+}\right]=\hbar\omega\,\hat{a}^{+}\,, \tag{5.46}$$

se puede observar que los conmutadores involucran a los mismos operadores.

5.2.1. La ecuación de valores propios

Dado que $\hat{H}$ y $\hat{N}$ conmutan, tienen los mismos kets propios,

$$\hat{N}\left|n\right\rangle=M_{n}\left|n\right\rangle, \qquad \hat{H}\left|n\right\rangle=E_{n}\left|n\right\rangle, \tag{5.47}$$

entonces,

$$\left\langle n\middle|\hat{N}\middle|n\right\rangle=\left\langle n\middle|\frac{\hat{H}}{\hbar\omega}-\frac{1}{2}\middle|n\right\rangle=\frac{E_{n}}{\hbar\omega}-\tfrac{1}{2}=\left\langle n\middle|\hat{a}^{+}\hat{a}\middle|n\right\rangle=\left\langle \hat{a}u_{n}\middle|\hat{a}u_{n}\right\rangle\geq 0\,, \tag{5.48}$$

por lo tanto, el espectro está acotado, $E_{n}\geq\tfrac{1}{2}\hbar\omega$. Aplicando $\hat{a}$ a la ecuación valores propios de la energía,

$$\hat{a}\hat{H}\left|n\right\rangle=E_{n}\hat{a}\left|n\right\rangle, \qquad \left(\hat{H}\hat{a}-\left[\hat{H},\hat{a}\right]\right)\left|n\right\rangle=\hat{H}\hat{a}\left|n\right\rangle+\hbar\omega\,\hat{a}\left|n\right\rangle. \tag{5.49}$$

Así,

$$\hat{H}\left(\hat{a}\left|n\right\rangle\right)=\left(E_{n}-\hbar\omega\right)\left(\hat{a}\left|n\right\rangle\right), \tag{5.50}$$

es decir, $\hat{a}\left|n\right\rangle$ es la función propia con valor propio $E_{n}-\hbar\omega$. Por esta razón, al operador $\hat{a}$ se le denomina operador de aniquilación. En forma similar,

$$\hat{a}^{+}\hat{H}\left|n\right\rangle=E_{n}\hat{a}^{+}\left|n\right\rangle, \qquad \left(\hat{H}\hat{a}^{+}-\left[\hat{H}\hat{a}^{+}\right]\right)\left|n\right\rangle=\hat{H}\hat{a}^{+}\left|n\right\rangle-\hbar\omega\,\hat{a}^{+}\left|n\right\rangle, \tag{5.51}$$

por lo tanto,

$$\hat{H}\left(\hat{a}^{+}\left|n\right\rangle\right)=\left(E_{n}+\hbar\omega\right)\left(\hat{a}^{+}\left|n\right\rangle\right), \tag{5.52}$$

y $\hat{a}^{+}\left|n\right\rangle$ es la función propia con valor propio $E_{n}+\hbar\omega$, por lo que el operador $\hat{a}^{+}$ se le llama operador de creación.

Como el espectro está acotado por abajo, denotaremos con $|0\rangle$ a la función propia con menor valor propio, E_0. Por otro lado, el ket $\hat{a}|0\rangle$ no puede ser un ket propio, ya que no existe ninguno con energía menor que E_0, por lo tanto este ket debe ser igual al ket nulo, $\hat{a}|0\rangle = 0$. Además,

$$\langle 0|\hat{N}|0\rangle = \langle 0|\hat{a}^+ a|0\rangle = \langle au_0|au_0\rangle = 0 = \langle 0|\frac{\hat{H}}{\hbar\omega} - \tfrac{1}{2}|0\rangle = \frac{E_0}{\hbar\omega} - \tfrac{1}{2}, \tag{5.53}$$

por lo tanto $E_0 = \tfrac{1}{2}\hbar\omega$. Los valores propios siguientes se obtienen aplicando el operador de creación,

$$E_n = E_0 + n\hbar\omega = \hbar\omega\left(n + \tfrac{1}{2}\right). \tag{5.54}$$

Observe que, $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$.

Las funciones propias también se obtiene aplicando los operadores de creación y aniquilación

$$\hat{a}|n\rangle = c_n|n-1\rangle, \qquad \hat{a}^+|n\rangle = d_n|n+1\rangle, \tag{5.55}$$

en donde las constantes están fijas por la normalización,

$$\begin{aligned}
\langle \hat{a}u_n|\hat{a}u_n\rangle &= |c_n|^2\langle n-1|n-1\rangle = |c_n|^2 = \langle n|\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = \langle n|\hat{N}|n\rangle = n, \\
\langle \hat{a}^+u_n|\hat{a}^+u_n\rangle &= |d_n|^2\langle n+1|n+1\rangle = |d_n|^2 = \langle n|\hat{a}\hat{a}^+|n\rangle = \langle n|\hat{N}+1|n\rangle = n+1,
\end{aligned} \tag{5.56}$$

entonces, $c_n = \sqrt{n}$ y $d_n = \sqrt{n+1}$, por lo que

$$\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \qquad \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \tag{5.57}$$

y

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\hat{a}^{+n}|0\rangle. \tag{5.58}$$

5.2.2. La función propia del estado basal

El ket propio del estado basal satisface la ecuación $\hat{a}|0\rangle = 0$, por lo tanto,

$$\frac{1}{2}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right)|0\rangle = 0. \tag{5.59}$$

Esta es una ecuación diferencial separable de primer orden,

$$\frac{du_0}{d\xi} = -\xi u_0, \qquad \frac{du_0}{u_0} = -\xi d\xi. \tag{5.60}$$

Integrando,

$$u_0(\xi) = A\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right), \tag{5.61}$$

en donde A se determina por la normalización de la función de onda en el espacio de coordenadas,

$$1 = \langle 0|0\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \left|u_0(\xi)\right|^2 dx = \frac{A^2}{\alpha}\int_{-\infty}^{\infty} -e^{\xi^2}\, d\xi = \frac{A^2}{\alpha}\sqrt{\pi}. \tag{5.62}$$

Así, $A^2 = \alpha / \sqrt{\pi}$

$$|0\rangle = u_0(x) = \frac{\alpha^{1/2}}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{1}{2}(\alpha x)^2}, \tag{5.63}$$

y

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n |0\rangle = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}n!2^n}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\frac{1}{2}\xi^2}. \tag{5.64}$$

5.3 Problemas

1. A partir de la fórmula de Rodrigues, obtenga los seis primeros polinomios de Hermite $(n = 0,1,\ldots,5)$ y calcule las raíces de cada uno de ellos. Haga una gráfica cualitativa de las funciones $\exp(-\xi^2)H_n(\xi)^2$.

2. Para el oscilador armónico calcule

$$\langle k|x|l\rangle \text{ y } \left\langle k\left|\frac{d}{dx}\right|l\right\rangle.$$

Demuestre que

$$\langle n|\hat{T}|n\rangle = \tfrac{1}{2}E_n \text{ y } \langle n|\hat{V}|n\rangle = \tfrac{1}{2}E_n \,.$$

3. Una partícula de masa de 100 g está unida a un resorte con constante de fuerza igual a 1000 $\mathrm{Jm^{-2}}$. Calcule: (a) la energía de estado basal, (b) $\langle \hat{p}^2\rangle$, (c) $\langle \hat{x}^2\rangle$, (d) la separación entre los niveles de energía.

Anexo 5.1. El comportamiento asintótico de $u''+\left(\lambda-\xi^2\right)u=0$

Para este análisis es conveniente transformar la ecuación diferencial en un sistema de ecuaciones de primer orden. Por tanto se usarán las variables u y y,

$$y=u', \qquad y'=u''=\left(\xi^2-\lambda\right)u,$$

que se agrupan en un vector de funciones,

$$\mathbf{X}=\begin{pmatrix} u \\ y \end{pmatrix}.$$

Así,

$$\mathbf{X}'=\begin{pmatrix} u' \\ u'' \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} y \\ \left(\xi^2-\lambda\right)u \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \xi^2-\lambda & 0 \end{pmatrix}\mathbf{X}=\mathbf{BX},$$

en donde

$$\mathbf{B}=\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \xi^2-\lambda & 0 \end{pmatrix}=\xi^2\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}+\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\lambda & 0 \end{pmatrix}=\xi^2\left[\mathbf{B}_0+\frac{1}{\xi^2}\mathbf{B}_2\right],$$

$\mathbf{B}_0$, $\mathbf{B}_2$ son matrices constantes y se ha factorizado la potencia mayor de ξ.

Para el análisis asintótico se requiere que los valores propios de $\mathbf{B}_0$ sean diferentes, por lo que se propone la transformación

$$\mathbf{Z}=\begin{pmatrix} \xi^a & 0 \\ 0 & \xi^b \end{pmatrix}\mathbf{X}=\begin{pmatrix} \xi^a u \\ \xi^b y \end{pmatrix},$$

entonces,

$$\mathbf{Z}'=\begin{pmatrix} a/\xi & \xi^{a-b} \\ \xi^{b-a}\left(\xi^2-\lambda\right) & b/\xi \end{pmatrix}\mathbf{Z}=\begin{pmatrix} a/\xi & \xi^{a-b} \\ \xi^{b-a+2}-\lambda\xi^{b-a} & b/\xi \end{pmatrix}\mathbf{Z}.$$

Dado que los valores propios de la matriz de mayor potencia tienen que ser diferentes, entonces, por simplicidad, se puede elegir que la potencia mayor de los elementos no diagonales sea igual. Entonces, $b-a+2=a-b$, y por tanto $2(b-a+1)=0$ o $a=b+1$. Así,

$$\begin{aligned}\mathbf{Z}' &= \begin{pmatrix} a/\xi & \xi \\ \xi-\lambda/\xi & b/\xi \end{pmatrix}\mathbf{Z} = \begin{pmatrix} 0 & \xi \\ \xi & 0 \end{pmatrix}\mathbf{Z} + \begin{pmatrix} a/\xi & 0 \\ -\lambda/\xi & b/\xi \end{pmatrix}\mathbf{Z} \\ &= \left[\xi\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\xi}\begin{pmatrix} a & 0 \\ -\lambda & b \end{pmatrix}\right]\mathbf{Z} = \xi\left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\xi^2}\begin{pmatrix} a & 0 \\ -\lambda & b \end{pmatrix}\right]\mathbf{Z}\end{aligned}.$$

Para la primera matriz, los valores propios son ± 1. Si se toma la combinación $a=1$ y $b=0$, finalmente se tiene que

$$\mathbf{Z}' = \xi\left(\mathbf{A_0} + \frac{1}{\xi^2}\mathbf{A_2}\right)\mathbf{Z}, \qquad \mathbf{A_0} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{A_2} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\lambda & 0 \end{pmatrix}.$$

Para esta ecuación, se propone una solución asintótica de la forma

$$\mathbf{Z} = e^{a_0\xi^2+a_1\xi}\xi^{\mu}\sum_{k=0}^{\infty}\mathbf{C}_k\xi^{-k} = e^{a_0\xi^2+a_1\xi}\sum_{k=0}^{\infty}\mathbf{C}_k\xi^{\mu-k}.$$

Entonces

$$\begin{aligned}\mathbf{Z}' &= e^{a_0\xi^2+a_1\xi}\left[\sum_{k=0}^{\infty}(\mu-k)\mathbf{C}_k\xi^{\mu-k-1} + (2a_0\xi+a_1)\sum_{k=0}^{\infty}\mathbf{C}_k\xi^{\mu-k}\right] \\ &= e^{a_0\xi^2+a_1\xi}\left[\sum_{l=1}^{\infty}(\mu-l+1)\mathbf{C}_{l-1}\xi^{-l} + 2a_0\sum_{m=-1}^{\infty}\mathbf{C}_{m+1}\xi^{-m} + a_1\sum_{k=0}^{\infty}\mathbf{C}_k\xi^{-k}\right]\xi^{\mu} \\ &= e^{a_0\xi^2+a_1\xi}\xi^{\mu}\left[2a_0\mathbf{C}_0\xi + 2a_0\mathbf{C}_1 + a_1\mathbf{C}_0 + \sum_{k=1}^{\infty}\left\{(\mu-k+1)\mathbf{C}_{k-1} + a_1\mathbf{C}_k + 2a_0\mathbf{C}_{k+1}\right\}\xi^{-k}\right]\end{aligned},$$

y sustituyendo en la ecuación diferencial se tiene que

$$\begin{aligned}\mathbf{Z}' &= \xi\left(\mathbf{A}_0 + \frac{1}{\xi^2}\mathbf{A}_2\right)e^{a_0\xi^2+a_1\xi}\xi^{\mu}\sum_{k=0}^{\infty}\mathbf{C}_k\xi^{-k} = e^{a_0\xi^2+a_0\xi}\xi^{\mu}\sum_{k=0}^{\infty}\left(\mathbf{A}_0 C_k\xi^{1-k} + \mathbf{A}_2\mathbf{C}_k\xi^{-k-1}\right) \\ &= e^{a_0\xi^2+a_1\xi}\xi^{\mu}\left[\sum_{m=-1}^{\infty}\mathbf{A_0}\mathbf{C}_{m+1}\xi^{-m} + \sum_{l=1}^{\infty}\mathbf{A}_2\mathbf{C}_{l-1}\xi^{-l}\right] \\ &= e^{a_0\xi^2+a_1\xi}\xi^{\mu}\left[\mathbf{A}_0\mathbf{C}_0\xi + \mathbf{A}_0\mathbf{C}_1 + \sum_{k=1}^{\infty}\left(\mathbf{A}_0\mathbf{C}_{k+1} + \mathbf{A}_2\mathbf{C}_{k-1}\right)\xi^{-k}\right]\end{aligned}.$$

Al igualar los coeficientes de ambos polinomios:

$$2a_0\mathbf{C}_0=\mathbf{A}_0\mathbf{C}_0, \qquad 2a_0\mathbf{C}_1+a_1\mathbf{C}_0=\mathbf{A}_0\mathbf{C}_1,$$

$$2a_0\mathbf{C}_{k+1}+a_1\mathbf{C}_k+\left(\mu-k+1\right)\mathbf{C}_{k-1}=\mathbf{A}_0\mathbf{C}_{k+1}+\mathbf{A}_2\mathbf{C}_{k-1}, \qquad \left(k=1,2,\ldots\right).$$

De la primera ecuación, $2a_0\mathbf{C}_0=\mathbf{A}_0\mathbf{C}_0$, se puede observar que $2a_0$ corresponde al valor propio de $\mathbf{A_0}$, por lo tanto $2a_0=\pm1$ o $a_0=\pm\frac{1}{2}$. Las otras ecuaciones quedan en la forma

$$\left(\mathbf{A}_0-2a_0\mathbf{I}\right)\mathbf{C}_1=a_1\mathbf{C}_0, \qquad \left(\mathbf{A}_0-2a_0\mathbf{I}\right)\mathbf{C}_{k+1}=a_1\mathbf{C}_k+\left[\left(\mu-k+1\right)\mathbf{I}-\mathbf{A}_2\right]\mathbf{C}_{k-1}.$$

Los vectores propios de $\mathbf{A_0}$ se encuentran resolviendo la ecuación de valores propios:

$$0=\left(\mathbf{A}_0-2a_0\mathbf{I}\right)\mathbf{C}_0=\begin{pmatrix} -2a_0 & 1 \\ 1 & -2a_0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C_{0,1} \\ C_{0,2} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} -2a_0C_{0,1}+C_{0,2} \\ C_{0,1}-2a_0C_{0,2} \end{pmatrix},$$

$$c_0\equiv C_{0,1}, \qquad C_{0,2}=2a_0c_0, \qquad \mathbf{C}_0=c_0\begin{pmatrix} 1 \\ 2a_0 \end{pmatrix}.$$

Entonces,

$$\left(\mathbf{A}_0-2a_0\mathbf{I}\right)\mathbf{C}_1=\begin{pmatrix} -2a_0C_{1,1}+C_{1,2} \\ C_{1,1}-2a_0C_{1,2} \end{pmatrix}=a_1\mathbf{C}_0=\begin{pmatrix} a_1c_0 \\ 2a_0a_1c_0 \end{pmatrix},$$

Como $\left(2a_0\right)^2=1$, entonces la ecuación del segundo renglón puede transformarse en $2a_0C_{1,1}-C_{1,2}=a_1c_0$ y al sumarla a la del primero, obteniendo $2a_1c_0=0$. Por lo tanto $a_1=0$.

Para $k=1$,

$$\left(\mathbf{A}_0-2a_0\mathbf{I}\right)\mathbf{C}_2=\begin{pmatrix} -2a_0C_{2,1}+C_{2,2} \\ C_{2,1}-2a_0C_{2,2} \end{pmatrix}=c_0\begin{pmatrix} \mu-1 & 0 \\ \lambda & \mu \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 2a_0 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} c_0\left(\mu-1\right) \\ c_0\left(\lambda+2a_0\mu\right) \end{pmatrix}.$$

Multiplicando la ecuación del segundo renglón por $2a_0$ y sumándola a la del primero, se obtiene

$$0=\left(\lambda 2a_0+2\mu-1\right)c_0, \qquad \mu=\left(1-2a_0\lambda\right)/2.$$

Como $\mathbf{Z}=\begin{pmatrix}\xi u\\ y\end{pmatrix}$, de la solución asintótica, $u\sim e^{a_0\xi^2}\xi^{\mu-1}\sum_{k=0}^{\infty}C_{k,1}\xi^{-k}$, pero u sólo es finita para $a_0<0$. Por lo tanto, tomando el valor propio negativo, $2a_0=-1$, la solución asintótica queda en la forma

$$u(\xi)\sim e^{-\frac{1}{2}\xi^2}\xi^{\frac{\lambda-1}{2}}c_0\left(1+\cdots\right).$$

Anexo 5.2. Los polinomios de Hermite, $H_n(\xi)$

Los polinomios de Hermite son funciones que satisfacen la ecuación diferencial $H_n'' - 2\xi\, H_n' + 2nH_n = 0$. Ahora se mostrará que estos polinomios también se pueden obtener a partir de una función generadora.

La función generadora de los polinomios de Hermite

Sea $G(\xi,s)$ una función de dos variables definida como

$$G(\xi,s) \equiv e^{\xi^2-(s-\xi)^2} = e^{-s^2+2s\xi} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} s^n \,.$$

A esta función se le llama función generadora debido a que los polinomios H_n se obtienen de los coeficientes del desarrollo en series de Taylor en la variable s. Las propiedades de los polinomios de Hermite H_n también provienen de la función generadora. Por ejemplo, $\partial G/\partial\xi = 2sG$, así

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n'(\xi)}{n!} s^n = 2\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} s^{n+1} = 2\sum_{k=1}^{\infty} \frac{H_{k-1}(\xi)}{(k-1)!} s^k$$

en donde se usó el cambio de índice $k = n+1$. Igualando los coeficientes de ambas series, se obtiene

$$H_0'(\xi) = 0\,, \qquad\qquad H_k'(\xi) = 2kH_{k-1}(\xi)\,, \quad (k = 1,2,\ldots).$$

En forma similar, $\partial G/\partial s = 2(\xi - s)G$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{nH_n s^{n-1}}{n!} = 2\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\xi\, H_n s^n}{n!} - 2\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n s^{n+1}}{n!}$$

$$\sum_{l=0}^{\infty} \frac{H_{l+1} s^l}{l!} = 2\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\xi\, H_n s^n}{n!} - 2\sum_{k=1}^{\infty} \frac{H_{k-1} s^k}{(k-1)!}\,,$$

en donde se hicieron las transformaciones de índices $l = n-1$, $k = n+1$. Comparando los coeficientes de las series:

$$H_1(\xi)=2\xi\, H_0(\xi)\,, \qquad H_{k+1}(\xi)=2\xi\, H_k(\xi)-2kH_{k-1}(\xi)\,, \qquad (k=1,2,\ldots).$$

Las propiedades anteriores permiten obtener la ecuación diferencial de los polinomios H_n,

$$\begin{aligned} H_n''&=2nH_{n-1}'=\left[2nH_{n-1}\right]'=\left[2\xi H_n-H_{n+1}\right]'=2H_n+2\xi H_n'-H_{n+1}' \\ &=2H_n+2\xi H_n'-2(n+1)H_n=2\xi H_n'-2nH_n \end{aligned},$$

así,

$$H_n''-2\xi H_n'+2nH_n=0\,.$$

Por lo tanto, la función $G(\xi,s)\equiv\exp\left(-s^2+2s\xi\right)$ es la función generadora de los polinomios de Hermite.

La fórmula de Rodrigues

Dado que los polinomios son los coeficientes del desarrollo en series de Taylor de la función generadora, G, es posible obtener una expresión explícita para ellos. Al desarrollar a $G(\xi,s)$ con respecto a s se tiene que

$$G(\xi,s)=\sum_{n=0}^{\infty}a_n s^n\,,$$

en donde

$$a_n=\frac{1}{n!}\frac{\partial^n}{\partial s^n}G(\xi,s)\bigg|_{s=0}\,,$$

por lo tanto

$$\begin{aligned} H_n(\xi)&=\frac{\partial^n}{\partial s^n}G(\xi,s)\bigg|_{s=0}=\frac{\partial^n}{\partial s^n}e^{\xi^2-(s-\xi)^2}\bigg|_{s=0}=e^{\xi^2}\frac{\partial^n}{\partial t^n}e^{-t^2}\bigg|_{t=-\xi}=e^{\xi^2}\left(\frac{\partial^n}{\partial(-\xi)^n}e^{-(-\xi)^2}\right) \\ &=e^{\xi^2}(-1)^n\frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} \end{aligned},$$

en donde se usa el cambio de variable $t \equiv s - \xi$. A la ecuación $H_n(\xi) = e^{\xi^2}(-1)^n \dfrac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}$ se le denomina la fórmula de Rodrigues de los polinomios de Hermite. Esta fórmula permite evaluar sucesivamente a todos los polinomios entre 0 y n, por ejemplo, aplicando la ecuación para $n = 2$, se tiene que

$$H_0(\xi) = 1 \quad H_1(\xi) = 2\xi \quad H_2(\xi) = 2(2\xi^2 - 1) \quad .$$

De igual forma, se pueden usar la relación de recurrencia para evaluar otros polinomios, por ejemplo,

$$H_2 = 2\xi H_1 - 2H_0 = 2\xi(2\xi) - 2 \cdot 1 \, .$$

Es importante mencionar que las raíces de los polinomios de Hermite siempre son reales.