4. El Oscilador armónico cuántico (OA)

0. Introducción. Motivación y enunciado del problema
1. Solución de la ec. de Schrödinger indepte. del tiempo
2. Energías y funciones de onda estacionarias.
3. Propiedades interesantes y características del OA cuántico.
4. Evolución temporal de estados no estacionarios. El caso casi-clásico
5. Problemas: Hoja 4

IV - Oscilador Armónico.

1. La función de onda de un oscilador armónico cuántico de masa m y frecuencia angular ω está dada por:

$$\varphi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \phi_n(x)$$

   siendo $\phi_n(x)$ la función de onda del estado estacionario n, de energía $E_n = \hbar\omega(1/2 + n)$. a) ¿Cuál es el valor medio de la energía en función de los coeficientes c_n? Admitiendo que en una medida de la energía se debe obtener precisamente uno de los valores anteriores, ¿cuál es la probabilidad de obtener el valor E_n

   b)¿Cuál es la probabilidad P de que en una medida de la energía en un instante posterior $t > 0$ se obtenga un valor mayor que $2\hbar\omega$? Cuando $P = 0$, ¿qué coeficientes c_n son distintos de cero?

2. Partiendo de los supuestos del problema anterior, supongamos que sólo son distintos de cero c_0 y c_1. Escribir la condición de normalización y el valor medio de la energía $< E >$ en función de c_0 y c_1. Ahora imponemos además que $< E >= \hbar\omega$. Determinar $|c_0|^2$ y $|c_1|^2$.

   b) Fijamos que c_0 sea real y positivo. Determinar el argumento de c_1, θ_1 ($c_1 = |c_1|e^{i\theta_1}$) si además de que $< E >= \hbar\omega$, se cumple también que $< x >= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$.

   c) Escribir $\Psi(t)$ y calcular θ_1 para todo $t > 0$. Deducir de ahí $< x > (t)$.

3. Determinar $< x >$, $< p >$, $< x^2 >$, y $< p^2 >$ en los estados ϕ_0 y ϕ_1 del oscilador armónico. Comprobar que se cumple la relación de incertidumbre.

4. En el estado fundamental del oscilador armónico ¿Cuál es la probabilidad de encontrar la partícula en la zona prohibida clásicamente, es decir donde $V(x) > E$?.

5. Oscilador armónico isótropo en 3D. Una partícula se mueve en el espacio sometida a un potencial $V(x) = (1/2)m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2)$. Encontrar las funciones de onda y las energías de los estados estacionarios. Sugerencia: probar funciones de onda de la forma $\phi(x, y, z) = \phi_1(x)\phi_2(y)\phi_3(z)$.

6. Un oscilador armónico bidimensional isótropo de frecuencia angular ω se encuentra en un estado de energía $2\hbar\omega$. Se sabe que el valor esperado de x^2 es $5\hbar/6m\omega$. Calcular el valor esperado de y^2 y el de la energía potencial.

0. Introducción

En este capítulo estudiamos el problema más importante de la Mecánica (clásica o cuántica) y uno de los contados problemas cuánticos que se pueden resolver exactamente .

Fue resuelto por primera vez por Erwin Schrödinger en uno de sus dos artículos (1926) donde propuso su ecuación.

Su importancia radica en que muchos casos reales se comportan aproximadamente como el oscilador armónico teórico, debido a una propiedad bien conocida según la cual (casi) todo movimiento de pequeña amplitud cerca de un punto de equilibrio es aproximadamente armónico.

Tenemos una partícula de masa *m* cuyo estado cuántico evoluciona sometida a una fuerza conservativa cuyo potencial es:

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

Aquí ω es una constante que define la intensidad del potencial. Su significado físico es la frecuencia angular con la que oscilaría si se comportara clásicamente, pero NO SE COMPORTA ASÍ.

1.Ec de Schrödinger. Cambio de variables y de función

Como casi todo problema de MQ, se trata de obtener las funciones de onda que corresponden a energía definida y los valores de esas energías, ya que cualquier otra función de onda se puede escribir como combinación lineal de ellas

Ec de Schr. del OA:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\varphi(x)=E\varphi(x) \quad (1)$$

Definimos la constante :

$$\beta\equiv\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}};[\beta]=L^{-1} \quad (2)$$

Ahora definimos la constante ε , la variable x', y la función φ' (todas adimensionales):

$$\varepsilon\equiv\frac{E}{\hbar\omega}; \quad x'\equiv\beta x; \qquad \varphi'\equiv\frac{\varphi}{\sqrt{\beta}}\Rightarrow\frac{d\varphi'}{dx'}=\frac{1}{\beta^{3/2}}\frac{d\varphi}{dx};\frac{d^2\varphi'}{dx'^2}=\frac{1}{\beta^{5/2}}\frac{d^2\varphi}{dx^2} \quad (3)$$

Sustituyendo y simplificando queda la ecuación (universal para todo OA):

$$\frac{1}{2}\left[-\frac{d^2\varphi'}{dx'^2}+x'^2\varphi'(x')\right]=\varepsilon\varphi'(x') \quad (4)$$

En el programa Schrödinger,c podíamos haber partido de esta ecuación, pero estos cambios de escala son útiles sólo para el OA

Comportamiento asintótico

La ecuación se puede escribir: $$\frac{d^2\varphi'}{dx'^2} - \left(x'^2 - 2\varepsilon\right)\varphi'(x') = 0 \quad (5)$$

Para valores de x'^2 muy grandes: $x'^2 - 2\varepsilon \cong x'^2 + 1 \cong x'^2 - 1$, la ecuación se puede aproximar por

$$\frac{d^2\varphi'}{dx'^2} - \left(x'^2 - 1\right)\varphi'(x') = 0 \quad (6)$$

Que es satisfecha por la función de Gauss: $$G(x') = cte \times e^{-\frac{1}{2}x'^2}$$

Esto sugiere hacer un nuevo cambio de función definiendo: $$\varphi'(x') = h(x')e^{-\frac{1}{2}x'^2}$$

Polinomios de Hermite

Al sustituir en la ecuación exacta (5), resulta que *h(x')* debe cumplir:

$$\frac{d^2}{dx'^2}h(x') - 2x'\frac{d}{dx'}h(x') + (2\varepsilon - 1)h(x') = 0 \qquad (7)$$

En 1926 esta ecuación diferencial ordinaria era bien conocida por los matemáticos, y Schrödinger sabía perfectamente que las soluciones que no se van a infinito cuando $x' \to \pm\infty$:

* Existen únicamente para valores semi-impares positivos de ε = 1/2, 3/2, 5/2,…

(que hacen el paréntesis entero y par)

* Son polinomios con coef enteros, llamados polinomios de Hermite, $H_n(x')$.

* Entre otras propiedades, el grado de cada polinomio es 2ε-1.($H_0(x') = 1$)

La demostración matemática de esto y de las propiedades de los H_n es:

(1) tediosa y poco formativa

(2) requeriría un capítulo entero dedicado al estudio de los $H_n(x')$ y además

(3) la solución de la ec de Schr se puede obtener de manera mucho más simple utilizando los recursos matemáticos que veremos más tarde.

Propiedades de los Polinomios de Hermite

(Ver Cohen-Tanoudji et al, complemento B_V , aunque en el problema MQ usamos la variable x', aquí vamos a poner x como variable matemática abstracta)

Sea $F^{(n)}(x)$ la derivada n-ésima de la función de Gauss $\exp(-x^2)$.

$H_n(x)$ se define (una entre varias definiciones equivalentes) como:

$$F^{(n)}(x) = (-1)^n H_n(x) e^{-x^2}$$

(Fórmula de Rodrigues)

$$F^{(0)}(x) = e^{-x^2} \Rightarrow H_0(x) = 1$$

$$F^{(1)}(x) = -2x e^{-x^2} \Rightarrow H_0(x) = 2x$$

$$F^{(2)}(x) = \left(4x^2 - 2\right) e^{-x^2} \Rightarrow H_2(x) = 4x^2 - 2$$

* Se puede demostrar (ver por ejemplo Cohen-Tanoudji, et al) que cumplen la ecuación diferencial

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - 2x\frac{d}{dx} + 2n\right] H_n(x) = 0$$

(que es la (7) anterior)

* Cada $H_n(x)$ tiene exactamente n raíces reales y distintas

* Cumplen varias relaciones de recurrencia, que permiten obtener (especialmente en programas de ordenador) todos los polinomios a partir de los 2 primeros:

$$2x\, H_n(x) = 2nH_{n-1}(x) + H_{n+1}(x)$$

$$\frac{dH_n(x)}{dx} = 2nH_{n-1}(x)$$

* Cada $H_n(x)$ tiene paridad definida, igual al grado n: $H_n(-x) = (-1)^n H_n(x)$

Energías y funciones de onda

Volviendo a las unidades físicas convencionales:

$$\boxed{E_n = \hbar\omega\varepsilon_n = \hbar\omega\left(\frac{1}{2}+n\right)}$$

$$\varphi_n(x) = A_n H_n(\beta x) e^{-\frac{1}{2}\beta^2 x^2}\ ;\ \beta \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

Las constantes A_n "de normalización" son en principio arbitrarias pero se deben elegir de modo que:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi_n(x)|^2 dx = 1$$

Que representa el hecho de que en cualquier estado φ_n la probabilidad de que la partícula esté en algún sitio debe ser la unidad.

Es decir:

$$|A_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\beta x)^2 e^{-\beta^2 x^2} dx = \frac{|A_n|^2}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} H_n(u)^2 e^{-u^2} du = 1$$

La integral puede resolverse analíticamente de manera cerrada $\forall n$ y finalmente queda:

$$\boxed{\varphi_n(x) = \left(\frac{\beta^2}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n\ n!}} e^{-\beta^2 x^2/2} H_n(\beta x)}$$

Energías y funciones de onda

$$\boxed{E_n = \hbar\omega\left(\frac{1}{2}+n\right)}$$

$$\boxed{\varphi_n(x) = \left(\frac{\beta^2}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n \quad n!}} e^{-\beta^2 x^2/2} H_n(\beta x)}$$

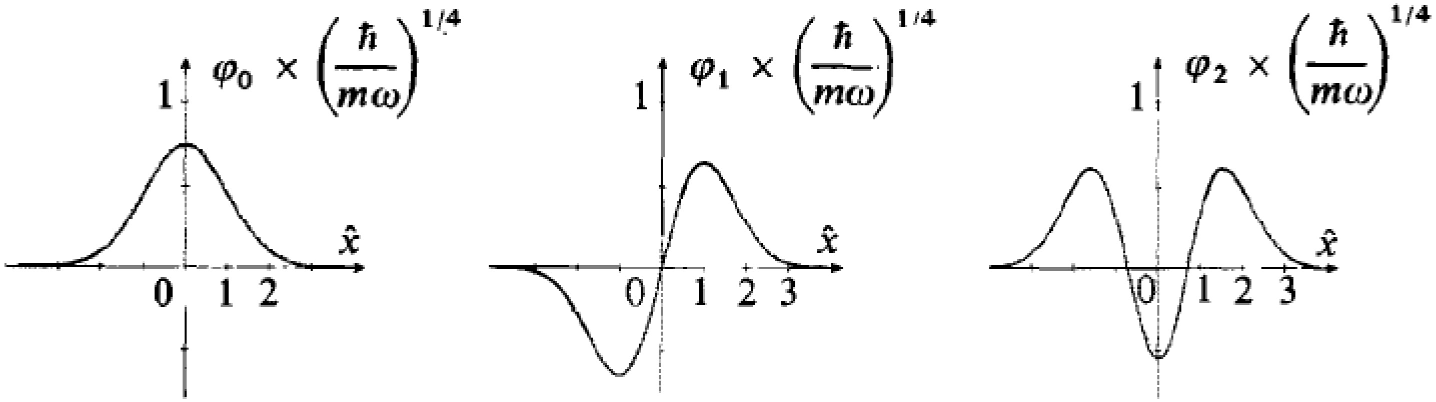

FIGURE 4

Wave functions associated with the first three levels of a harmonic oscillator.

Propiedades interesantes del OA

* En comparación con la suposición de Planck-Einstein, la diferencia de energía entre dos estados consecutivos es ciertamente constante:

$$E_{n+1} - E_n = \hbar\omega, \forall n$$

* Esto es suficiente para poder explicar la ley de radiación del cuerpo negro o la capacidad calorífica de un conjunto de osciladores cuánticos, pero la energía NO ES $n\hbar\omega$ sino: $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$

* La energía mínima es la del estado fundamental, con $n = 0$, $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$

$E_0 > 0$ porque debe ser compatible con la relación de incertidumbre

Esta es una condición común a muchos problemas de MQ (también ocurrirá en el átomo de hidrógeno)

* Recordemos que los estados representados por las anteriores f. de. o. son estacionarios y no evolucionan:

$$\Psi_n(x,t) = \varphi_n(x)e^{-i\frac{En}{\hbar}t} = \varphi_n(x)e^{-i\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega t}$$

* Así pues, si la partícula está en uno de esos estados NO OSCILA, sino que su posición es indeterminada, siendo la media ("valor esperado") cero.

* No confundir la "frecuencia clásica" del oscilador ω con la "frecuencia de Bohr" : $\omega_n \equiv E_n/\hbar$ de una función de onda. Las frecuencias de Bohr son múltiplos impares de la fundamental, que es $\omega/2$.

* La función de onda del estado fundamental es un paquete gaussiano, que en este caso es estacionario.

* Veamos la incertidumbre en la posición y el momento en el estado fundamental, φ_0:

$$\Delta x^2 \equiv \left\langle \left(x - \langle x \rangle\right)^2 \right\rangle \geq 0$$

<…> $\equiv$ valor medio o esperado de cualquier magnitud. En este caso $\langle x \rangle = 0$

$$\Delta x^2 = \left\langle x^2 \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_0(x)^* x^2 \varphi_0(x) dx = |A_0|^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\beta^2 x^2} dx = \frac{|A_0|^2}{\beta^3} \int_{-\infty}^{\infty} u^2 e^{-u^2} du = \ldots = \frac{1}{2} \frac{\hbar}{m\omega}$$

* Ahora la incertidumbre en el momento en el estado fundamental, φ_0:

$$\Delta p^2 = \langle p^2 \rangle = -\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_0(x)^* \hbar^2 \frac{d^2\varphi_0(x)}{dx^2} dx = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{d}{dx}\left(\varphi_0(x) \frac{d\varphi_0(x)}{dx} \right) - \left(\frac{d\varphi_0(x)}{dx} \right)^2 \right] dx =$$

$$= \hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \left[\left(\frac{d\varphi_0(x)}{dx} \right)^2 \right] dx = \hbar^2 \beta^4 |A_0|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \left[x^2 e^{-\beta^2 x^2} \right] dx = m^2\omega^2 \Delta x^2 = \frac{1}{2} m\omega\hbar$$

Por tanto en el estado fundamental, φ_0, se cumple: $(\Delta p \Delta x)_{n=0} = \frac{1}{2}\hbar$

Es decir, que en el estado fundamental del oscilador armónico se tiene la incertidumbre mínima, que corresponde a un paquete gaussiano.

* Análogamente (se deduce de otra forma más sencilla, ver Cohen-T et al, cap 5 D), la incertidumbre en otros estados diferentes del fundamental ("estados excitados") es:

$$(\Delta p \Delta x)_n = \left(n + \frac{1}{2} \right)\hbar > \frac{1}{2}\hbar$$

* Las f. de o. φ_n se extienden teóricamente hasta el infinito (es decir, en la realidad NO, porque el oscilador armónico es sólo un modelo teórico que no se va a cumplir nunca para grandes amplitudes en los casos reales), pero Δx (ya que <x> = 0) supone una cierta analogía con la amplitud de un oscilador clásico.

Veamos: La energía clásica es (A_{cl} = amplitud) es $E_{cl} = \frac{1}{2} m\omega^2 A_{cl}^2$

Si igualamos dicha energía a la de uno de los estados φ_n obtenemos:

$$A_{cl} = \sqrt{\frac{2\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar}{m\omega}} = \sqrt{2}\Delta x$$

* En un estado φ_n no están definidas ni la energía potencial, ni la cinética, porque no lo están ni x ni p.

Podemos calcular su valor medio:

$$\langle V(x)\rangle_n = \frac{1}{2} m\omega\langle x^2\rangle = \frac{1}{2} m\omega\Delta x^2 = \frac{1}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \frac{1}{2}E_n$$

$$\langle T\rangle_n = \left\langle\frac{p2}{2m}\right\rangle = \frac{1}{2m}\langle p^2\rangle = \frac{1}{2m}\left(n+\frac{1}{2}\right)m\hbar\omega = \frac{1}{2}E_n$$

Este es un caso particular del llamado teorema del virial, que se verá

Evolución temporal

Siguiendo la teoría general de Schrödinger, si el oscilador se encuentra en un estado φ_n la función de onda en cualquier instante se obtiene multiplicándola por el factor $\exp(-iE_n t/\hbar)$, lo que da una f. de o. que se diferencia en un factor de fase global.

Este factor de fase global no afecta a las probabilidades de las magnitudes físicas, por lo que las sucesivas funciones de onda representan el mismo estado físico y por tanto éste no evoluciona.

Sin embargo el estado más general posible es una superposición lineal de todas las funciones de onda φ_n (se puede demostrar que cualquier función de x de cuadrado integrable se puede escribir así, lo veremos en el capítulo siguiente)

Supongamos que en $t=0$ el estado de la partícula viene descrito por la f. de o.:

$$\Psi(x,t=0)=\sum_{n=0}^{\infty} c_n(0)\varphi_n(x)$$

Tratamos de ver cómo es $\Psi(x,t)$ en otro instante cualquiera.

$$\Psi(x,t)=\sum_{n=0}^{\infty}c_n(0)\varphi_n(x)e^{-i\frac{En}{\hbar}t}=\sum_{n=0}^{\infty}c_n(0)\varphi_n(x)e^{-i\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega t}\equiv\sum_{n=0}^{\infty}c_n(t)\varphi_n(x)$$

El valor medio de una magnitud física cualquiera A será:

$$\langle A\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\Psi(x,t)^*A\Psi(x,t)dx=\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}c_m(0)^*c_n(0)A_{mn}e^{i(m-n)\omega t}$$

Donde definimos $$A_{mn}\equiv\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_m(x)^*A(x,p)\varphi_n(x)dx$$

y donde *A(x,p)* es el "operador" que se obtiene reemplazando

$$p\rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

En la definición clásica de la magnitud *A*.

Consideremos los casos concretos $A = X$ y $A = P$

(con mayúscula para recordar que hablamos del operador y no del valor concreto de x o de p)

$$X_{mn} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_m(x)^* x \varphi_n(x) dx = const \cdot \int_{-\infty}^{\infty} H_m(\beta x) x H_n(\beta x) e^{-\beta^2 x^2} dx = const \cdot \int_{-\infty}^{\infty} H_m(z) z H_n(z) e^{-z^2} dz$$

No es muy difícil mostrar que esta integral es nula excepto si $n = m \pm 1$

Así pues <x> es una suma de constantes multiplicadas por $e^{i\omega t}$ o por $e^{-i\omega t}$, es decir sinusoidal en ωt con una fase inicial dependiente de los valores de las constantes, como la predicción clásica (pero $\langle x \rangle = 0$ si es un estado estacionario, o sea cuando sólo una $c_n \neq 0$)

También se puede demostrar que $P_{nm} = 0$ excepto si $n = m \pm 1$, *luego* $\langle p \rangle$ también oscila sinusoidalmente salvo si sólo existe una $c_n \neq 0$, pues entonces $\langle p \rangle = 0$.

También se puede demostrar que: $\dfrac{d\langle x \rangle}{dt} = \dfrac{1}{m}\langle p \rangle \qquad \dfrac{d\langle p \rangle}{dt} = -m\omega^2 \langle x \rangle$

Es decir que los valores medios obedecen a las leyes del movimiento clásicas de Newton

IV - Oscilador Armónico.

1. La función de onda de un oscilador armónico cuántico de masa m y frecuencia angular ω está dada por:
$$\varphi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \phi_n(x)$$
siendo $\phi_n(x)$ la función de onda del estado estacionario n, de energía $E_n = \hbar\omega(1/2 + n)$. a) ¿Cuál es el valor medio de la energía en función de los coeficientes c_n? Admitiendo que en una medida de la energía se debe obtener precisamente uno de los valores anteriores, ¿cuál es la probabilidad de obtener el valor E_n

   b)¿Cuál es la probabilidad P de que en una medida de la energía en un instante posterior $t > 0$ se obtenga un valor mayor que $2\hbar\omega$? Cuando $P = 0$, ¿qué coeficientes c_n son distintos de cero?

2. Partiendo de los supuestos del problema anterior, supongamos que sólo son distintos de cero c_0 y c_1. Escribir la condición de normalización y el valor medio de la energía $< E >$ en función de c_0 y c_1. Ahora imponemos además que $< E >= \hbar\omega$. Determinar $|c_0|^2$ y $|c_1|^2$.

   b) Fijamos que c_0 sea real y positivo. Determinar el argumento de c_1, θ_1 ($c_1 = |c_1|e^{i\theta_1}$) si además de que $< E >= \hbar\omega$, se cumple también que $< x >= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$.

   c) Escribir $\Psi(t)$ y calcular θ_1 para todo $t > 0$. Deducir de ahí $< x > (t)$.

3. Determinar $< x >$, $< p >$, $< x^2 >$, y $< p^2 >$ en los estados ϕ_0 y ϕ_1 del oscilador armónico. Comprobar que se cumple la relación de incertidumbre.

4. En el estado fundamental del oscilador armónico ¿Cuál es la probabilidad de encontrar la partícula en la zona prohibida clásicamente, es decir donde $V(x) > E$?.

5. Oscilador armónico isótropo en 3D. Una partícula se mueve en el espacio sometida a un potencial $V(x) = (1/2)m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2)$. Encontrar las funciones de onda y las energías de los estados estacionarios. Sugerencia: probar funciones de onda de la forma $\phi(x, y, z) = \phi_1(x)\phi_2(y)\phi_3(z)$.

6. Un oscilador armónico bidimensional isótropo de frecuencia angular ω se encuentra en un estado de energía $2\hbar\omega$. Se sabe que el valor esperado de x^2 es $5\hbar/6m\omega$. Calcular el valor esperado de y^2 y el de la energía potencial.