

# Capítulo 7 Oscilador armónico cuántico

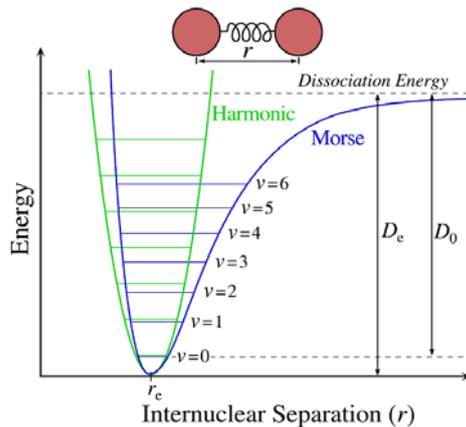
La ecuación de Schrödinger para el oscilador armónico cuántico corresponde a una partícula moviéndose en el potencial de un resorte elástico

$$V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2 \quad \#$$

Si bien a nivel atómico no existen los resortes, el modelo es muy usado como una aproximación para otro tipo de potenciales que si ocurren en el nivel atómico o molecular. Por ejemplo, los dos átomos en una molécula diatómica están unidos por efecto de un potencial de ligadura originado en la unión química covalente. Ese potencial, llamado potencial de Morse, viene dado por la expresión

$$V(r) = D_e(1 - \exp - \alpha(r - r_e))^2 \quad \#$$

y genera una posición de equilibrio como la que se muestra en la figura.



Para pequeñas oscilaciones de los átomos alrededor de su posición de equilibrio el potencial del oscilador es un buena aproximación para eset problema en la región del mínimo.

La ecuación de Schrödinger con el potencial armónico es

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

Podemos simplificar el aspecto de esta ecuación introduciendo una variable adimensional en lugar de la coordenada x. Para ello notamos primeramente que la cantidad  $\frac{\hbar\omega}{2}$  es un unidad natural de energía para este problema por lo que definimos una variable adimensional para la energía  $\varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$ . Luego podemos escribir

$$-\frac{\hbar}{m\omega} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \left(\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right)\psi(x) = \frac{2E}{\hbar\omega}\psi(x) \quad \#$$

Como el segundo miembro es adimensional, el primero también debe serlo; en particular el término  $\frac{m\omega}{\hbar}x^2$  es adimensional. De este hecho surge que la unidad natural de longitud para el problema es  $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ , cuyo significado físico veremos más abajo. Por tanto una variable conveniente resulta

$$\xi = \frac{x}{x_0}; \rightarrow x = x_0 \xi \quad \#$$

Con esta variable la ecuación se puede escribir

$$\frac{d^2 \psi(\xi)}{d\xi^2} + (\varepsilon - \xi^2) \psi(\xi) = 0 \quad \#$$

donde

$$\varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad \#$$

Vemos que la función de onda debe ser tal que su derivada segunda genere un factor  $\xi^2$  más una constante multiplicada por la función original  $\psi$ . Esto sugiere que una posible solución puede ser

$$\psi(\xi) = C \exp - \frac{1}{2} \xi^2 \quad \#$$

Esta forma, llamada función gaussiana, satisface la condición de ir a cero en el infinito, lo que hace posible normalizar la función de onda.

Vemos ahora que los términos de la ecuación son

$$\frac{d\psi(\xi)}{d\xi} = -C\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad \#$$

$$\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} = C e^{-\frac{1}{2}\xi^2} (\xi^2 - 1)$$

y por tanto la ecuación de Schrödinger nos da

$$C e^{-\frac{1}{2}\xi^2} (\xi^2 - 1) + (\varepsilon - \xi^2) C \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) = C e^{-\frac{1}{2}\xi^2} (\varepsilon - 1) = 0 \quad \#$$

Para que la función elegida sea efectivamente una solución debe anularse el término  $\varepsilon - 1$ , lo que implica

$$E = \frac{\hbar\omega}{2} \quad \#$$

Este procedimiento nos da la energía de este estado pero no sabemos si es el estado de menor energía. Para verificar esto recurrimos al principio de incerteza y escribimos para la mínima energía

$$E = \frac{1}{2m} (\Delta p)^2 + \frac{m\omega^2}{2} (\Delta x)^2 \quad \#$$

En el límite más bajo de la relación de incerteza tenemos

$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2} \quad \#$$

Expresando todo en términos de la incerteza en posición vemos que

$$E = \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2} + \frac{m\omega^2}{2} (\Delta x)^2 \quad \#$$

Buscando el mínimo de esta expresión calculamos

$$\frac{dE}{d\Delta x} = -2 \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^3} + 2 \frac{m\omega^2}{2} (\Delta x) \quad \#$$

de donde sigue

$$\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} = \frac{1}{\sqrt{2}} x_0 \quad \#$$

y luego

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2} + \frac{m\omega^2}{2} (\Delta x)^2 = \frac{1}{2} \omega \hbar \quad \#$$

Este resultado muestra, como ya vimos en el caso de la partícula en una caja, que la energía del estado fundamental no puede ser nula (partícula en reposo) pues esa condición violaría el principio de incerteza. Como el oscilador armónico aparece también en el contexto de las vibraciones de los átomos en un sólido, la energía finita del estado fundamental suele interpretarse como "energía del punto cero", esto es, la mínima energía que pueden tener las vibraciones de los átomos a la temperatura del cero absoluto.

Los autovalores de la energía están dados por la relación

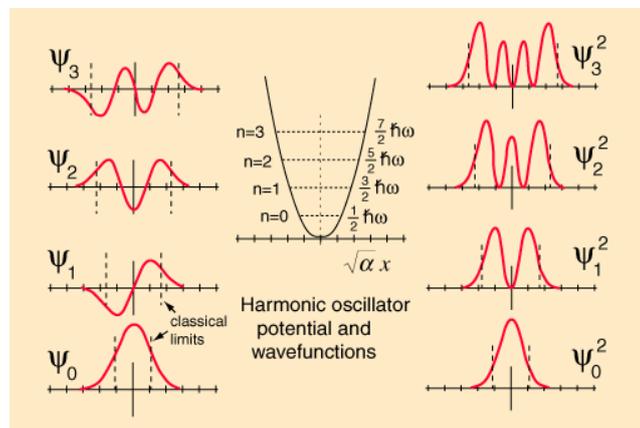
$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad \#$$

Todas las funciones de onda del oscilador armónico cuántico contienen la forma gaussiana que acabamos de introducir, lo que les permite cumplir las condiciones de contorno en el infinito. En las funciones de onda asociadas con un dado valor del número cuántico  $n$ , la función gaussiana está multiplicada por un polinomio de orden  $n$  llamado polinomio de Hermite  $H_n(\xi)$ . La forma general de las funciones de onda normalizadas es

$$\psi_n(\xi) = \left( \frac{1}{\pi} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) \exp - \frac{1}{2} \xi^2 \quad \#$$

que satisfacen la condición de normalización

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(\xi)|^2 d\xi = 1 \quad \#$$



Los polinomios de Hermite satisfacen la siguiente relación de recurrencia

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - H'_n(x)$$

#

y los primeros diez son

$$H_0(x) = 1$$

$$H_1(x) = 2x$$

$$H_2(x) = 4x^2 - 2$$

$$H_3(x) = 8x^3 - 12x$$

$$H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12$$

$$H_5(x) = 32x^5 - 160x^3 + 120x$$

$$H_6(x) = 64x^6 - 480x^4 + 720x^2 - 120$$

$$H_7(x) = 128x^7 - 1344x^5 + 3360x^3 - 1680x$$

$$H_8(x) = 256x^8 - 3584x^6 + 13440x^4 - 13440x^2 + 1680$$

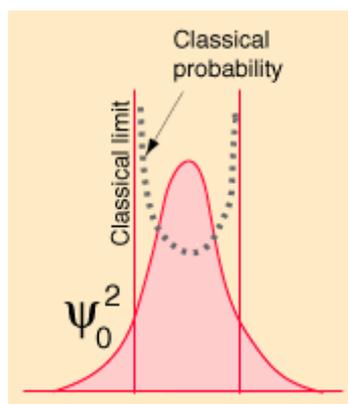
$$H_9(x) = 512x^9 - 9216x^7 + 48384x^5 - 80640x^3 + 30240x$$

$$H_{10}(x) = 1024x^{10} - 23040x^8 + 161280x^6 - 403200x^4 + 302400x^2 - 30240$$

## Principio de correspondencia

La mecánica cuántica describe la naturaleza a escala atómica, pero las leyes de Newton siguen siendo válidas para objetos macroscópicos. Desde un principio, Niels Bohr impulsó lo que llamaba el *principio de correspondencia*, que dice que para números cuánticos suficientemente grandes, los resultados del tratamiento cuántico debe asemejarse con los del clásico.

Si se mira el estado fundamental del oscilador armónico cuántico, se ve una gran diferencia entre ambas descripciones. En particular el punto donde es más probable encontrar la partícula es muy diferente en ambos casos. En el caso del oscilador cuántico vemos que para el estado fundamental, la partícula pasa la mayor parte del tiempo cerca del punto central. En el caso clásico en cambio la partícula pasa muy poco tiempo allí porque es el punto en que tiene máxima velocidad. Por el contrario pasa la mayor parte del tiempo cerca de los puntos finales de la oscilación porque allí es donde se detiene para iniciar el camino de regreso.



Si analizamos los estados excitados veremos que la ubicación más probable se desplaza hacia los extremos. Se mantiene una oscilación de la probabilidad, algo característico de la solución de onda, pero la tendencia general de la curva se asemeja a la probabilidad clásica, que se muestra mediante la línea discontinua.

