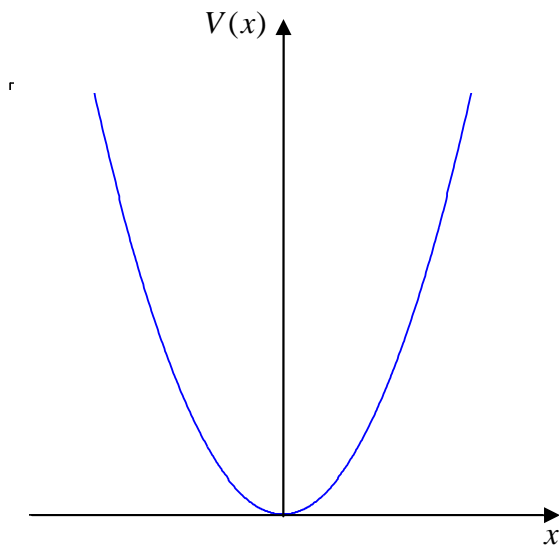


Clase 22: Potenciales en una dimensión – Oscilador armónico

El comportamiento de una partícula sometida a un potencial armónico no es solo importante en sí mismo, sino que hay muchos sistemas que pueden analizarse en términos de sus modos normales, que son, formalmente, equivalentes a osciladores armónicos en una dimensión. Entre estos, tenemos las vibraciones de los átomos en una molécula o en una red cristalina, el campo electromagnético, etc.

Planck, recordemos, postuló que el intercambio de energía entre los osciladores de la pared en la cavidad isotérmica y los modos electromagnéticos de oscilación en la cavidad solo podía hacerse en cantidades $\Delta E = h\nu = \hbar\omega$ (y no le fue nada mal!). Esto significaría que la diferencia entre los niveles energéticos de un oscilador debería ser $\hbar\omega$. Vamos a resolver el oscilador armónico dentro del formalismo de Schrödinger y averiguar si esta hipótesis de Planck se verifica teóricamente.



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

Es un potencial continuo, por lo que la ecuación de Schrödinger estacionaria es válida en todo el rango de x . Además, la energía solo puede ser $E > 0$.

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

Reordenamos la ecuación:

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x))\varphi(x) &= 0 \\ \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \right) \varphi(x) &= 0 \end{aligned}$$

Para resolver la ecuación diferencial, conviene adimensionalizar. Definimos:

$$\alpha^2 = \frac{m\omega}{\hbar} \quad \beta = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad u = \alpha x$$

Con esto, la ecuación resulta:

$$\frac{d^2}{du^2} \varphi(u) + \left(\frac{\beta}{\alpha^2} - u^2 \right) \varphi(u) = 0 \quad (1)$$

- Como lo que estamos encontrando son funciones de onda, estas deben ser continuas y acotadas para el rango de la variable. Una práctica usual, entonces, al resolver la ecuación de Schrödinger, es estudiar *a priori* el comportamiento asintótico de la función para evitar posibles divergencias. Si bien esto no garantiza totalmente el buen comportamiento de la función que estamos resolviendo, al menos, permite

eliminar alguna divergencia. Al final, se vuelve a verificar que la función se porte bien y, en caso necesario, se eliminan las divergencias que pueda haber. Esto *es* aplicar la condición de contorno de la función de onda.

- Entonces, las $\varphi(u)$ deben ser continuas y acotadas $\forall u$:

Estudiamos el comportamiento asintótico. Si consideramos $u^2 \rightarrow \infty$, en la ecuación (1) se puede “tirar”

$\frac{\beta}{\alpha^2}$ frente a u^2 , y la ecuación asintótica resulta:

$$\frac{d^2}{du^2} \varphi_{as}(u) - u^2 \varphi_{as}(u) = 0 \quad (2)$$

Esta es la ecuación cuya solución es una gaussiana. Pero para no quedarnos solo con eso, vamos a relacionar esta ecuación con la ya conocida del pozo cuadrado:

$$\frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) - k^2 \varphi(x) = 0 \quad \text{donde } k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_o - E)$$

que tiene como soluciones e^{-kx} y e^{kx} .

En nuestro caso, $V_o \rightarrow \gamma u^2$. Entonces:

$$k = \frac{[2m(\gamma u^2 - E)]^{\frac{1}{2}}}{\hbar} \xrightarrow[u \rightarrow \infty]{} \frac{[2m\gamma u^2]^{\frac{1}{2}}}{\hbar} \rightarrow Cu \quad \text{con } C = \text{cte}$$

Es decir, para $u \rightarrow \infty$, comparando con las soluciones del pozo, cabe esperar que $\varphi_{as}(u)$ vaya como:

$$\varphi_{as}(u) \propto \underset{=0}{A} e^{Cu^2} + B e^{-Cu^2} \propto e^{-Cu^2} \quad \text{donde } A = 0 \text{ para que no diverja.}$$

En la ecuación (2), la derivada segunda:

$$\frac{d^2}{du^2} (e^{-Cu^2}) = -2C [e^{-Cu^2} + u(-2Cu e^{-Cu^2})] \xrightarrow[u \rightarrow \infty]{} 4C^2 u^2 e^{-Cu^2}$$

Reemplazando en la ecuación:

$$(4C^2 u^2 - u^2) e^{-Cu^2} = (4C^2 - 1) u^2 e^{-Cu^2} = 0 \Rightarrow (4C^2 - 1) = 0 \quad \text{porque debe valer } \forall u:$$

$$\Rightarrow C = \frac{1}{2}$$

Entonces:

$$\boxed{\varphi_{as}(u) \propto e^{-\frac{1}{2}u^2}}$$

- Es un truco usual intentar una solución que sea la solución asintótica por otra función:
- $\varphi(u) = e^{-\frac{1}{2}u^2} H(u)$ (aquí ya extrajimos una divergencia)

Introducimos esta función en (1) y queda una ecuación diferencial para $H(u)$:

$$\frac{d^2}{du^2} H(u) - 2u \frac{d}{du} H(u) + \left(\frac{\beta}{\alpha^2} - 1 \right) H(u) = 0$$

Esta es una ecuación diferencial conocida → ecuación de Hermite. Vamos a encontrar la solución.

- Como solución, intentamos un desarrollo en serie:

$$H(u) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k u^k$$

$$\frac{d}{du} H(u) = \sum_{k=1}^{\infty} k a_k u^{k-1}$$

$$\frac{d^2}{du^2} H(u) = \sum_{k=2}^{\infty} k(k-1) a_k u^{k-2}$$

En la ecuación diferencial:

$$\sum_{k=2}^{\infty} k(k-1) a_k u^{k-2} - 2u \sum_{k=1}^{\infty} k a_k u^{k-1} + \left(\frac{\beta}{\alpha^2} - 1 \right) \sum_{k=0}^{\infty} a_k u^k = 0$$

Esta ecuación debe cumplirse $\forall u \Rightarrow$ los coeficientes de cada potencia deben ser nulos. Vamos a acomodar un poco las sumatorias:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left[(k+2)(k+1) a_{k+2} u^k - 2k a_k u^k + \left(\frac{\beta}{\alpha^2} - 1 \right) a_k u^k \right] = 0$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left[(k+2)(k+1) a_{k+2} - 2k a_k + \left(\frac{\beta}{\alpha^2} - 1 \right) a_k \right] u^k = 0$$

Es decir:

$$\left[(k+2)(k+1) a_{k+2} - 2k a_k + \left(\frac{\beta}{\alpha^2} - 1 \right) a_k \right] = 0 \Rightarrow a_{k+2} = \frac{(2k+1) - \frac{\beta}{\alpha^2}}{(k+2)(k+1)} a_k$$

Encontramos una *relación de recurrencia*. Vemos que necesitamos dos constantes de integración, a_0 y a_1 , para obtener todos los coeficientes de las series. Y eso está bien, porque la ecuación es una ecuación de segundo grado. Estos coeficientes se obtienen con la normalización de las funciones de onda. Y vemos que son dos series: con el coeficiente a_0 obtenemos la serie de las potencias pares, y con el coeficiente a_1 , la serie de las potencias impares.

- Todo bien? No, pues vamos a ver que estas series infinitas no son buenas funciones de onda, porque divergen en $\pm \infty$. Para verlo, vamos a comparar nuestra solución con alguna serie. Veamos; la función encontrada “completa” es:

$$\varphi(u) = e^{-\frac{1}{2}u^2} H(u)$$

El factor $e^{-\frac{1}{2}u^2}$ mata casi cualquier función en $|u| \rightarrow \infty$. El problema sería si $H(u \rightarrow \pm \infty) \rightarrow e^{\gamma u^2}$ con $\gamma \geq \frac{1}{2}$. En ese caso, la función $\varphi(u)$ no estaría acotada y divergiría en $\pm \infty$. Entonces comparemos

nuestra serie con la serie e^{u^2} para $u \rightarrow \pm \infty$:

$$e^{u^2} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{u^{2k}}{k!} = \sum_{\substack{k=0 \\ \text{pares}}}^{\infty} \frac{u^k}{\left(\frac{k}{2}\right)!}$$

La forma de ver si las dos series se portan de la misma manera para $u \rightarrow \pm\infty$ es comparar el cociente entre dos potencias sucesivas. Como estamos viendo cómo se comportan para u grande, comparamos para $k \gg$ (porque estos son los términos que dominan la serie en ese límite):

$$\frac{\left(\frac{k}{2}\right)!}{\left(\frac{k}{2}+1\right)!} = \frac{1}{\frac{k}{2}+1} \rightarrow \frac{2}{k} \text{ para } k \gg$$

Nuestra serie de las potencias pares:

$$\frac{a_{k+2}}{a_k} = \frac{(2k+1) - \frac{\beta}{\alpha^2}}{(k+2)(k+1)} \rightarrow \frac{2k}{k^2} = \frac{2}{k} \text{ para } k \gg$$

Ambas series solo pueden diferir en un factor constante en ese límite. Para la serie de los impares, solo hay que sacar factor común u de la serie, y entonces solo difieren en $u \times cte$. O sea:

$$H(u \rightarrow \infty) \rightarrow \begin{cases} Ae^{u^2} & \text{para la serie de los pares} \\ A'ue^{u^2} & \text{para la serie de los impares} \end{cases}$$

• Así, $\varphi(u) = e^{-\frac{1}{2}u^2} H(u)$ diverge para $|u| \rightarrow \infty$. Todo está mal? No. La matemática nos da *todas* las soluciones posibles de una ecuación. De todas, tenemos que quedarnos con aquellas que tengan sentido físico, es decir, sean buenas funciones de onda. Es evidente que para las series infinitas la cosa anda mal. Entonces, buscamos truncar las series, con lo que, de todas las soluciones posibles, nos quedamos con los polinomios. Esto es aplicar la condición de contorno. Si miramos la relación de recurrencia, vemos que, si para algún k el coeficiente $a_k = 0$, todos los coeficientes siguientes van a ser nulos. Podemos hacer eso? Sí, pues todavía tenemos que determinar las energías posibles y, estas están en β . Entonces, para la potencia $k = n$:

$$(2n+1) - \frac{\beta}{\alpha^2} = 0$$

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

Encontramos las energías permitidas. El oscilador tiene un espectro discreto, y las energías están cuantificadas y n nos da la energía de cada nivel. La diferencia de energía entre dos niveles sucesivos es:

$$\Delta E = \hbar\omega \quad \text{Planck tenía razón!}$$

• Lo que nunca hubiera podido imaginar Planck es ese término $\frac{1}{2}$ que aparece en la expresión de la energía. El cero de energías está en $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$, contrariamente a lo que sucede clásicamente (esto ya lo

discutimos en la clase 19), y está relacionado con el principio de incerteza. E_0 es el nivel de energía mínima y, por lo tanto, también podría ser de reposo. Pero el “reposo cuántico” no es lo mismo que el clásico. El reposo clásico en un campo $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ corresponde a que la partícula esté en el mínimo de potencial y sin velocidad alguna. Pero esto no puede ser así cuánticamente porque debe cumplirse el principio de incerteza. Si tengo a la partícula en el mínimo del potencial, $\Delta x = 0$, y por lo tanto, $\Delta p \rightarrow \infty \Rightarrow \Delta T \rightarrow \infty$; y si $\Delta p = 0$, entonces $\Delta x \rightarrow \infty$ y la partícula no está localizada. Por lo tanto, el *reposo cuántico* es un compromiso entre $\Delta x \neq 0$ y $\Delta p \neq 0$, pero tal que $\Delta x \Delta p$ es lo mínimo posible. Y esto va a corresponder al estado de mínima energía $\varphi_0(x)$. En $\varphi_0(x)$ yo tengo la mínima energía cinética posible y la mínima dispersión espacial compatible con el principio de incerteza. Esta energía se llama *energía del punto cero* y es fundamental en cualquier cálculo que se haga, por ejemplo, de las vibraciones de los átomos en una red cristalina o de los estados vibracionales de las moléculas.

- Con estas ideas, calculemos la energía del punto cero por el principio de incerteza. La diferencia de energía entre el nivel de mínima energía y el cero del potencial es:

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

con $\Delta x \Delta p \approx \frac{\hbar}{2}$ (como corresponde a la mínima incerteza)

$$\Delta E = \frac{1}{2m} \frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2} + \frac{1}{2}m\omega^2(\Delta x)^2 = \frac{1}{8m} \frac{\hbar^2}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{2}m\omega^2(\Delta x)^2$$

Para que sea mínima:

$$\frac{d(\Delta E)}{d(\Delta x)} = -\frac{\hbar^2}{8m} \frac{2}{(\Delta x)^3} + m\omega^2(\Delta x) = 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{4m} + m\omega^2(\Delta x)^4 = 0 \Rightarrow \Delta x = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{1}{2}}$$

Con este valor: $\Delta p = \left(\frac{\hbar m \omega}{2}\right)^{\frac{1}{2}}$

$$\text{y } \Delta E = \frac{1}{2m} \frac{\hbar m \omega}{2} + \frac{1}{2}m\omega^2 \frac{\hbar}{2m\omega} \Rightarrow \boxed{\Delta E = \frac{1}{2}\hbar\omega}$$

- Volviendo a las funciones de onda, entonces:

$$\varphi_n(u) = A_n e^{-\frac{1}{2}u^2} H_n(u) \rightarrow \text{corresponde al nivel } E_n$$

donde los $H_n(u)$ son polinomios de grado n y se llaman *polinomios de Hermite*, y A_n es el factor de normalización:

$$\varphi_n(u) = \left(\frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}} \right) e^{-\frac{1}{2}u^2} H_n(u)$$

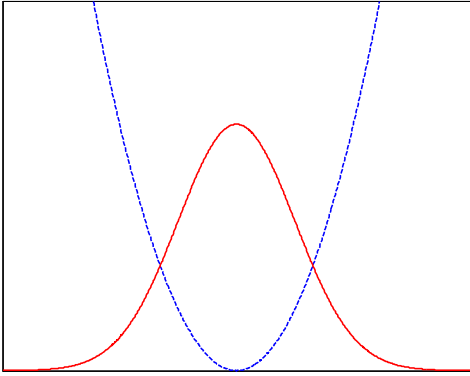
Los polinomios de Hermite, para los primeros niveles son:

n	$H_n(u)$	Paridad
0	1	+1
1	$2u$	-1
2	$2 - 4u^2$	+1
3	$12u - 8u^3$	-1

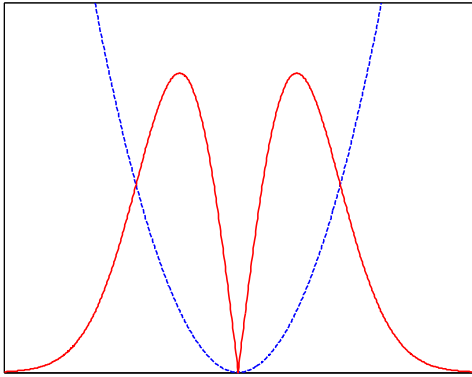
Notemos que las funciones son pares o impares (tienen una paridad bien definida), es decir, simétricas o antisimétricas respecto de la simetría del potencial, como corresponde para que la densidad de probabilidad tenga la misma simetría que el potencial. Esto ya lo discutimos en la clase 19.

- Vemos que, en todos los casos, la función de onda es la gaussiana “partida” por el polinomio de grado n . Esto hace que, a medida que n aumenta, las funciones de onda (y las densidades de probabilidad) aumenten el número de nodos. De hecho, el número de nodos es igual a n .
- Grafiquemos las primeras densidades de probabilidad (superponemos el gráfico del potencial para que se vea por dónde se extiende la función). Vemos cómo la densidad de probabilidad tiene la misma simetría que el potencial. Noten también cómo se extiende fuera del pozo (eso ya no nos asusta), y cómo los lóbulos más cercanos a los puntos de retorno clásicos son más altos que en el centro del pozo, a medida que aumenta n (piensen por qué y traten de relacionarlo con lo que sería la probabilidad de encontrar a la partícula entre $(x, x + dx)$ en el caso clásico - dónde tendrían más probabilidad de encontrarla?)

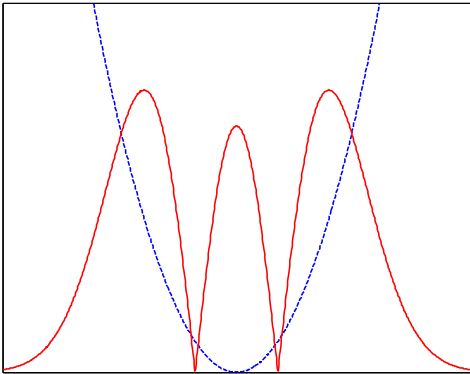
$n = 0$



$n = 1$



$n = 2$



$n = 3$

