1. Oscilador armónico simple clásico

La posición y momento de un oscilador armónico simple (HSO por sus siglas en inglés) viene caracterizada por su amplitud a, su frecuencia ω ($\sqrt{k/m}$ donde k es la constante de elasticidad) y el ángulo de fase ϕ:

$$x = a\ \cos(\omega t + \phi),\ p = -m\,\omega\,a\ \mathrm{sen}\,(\omega t + \phi) \tag{1}$$

usamos las relaciones Euler

$$\cos\alpha = \frac{1}{2}(e^{i\alpha} + ie^{-i\alpha}),\ \mathrm{sen}\,\alpha = \frac{1}{2}(e^{i\alpha} - ie^{-i\alpha}) \tag{2}$$

resultando

$$x = \frac{a}{2}\left(e^{i(\omega t+\phi)} + e^{-i(\omega t+\phi)}\right) = A\,e^{-i\omega t} + cc \tag{3}$$

donde $A = a/2\ e^{-i\phi}$ y cc es el complejo conjugado del primer sumando. A partir de esta ecuación deducimos las ecuaciones de la velocidad, aceleración y momento del SHO

$$\dot{x} = -i\omega x, \qquad \ddot{x} = -\omega^2 x, \qquad p = -im\omega Ae^{-i\omega t} + cc \tag{4}$$

con las que expresamos la energía total o hamiltoniano como la suma de su energía cinética y potencial

$$H = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{5}$$

siendo las variables dinámicas canónicas la posición x y el momento p.

2. Cuantización del HSO

El primer paso es convertir las variables dinámicas canónicas en operadores

$$\hat{x} \equiv x, \qquad \hat{p} \equiv \frac{\hbar}{i}\partial_x, \qquad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \tag{6}$$

y el segundo consiste en que las variables deben cumplir las relaciones de conmutación, que reemplazan los paréntesis clásicos de Poisson

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar, \qquad [\hat{x}, \hat{x}] = [\hat{p}, \hat{p}] = 0 \tag{7}$$

como la información del sistema mecánico cuántico está contenida en la función de onda $\phi(x)$ la ecuación independiente del tiempo de Schrödinger para el SHO cuántico es

$$\hat{H}\phi(x) = E\phi(x), \qquad \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\phi(x) = E\phi(x) \tag{8}$$

3. Resolución de la ecuación de Schrödinger

Hacemos el siguiente cambio de variables en la ecuación de Schrödinger

$$y \equiv \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x,\ \lambda \equiv \frac{2E}{\hbar\omega} \tag{9}$$

resultando

$$\frac{\mathrm{d}^2\phi_n}{\mathrm{d}y^2} + (\lambda - y^2)\phi_n = 0 \tag{10}$$

cuyas soluciones cuando $y \to \infty$ y $\lambda << y$ son

$$\phi_n = e^{\pm y^2/2} \tag{11}$$

de la que elegimos la de signo negativo que se anule en el infinito, siendo la solución para todos los valores de y si multiplicamos la solución asintótica por un polinomio en y

$$\phi_n = H(y)e^{-y^2/2} \tag{12}$$

Aplicamos esta función solución en la ecuación de Schrödinger con el objeto de encontrar los valores de λ

$$\frac{\mathrm{d}^2H(y)}{\mathrm{d}y^2} - 2y\frac{\mathrm{d}H(y)}{\mathrm{d}y} + (\lambda - 1)H(y) = 0 \tag{13}$$

suponemos que la función polinómica es parte de la serie

$$H(y) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n y^n \tag{14}$$

y obtenemos cada uno de los sumandos con un factor común en y^n

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}^2H(y)}{\mathrm{d}y^2} &= \sum_{n=0}^{\infty} a_n(n)(n-1)y^{n-2} = 0 + 0 + \sum_{n=2}^{\infty} a_n(n)(n-1)y^{n-2} \\ &\underset{j=n-2}{=} \sum_{j=0}^{\infty} a_{j+2}(j+2)(j+1)y^j = \sum_{n=0}^{\infty} a_{n+2}(n+2)(n+1)y^n \end{aligned} \tag{15}$$

$$-2y\frac{\mathrm{d}H(y)}{\mathrm{d}y} = \sum_{n=0}^{\infty} -2na_n y^n \tag{16}$$

$$(\lambda - 1)H(y) = (\lambda - 1)a_n y^n \tag{17}$$

y una vez reordenados queda

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left[a_{n+2}(n+2)(n+1) - 2na_n + (\lambda - 1)a_n\right] y^n = 0 \tag{18}$$

y obtenemos el término de recurrencia de la serie

$$a_{m+2} = \frac{2m - (\lambda - 1)}{(m+2)(m+1)} a_m \tag{19}$$

quedando todos los términos definidos, pares e impares, a partir de a_0 y a_1 y con los que escribimos la función de onda

$$\phi_n = Ae^{-y^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} a_{2n} y^{2n} + Be^{-y^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} a_{2n+1} y^{2n+1} \tag{20}$$

donde A y B son constantes arbitrarias que se incluyen en los coeficientes. La primera condición para que la serie tenga un número finito de términos es que exista un n que anule el numerador de la expresión de recurrencia y eso se cumple para

$$\lambda = 2n + 1 \tag{21}$$

y así sean nulos los coeficientes obtenidos por recurrencia a partir de ese valor, vamos a comprobar que la serie se trunca en $n = 3$ para $\lambda = 7$

$$\begin{aligned} a_{0+2} &= \frac{2 \cdot 0 - (7-1)}{(0+2)\cdot(0+1)} a_0 = -3a_0 \\ a_{1+2} &= \frac{-2}{3} a_1 \\ a_{2+2} &= \frac{-1}{6} a_2 = \frac{1}{2} a_0 \\ a_{3+2} &= \frac{0}{20} a_3 = 0 \\ a_{4+2} &= \frac{1}{15} a_4 = \frac{1}{30} a_0 \\ a_{5+2} &= \frac{2}{21} a_5 = 0 \\ &\dots \end{aligned}$$

vemos que los coeficientes con n no son nulos, por lo que la segunda condición que imponemos es que la función de onda tiene que ser par o impar para ser cuadrática integrable, lo que nos obliga considerar $a_1 = 0$ si n es par, mientras que $a_0 = 0$ si n es impar. Siguiendo con el ejemplo la función de onda correspondiente al nivel $n = 3$ solo contiene dos términos de la serie

$$\phi_{n=3} = a_1 \left(y - \frac{2}{3} y^3 \right) e^{-y^2/2}$$

Los valores de la energía del oscilador armónico simple están cuantizados

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{2E}{\hbar\omega} = 2n + 1 \\ E &= \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \tag{22}$$

El coeficiente a_0 de la función de onda correspondiente a $n = 0$ se obtiene de la exigencia de que esté normalizada $\int_{-\infty}^{\infty} \phi_0^* \phi_0 \mathrm{d}x = 1$, por simplicidad llamaremos $\alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}$ y sustituimos la variable y por αx

$$\begin{aligned} \phi_0 &= a_0 e^{-\alpha^2 x^2/2} \\ 1 &= \int_{-\infty}^{+\infty} |a_0|^2 e^{-\alpha^2 x^2} \mathrm{d}x = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} |a_0|^2 \\ a_0 &= \frac{\alpha^{1/2}}{\pi^{1/4}} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \\ \phi_0 &= \left(\frac{1}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} (\alpha)^{\frac{1}{2}} e^{-\alpha^2 x^2/2} \end{aligned} \tag{23}$$

hacemos lo mismo para obtener el coeficiente a_1 de la función de onda del nivel $n = 1$

$$\phi_1 = a_1 \alpha x e^{-\alpha^2 x^2/2}$$

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |a_1|^2 \alpha^2 x^2 e^{-\alpha^2 x^2} \mathrm{d}x = \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha} |a_1|^2$$

$$a_1 = \frac{(2\alpha)^{1/2}}{\pi^{1/4}} = \left(\frac{4m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$$

$$\phi_1 = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \left(2\alpha^3\right)^{\frac{1}{2}} x e^{-\alpha^2 x^2/2} \tag{24}$$

El polinomio de la función de onda del nivel $n = 2$ solo tiene dos términos de coeficientes a_0 y a_2 relacionados mediante el término de recurrencia $a_2 = -2a_0$, después de la normalización obtenemos su expresión

$$\phi_2 = a_0 \left(1 - 2\alpha^2 x^2\right) e^{-\alpha^2 x^2/2}$$

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |a_0|^2 \left(1 - 2\alpha^2 x^2\right)^2 e^{-\alpha^2 x^2} \mathrm{d}x = \frac{2\sqrt{\pi}}{\alpha} |a_0|^2$$

$$a_0 = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{\alpha}{2}\right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{m\omega}{4\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$$

$$\phi_2 = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{\alpha}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \left(1 - 2\alpha^2 x^2\right) e^{-\alpha^2 x^2/2} \tag{25}$$

En el caso de la función de onda $n = 3$ volvemos a tener dos términos en el polinomio de coeficientes a_1 y a_3 cuya relación es $a_3 = -2/3a_1$, siendo dicha función la siguiente

$$\phi_3 = a_1 \left(\alpha x - \frac{2}{3}\alpha^3 x^3\right) e^{-\alpha^2 x^2/2}$$

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |a_1|^2 \left(\alpha x - \frac{2}{3}\alpha^3 x^3\right)^2 e^{-\alpha^2 x^2} \mathrm{d}x = \frac{\sqrt{\pi}}{3\alpha} |a_1|^2$$

$$a_1 = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} (3\alpha)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{9m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$$

$$\phi_3 = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} (3\alpha)^{\frac{1}{2}} \left(\alpha x - \frac{2}{3}\alpha^3 x^3\right) e^{-\alpha^2 x^2/2} \tag{26}$$

Finalizamos con el caso de $n = 4$ en el que el polinomio de la función de onda tiene tres términos de coeficientes a_0, a_2 y a_4 estando los dos últimos relacionados con el primero por el término de recurrencia, $a_2 = -4a_0$ y $a_4 = 4/3a_0$

$$\phi_4 = a_0 \left(1 - 4\alpha^2 x^2 + \frac{4}{3}\alpha^4 x^4\right) e^{-\alpha^2 x^2/2}$$

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |a_0|^2 \left(1 - 4\alpha^2 x^2 + \frac{4}{3}\alpha^4 x^4\right)^2 e^{-\alpha^2 x^2} \mathrm{d}x = \frac{8\sqrt{\pi}}{3\alpha} |a_1|^2$$

$$a_0 = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{3}{8}\alpha\right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{9m\omega}{64\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$$

$$\phi_4 = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{3}{8}\alpha\right)^{\frac{1}{2}} \left(1 - 4\alpha^2 x^2 + \frac{4}{3}\alpha^4 x4\right) e^{-\alpha^2 x^2/2} \tag{27}$$

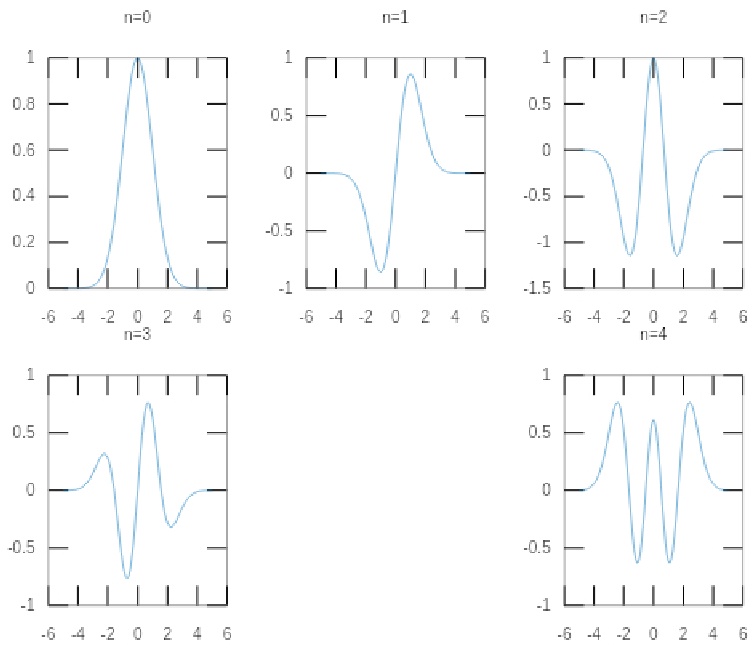

Figura 1: Las funciones de onda correspondientes a los cinco primeros niveles de energía del oscilador para $\alpha = 1$.

Las cinco funciones de onda encontradas para el oscilador armónico simple tienen una estructura común formada por tres factores: una constante, un polinomio de Hermite y una gaussiana

$$\phi_n = \textbf{constante}\ H_n(\alpha x)\ e^{-\alpha^2 x^2/2} \tag{28}$$

$$\textbf{constante} = \sqrt{\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}}} \tag{29}$$

$$H_n(\alpha x) = (-1)^n\ e^{\alpha^2 x^2/2}\ \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} e^{-\alpha^2 x^2/2} \tag{30}$$

4. Formalismo de Dirac

El lagrangiano de un oscilador armónico simple (HSO por sus siglas en inglés) de masa unidad viene dado por

$$L = \frac{1}{2} m \dot{q}^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 q^2 = \frac{1}{2} \dot{q}^2 - \frac{1}{2} \omega^2 q^2 \tag{31}$$

y su momento canónico

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \tag{32}$$

y el hamiltoniano es

$$H = p\dot{q} - L = \frac{1}{2} p^2 + \frac{1}{2} \omega^2 q^2 \tag{33}$$

y la conmutación canónica

$$[q, p] = i\hbar \tag{34}$$

Reordenamos el contenido del hamiltoniano con la intención de encontrar nuevos operadores lineales que contengan los operadores q y p:

$$\begin{aligned} H &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\omega q - \frac{1}{\sqrt{2}}ip\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\omega q + \frac{1}{\sqrt{2}}ip\right) - \frac{i\omega}{2}(qp - pq) \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\omega q - \frac{1}{\sqrt{2}}ip\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\omega q + \frac{1}{\sqrt{2}}ip\right) + \frac{\hbar\omega}{2} \\ &= \hbar\omega\left(\sqrt{\frac{\omega}{2\hbar}}q - \frac{i}{\sqrt{2\hbar\omega}}p\right)\left(\sqrt{\frac{\omega}{2\hbar}}q + \frac{i}{\sqrt{2\hbar\omega}}p\right) + \frac{\hbar\omega}{2} \end{aligned} \tag{35}$$

llamamos operadores creación y aniquilación respectivamente a los factores

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{\omega}{2\hbar}}q - \frac{i}{\sqrt{2\hbar\omega}}p \qquad\qquad a = \sqrt{\frac{\omega}{2\hbar}}q + \frac{i}{\sqrt{2\hbar\omega}}p \tag{36}$$

que permiten escribir el hamiltoniano en función de ellos

$$H = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) \tag{37}$$

5. Conmutadores entre los operadores creación, aniquilación y hamiltoniano

El conmutador entre estos nuevos operadores es

$$\begin{aligned} \left[a, a^\dagger\right] &= \left(\frac{\omega}{2\hbar}q^2 - \frac{i}{2\hbar}qp + \frac{i}{2\hbar}pq + \frac{1}{2\hbar\omega}p^2\right) \\ &- \left(\frac{\omega}{2\hbar}q^2 + \frac{i}{2\hbar}qp - \frac{i}{2\hbar}pq + \frac{1}{2\hbar\omega}p^2\right) \\ &= -\frac{i}{\hbar}[q,p] = 1 \end{aligned} \tag{38}$$

$$\left[a^\dagger, a\right] = -1 \tag{39}$$

y entre el hamiltoniano y cada uno de ellos

$$\begin{aligned} [H, a] &= \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)a - a\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) \\ &= \hbar\omega\left(a^\dagger a a - a a^\dagger a\right) = \hbar\omega\left(a^\dagger a - a a^\dagger\right)a \\ &= \hbar\omega[a^\dagger, a]a = -\hbar\omega a \end{aligned} \tag{40}$$

$$\left[H, a^\dagger\right] = +\hbar\omega a^\dagger \tag{41}$$

6. Espectro de energía del HSO

Aplicamos el conmutador $[H, a]$ a una función propia u_n con un valor propio del hamiltoniano E_n

$$[H, a]u_n = Hau_n - aHu_n = Hau_n - E_n au_n = -\hbar\omega au_n \tag{42}$$

hacemos lo mismo con el conmutador $[H, a^\dagger]$ y obtenemos

$$Hau_n = (E_n - \hbar\omega)\, au_n \qquad Ha^\dagger u_n = (E_n + \hbar\omega)\, a^\dagger u_n \tag{43}$$

vemos que $a^\dagger u_n$ es una función propia del hamiltoniano con una energía superior en $\hbar\omega$ con respecto a la función propia u_n, y por el contrario au_n una energía inferior, esto sugiere que como no puede existir el HSO con energías negativas, si identificamos el nivel mas bajo de energía E_0 correspondiente a la función propia u_0, se debe cumplir que

$$au_0 = 0 \tag{44}$$

y el valor propio del hamiltoniano de esta función resulta ser

$$Hu_0 = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) u_0 = \hbar\omega a^\dagger a u_0 + \frac{\hbar\omega}{2} u_0 = \frac{\hbar\omega}{2} u_0 \tag{45}$$

de la misma manera el hamiltoniano de la función propia a_1 tiene el siguiente valor propio

$$\begin{aligned} Hu_1 =& Ha^\dagger u_0 = \left[H, a^\dagger\right] u_0 + a^\dagger H u_0 \\ =& \hbar\omega a^\dagger u_0 + \frac{\hbar\omega}{2} a^\dagger u_0 = \hbar\omega \left(1 + \frac{1}{2}\right) a^\dagger u_0 \\ =& \hbar\omega \left(1 + \frac{1}{2}\right) u_1 \end{aligned} \tag{46}$$

por lo que el espectro de energías viene dado por la expresión

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \tag{47}$$

7. Operador N

Definimos el operador N como $a^\dagger a$

$$Hu_n = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) u_n = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2}\right) u_n \tag{48}$$

que tiene el valor propio

$$Nu_n = nu_n \tag{49}$$

y su conmutación con los operadores creación y aniquilación es

$$[N, a] = Na - aN = a^\dagger a a - a a^\dagger a = [a^\dagger, a]a = -a \tag{50}$$

$$\left[N, a^\dagger\right] = a^\dagger \tag{51}$$

La relación entre los diferentes estados obtenidos de la aplicación del operador creación la obtenemos de la normalización, suponemos que las funciones propias están normalizadas

$$\begin{aligned} a^\dagger u_n =& C u_{n+1}\ ,\ \langle u_n | a a^\dagger | u_n \rangle = C^2 \\ \langle u_n | a a^\dagger | u_n \rangle =& \langle u_n | [a, a^\dagger] + a^\dagger a | u_n \rangle \\ =& \langle u_n | 1 + a^\dagger a | u_n \rangle = \langle u_n | N + 1 | u_n \rangle = n + 1 \\ C =& \sqrt{n+1}\ ,\ a^\dagger u_n = \sqrt{n+1}\ u_{n+1} \end{aligned} \tag{52}$$

y entre los estados relacionados con el operador aniquilación

$$\begin{aligned} au_n =& C u_{n-1}\ ,\ \langle u_n | a^\dagger a | u_n \rangle = C^2 \\ \langle u_n | N | u_n \rangle =& n\ ,\ C = \sqrt{n}\ ,\ au_n = \sqrt{n}\ u_{n-1} \end{aligned} \tag{53}$$

8. Operadores q y p en la imagen de Heisenberg

Expresamos los operadores q y p en función de los operadores creación y aniquilación

$$q = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}\left(a + a^\dagger\right) \ , \ p = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}\left(a - a^\dagger\right) \tag{54}$$

que usamos para obtener las expresiones de los operadores en la imagen de Heisenberg

$$\begin{aligned} q(t) =& e^{iHt/\hbar}\ q\ e^{-iHt/\hbar} = e^{iHt/\hbar}\ \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}\left(a + a^\dagger\right)\ e^{-iHt/\hbar} \\ =& \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}\ e^{iHt/\hbar}\ a\ e^{-iHt/\hbar} + \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}\ e^{iHt/\hbar}\ a^\dagger\ e^{-iHt/\hbar} \\ =& \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}\ a(t) + \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}\ a^\dagger(t) \end{aligned} \tag{55}$$

la evolución temporal del operador en la imagen de Hisenberg cumple la relación

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}a(t)}{\mathrm{d}t} = [a(t), H] = \hbar\omega a(t) \tag{56}$$

de donde se deduce

$$a(t) = e^{-i\omega t}a(0)\ ,\ a^\dagger(t) = e^{i\omega t}a^\dagger(0) \tag{57}$$

y finalmente

$$q(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}\left(e^{-i\omega t}a + e^{i\omega t}a^\dagger\right) \ , \ p(t) = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}\left(e^{-i\omega t}a - e^{i\omega t}a^\dagger\right) \tag{58}$$