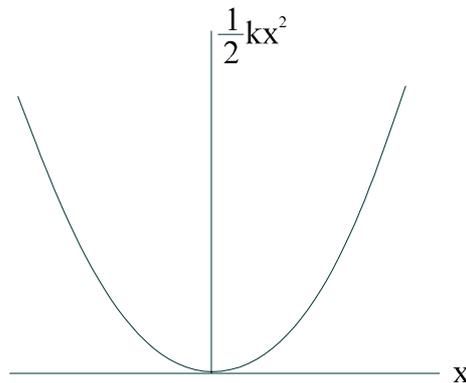


El oscilador armónico.

El estudio del oscilador armónico en mecánica cuántica es de gran importancia. La razón es que en muchos casos el potencial de una partícula en torno a la posición de equilibrio se puede aproximar por un oscilador armónico. El oscilador armónico permitirá por tanto estudiar sistemas tan diversos como el calor específico en los cristales, debido a que la energía interna de un cristal se debe a las oscilaciones de los átomos, o el espectro de una molécula.

Vamos a suponer una partícula que se mueve en el potencial que se muestra en la figura.



La energía clásica de la partícula en este potencial será:

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$$

Este problema es trivial en mecánica clásica. La partícula que se mueve en este potencial puede tener cualquier valor de energía (positivo) y el movimiento que realiza consiste en oscilaciones con una frecuencia $\omega = \sqrt{k/m}$. Si la partícula tiene una energía E se moverá en la región $[-\sqrt{2E/k}, \sqrt{2E/k}]$. Lógicamente la descripción de la partícula en mecánica cuántica es distinta. En primer lugar como la partícula está ligada dentro del potencial, la energía no puede tomar cualquier valor. Las posibles energías vienen impuestas por la condición de que la función de onda debe ser normalizable. Por otro lado, la energía de la partícula no puede ser nula ya que se violaría el principio de indeterminación, de modo que la energía debe ser superior a un cierto valor mínimo. Además, la partícula tendrá una cierta probabilidad de penetrar en las regiones clásicamente prohibidas. Por último, si en general la partícula no se encuentra en un estado estacionario veremos que el valor medio de la posición presenta las mismas oscilaciones que en mecánica clásica (vimos que una partícula en un pozo infinito de potencial también oscila como ocurre en la descripción clásica).

Vamos a estimar el valor mínimo de la energía. En el tema anterior vimos que de acuerdo con el principio de indeterminación $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$ y por otro lado la energía de la partícula es como hemos visto antes:

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$$

Si intentamos que la energía potencial máxima de la partícula sea pequeña y si la partícula se mueve más o menos dentro de la región clásicamente permitida, estará muy localizada en torno al origen, por lo que la indeterminación en el momento de la partícula será grande. Esto nos indica que la partícula no está quieta y por tanto tendrá una cierta energía cinética. Cuanto más intentemos localizar a la partícula mayor será la energía cinética. Por el contrario si la partícula está poco localizada quiere decir que su energía potencial será grande. Debe existir por tanto un valor de la energía que sea un compromiso entre los dos casos. Si la partícula está más o menos localizada de modo que $\Delta x = a$, podemos estimar su energía potencial como $\frac{1}{2}ka^2$ y haciendo uso del principio de indeterminación podemos estimar su energía cinética como $\hbar^2/8ma^2$, por tanto la energía total de la partícula será:

$$E(a) = \frac{\hbar^2}{8ma^2} + \frac{1}{2}ka^2$$

En esta ecuación se muestra cómo depende la energía cinética y potencial de a . Vamos a ver para que valor de a la energía de la partícula se hace mínima:

$$\frac{dE}{da} = -\frac{\hbar^2}{4ma^3} + ka = 0$$

de modo que $a^2 = \frac{\hbar}{2\sqrt{km}}$. El valor mínimo de la energía será por tanto:

$$E_{\min} = \frac{\hbar^2}{8m} \frac{2\sqrt{km}}{m} + \frac{1}{2}k \frac{\hbar}{2\sqrt{km}} = \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{k}{m}} = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

Por tanto de acuerdo con el principio de indeterminación la energía de la partícula debe ser igual o mayor a este valor. Según veremos más adelante resolviendo la ecuación de Schrödinger el valor mínimo real coincide con el que hemos encontrado en esta estimación.

Vamos a ver ahora cómo plantear el problema de una partícula que se mueve en el potencial anterior en mecánica cuántica. Según hemos visto en temas anteriores en mecánica cuántica la partícula viene descrita mediante un vector ket $|\psi\rangle$ o bien mediante una función de ondas si utilizamos la representación coordenadas. La función hamiltoniana para el oscilador armónico en mecánica clásica es:

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$$

En mecánica cuántica tanto esta magnitud como las variables x y p pasan a ser operadores, de modo que:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2$$

El operador hamiltoniano así construido es hermítico. Por último la evolución temporal del estado de la partícula se obtiene a partir de la ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$$

Como siempre, es más sencillo resolver la ecuación de Schrödinger si desarrollamos el estado de la partícula utilizando los estados estacionarios, para lo cual tenemos que resolver

el problema de autovalores del Hamiltoniano. Es decir, tenemos que encontrar los estados $|\varphi_i\rangle$ que verifican la ecuación:

$$\hat{H} |\varphi_i\rangle = E_i |\varphi_i\rangle$$

donde E_i son los autovalores del hamiltoniano. Si en el instante inicial desarrollamos en estado de la partícula como una superposición de los estados $|\varphi_i\rangle$:

$$|\psi(0)\rangle = \sum_i c_i |\varphi_i\rangle$$

entonces en el instante t el estado de la partícula será:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_i c_i e^{-\frac{i}{\hbar} E_i t} |\varphi_i\rangle$$

Los coeficientes c_i del desarrollo anterior se calculan como siempre mediante el producto escalar del ket $|\psi(0)\rangle$ por los estados estacionarios $|\varphi_i\rangle$:

$$c_i = \langle \varphi_i | \psi(0) \rangle = \int dx \varphi_i^*(x) \psi(x, 0)$$

Por tanto lo primero que tenemos que hacer es encontrar los estados estacionarios, es decir, los autovectores del Hamiltoniano, de modo que tenemos que resolver la siguiente ecuación:

$$\hat{H} |\varphi\rangle = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} k \hat{x}^2 \right) |\varphi\rangle = E |\varphi\rangle$$