SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER PARA EL OSCILADOR ARMÓNICO: OPERADORES DE CREACIÓN Y ANIQUILACIÓN DE ESTADOS

Sea la ecuación de Schrödinger del oscilador armónico:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{1}{2}kx^2\psi=E\psi \qquad (1)$$

La solución de esta ecuación, o lo que es lo mismo, la obtención de la función de onda correspondiente, se logra mediante el método de separación de variables. Para ello es preciso crear dos términos nuevos:

$$\lambda=\frac{2E}{\hbar\omega} \qquad\qquad y=\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}x$$

donde $\omega=\left(\frac{k}{m}\right)^{1/2}$

Sustituyendo las nuevas variables, la ecuación de Schrödinger (1) queda como:

$$\left(\frac{d^2}{dy^2}-y^2\right)\psi=-\lambda\psi \qquad (2)$$

que es la correspondiente al estado cuya energía se representa por λ.

Sean las ecuaciones:

$$\left(\frac{d^2}{dy^2} - y^2 - 1\right)\psi = \left(\frac{d}{dy} + y\right)\left(\frac{d}{dy} - y\right)\psi \qquad (3)$$

$$\left(\frac{d^2}{dy^2} - y^2 + 1\right)\psi = \left(\frac{d}{dy} - y\right)\left(\frac{d}{dy} + y\right)\psi \qquad (4)$$

y los nuevos operadores:

$$a^- \equiv \frac{d}{dy} + y \qquad\qquad a^+ \equiv \frac{d}{dy} - y$$

con los que las ecuaciones (3) y (4) se pueden escribir:

$$\left(\frac{d^2}{dy^2} - y^2\right)\psi = (a^- a^+ + 1)\psi$$

$$\left(\frac{d^2}{dy^2} - y^2\right)\psi = (a^+ a^- - 1)\psi$$

Como el término de la izquierda es equivalente al de la ecuación de Schrödinger (2), entonces, por simple sustitución queda que la misma puede ser escrita en cualquiera de las formas:

$$a^- a^+ \psi^{(\lambda)} = -(\lambda + 1)\psi^{(\lambda)} \qquad (5)$$

$$a^+ a^- \psi^{(\lambda)} = -(\lambda - 1)\psi^{(\lambda)} \qquad (6)$$

donde $\psi^{(\lambda)}$ es la función de onda del estado de energía λ.

Esto quiere decir que la aplicación del operador a^- a la imagen $a^+\psi^{(\lambda)}$ tiene el valor propio de la energía del estado inferior $-(\lambda+1)$ y contrariamente la aplicación del operador a^+ sobre la imagen $a^-\psi^{(\lambda)}$ tiene como valor propio la energía del estado superior $-(\lambda-1)$.

La conmutatividad de estos operadores puede conocerse restando (6) de (5):

$$(a^+a^- - a^-a^+)\psi^{(\lambda)} = 2\psi^{(\lambda)}$$

lo que es válido para cualquier función de onda, por lo que el conmutador es, obviamente:

$$[a^+, a^-] = a^+a^- - a^-a^+ = 2 \qquad (7)$$

Queda claro que a^+ y a^- **no** tienen las mismas funciones propias.

Aplicando a^- en ambos lados de la ecuación (6), queda:

$$a^-a^+a^-\psi^{(\lambda)} = -(\lambda-1)a^-\psi^{(\lambda)} \qquad (8)$$

y teniendo en cuenta que (7) se puede expresar como:

$$a^-a^+ = a^+a^- - 2$$

se sustituye en el primer término de (8) y se reordena, quedando:

$$a^+a^-(a^-\psi^{(\lambda)}) = -(\lambda-3)(a^-\psi^{(\lambda)})$$

Como la ecuación de Schrödinger (6) en términos del estado con la energía λ-2 se podría escribir también como:

$$a^+a^-\psi^{(\lambda-2)} = -(\lambda-3)\psi^{(\lambda-2)} \qquad (9)$$

se nota que $a^-\psi^{(\lambda)}$ es equivalente o, por lo menos, proporcional a $\psi^{(\lambda-2)}$. Por lo tanto, la función de onda que describe el estado cuya energía es λ-2 puede ser generada por el operador

$$a^- \equiv \left(\frac{d}{dy} + y\right)$$

al ser aplicado a la función del estado cuya energía es λ.

A partir de lo anterior se dice que el operador

$$\boxed{a^- \equiv \frac{d}{dy} + y}$$

es de *reducción de estados* o de **aniquilación**. Recíprocamente, de dice que el operador

$$\boxed{a^+ \equiv \frac{d}{dy} - y}$$

es de *generación de estados* o de **creación**.

En el caso particular del oscilador armónico **no** se puede repetir la operación de aniquilación indefinidamente sobre las funciones de onda de sus diversos estados porque el mismo **no** puede tener energías negativas. Esto implica la existencia de un valor mínimo y positivo de λ llamado λ_{min} de forma que:

$$a^-\psi^{(\lambda_{min})} = 0 \qquad (10)$$

Si se aplica a^+ a ambos lados de (10), queda también:

$$a^+a^-\psi^{(\lambda_{min})} = 0$$

y usando la ecuación de Schrödinger (6), queda hace que:

$$a^+a^-\psi^{(\lambda_{min})} = -(\lambda - 1)\psi^{(\lambda_{min})} = 0$$

y como $\psi^{(\lambda_{min})}$ no puede ser cero, entonces:

$$\lambda_{min} = 1$$

Como se vio en (9), las funciones de onda corresponden a estados cuyas energías en términos de λ varían con diferencias de 2 (como λ - 4, λ - 6, etc.), por lo que según las restricciones que hemos ido encontrando anteriormente se puede concluir que:

$$\lambda = 1,3,5,\ldots$$

y que se puede proponer un **número cuántico vibracional** υ, tal que:

$$\lambda = 2\upsilon + 1 \qquad \text{para } \upsilon = 0,1,2,\ldots$$

Entonces:

$$\psi^{(\lambda_{min})} = \psi_{\upsilon=0} = \psi_0$$

Si se sustituye el valor de λ en términos del número cuántico υ en su definición con respecto a la **energía** queda que:

$$\boxed{E = (2\upsilon + 1)\frac{\hbar\omega}{2} = (\upsilon + \tfrac{1}{2})\hbar\omega}$$

lo que implica que:

1. Aunque los estados están cuantizados *las diferencias de energía entre ellos son equivalentes entre si*, y dependen de la **frecuencia** ω del oscilador pues siempre

$$E_{\upsilon+1} - E_{\upsilon} = \hbar\omega$$

2. Como la constante de fuerza determina el valor de $\omega \propto \sqrt{k}$ cuando la misma es pequeña o tiende a cero, los estados se separan cada vez menos y se va perdiendo la cuantización, pasando a un continuo, o lo que es lo mismo, a un sistema no cuantizado.

Usando el operador de creación a^+ puede generarse cualquier estado correspondiente a los números cuánticos υ. Así, si para generar el primer estado excitado de $\upsilon = 1$:

$$\psi_1 = N_1 a^+ \psi_0$$

y sucesivamente:

$$\psi_\upsilon = N_\upsilon (a^+)^\upsilon \psi_0$$

donde N_υ es la constante de normalización.

Para finalmente resolver la ecuación de Schrödinger y encontrar la forma funcional de ψ_0 tenemos que recordar que no existe ningún estado de menor energía por lo que no se puede "aniquilar" con a^-, y entonces:

$$a^-\psi_0 = \left(\frac{d}{dy} + y\right)\psi_0 = 0$$

$$\frac{d\psi_0}{\psi_0} = -ydy$$

cuya solución es la **función gaussiana**:

$$\psi_0 = N_0 e^{-\frac{y^2}{2}}$$

Si se aplica sucesivamente el operador de creación a^+, entonces:

$$\psi_1 = N_1 2ye^{-\frac{y^2}{2}}$$

$$\psi_2 = N_2(4y^2 - 2)e^{-\frac{y^2}{2}}$$

lo que da lugar a una regularidad de polinomios denominada como **polinomios de Hermite**, dados por $H_0 = 1$, $H_1 = 2y$, $H_2 = 4y^2 - 2$, $H_3 = 8y^3 - 12y$, etc. Así la solución general del oscilador armónico es una gaussiana que depende de la masa de la partícula oscilando, la frecuencia y la amplitud según:

$$\boxed{\psi_\upsilon = N_\upsilon H_\upsilon(y)e^{-\frac{y^2}{2}}}$$

donde

$$y = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x$$

y

$$N_\upsilon = \sqrt{\frac{1}{\alpha\pi^{1/2}2^\upsilon \upsilon!}} \quad \text{para } \upsilon = 0, 1, 2, \ldots$$