Problemas 3D.Ejercicio 4 - Física Cuántica I

Lucas Pérez

Diciembre 2024

1. Enunciado

Considerad el Hamiltoniano correspondiente al oscilador armónico 3D con la misma frecuencia en las tres direcciones:

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

Siguiendo el razonamiento usado en clase de la partícula en la caja 3D, comprobad que la solución por separación de variables corresponde a lo siguiente:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_i^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x_i^2\right)\Psi_i(x_i) = E_i\Psi_i(x_i)$$

Con $E = E_1 + E_2 + E_3$ y

$$E(n_1, n_2, n_3) = \hbar\omega\sum_i\left(n_i + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2}\right)$$

1. a) Calcular las energías de los tres primeros estados excitados en unidades de $\hbar\omega$.

2. b) Haced una tabla con todas las combinaciones posibles (n_1, n_2, n_3) con su energía correspondiente. ¿Qué degeneración hay en cada nivel?

2. Hamiltoniano con separación de variables

Para demostrar que en el oscilador armónico la función de onda es de variables separables debemos considerar la ecuación de Schrödinger en 3D del sistema.

$$\hat{H}\Psi(x_1,x_2,x_3) = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2\right)\Psi(x_1,x_2,x_3) = E\Psi(x_1,x_2,x_3)$$

Donde (x_1, x_2, x_3) son coordenadas espaciales generalizadas, $\hat{p}^2 = \hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2 + \hat{p}_3^2 = -\hbar^2\sum_i^3 \partial_{i^2}$ es el cuadrado del operador momento en 3D y el operador $\hat{x}^2 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$. Si asumimos que la función de onda Ψ es separable $\Psi(x_1,x_2,x_3) = \phi(x_1)\varphi(x_2)\theta(x_3)$, la única forma de resolver la ecuación diferencial es asumiendo que $E = E_1 + E_2 + E_3$. Lo que nos da tres ecuaciones distintas:

$$\varphi(x_2)\theta(x_3)\left(\frac{\hat{p}_1^2}{2m}\phi(x_1) + \frac{1}{2}m\omega^2x_1^2\phi(x_1)\right) = E_1\phi(x_1)\varphi(x_2)\theta(x_3)$$

$$\phi(x_1)\theta(x_3)\left(\frac{\hat{p}_2^2}{2m}\varphi(x_2) + \frac{1}{2}m\omega^2x_2^2\varphi(x_2)\right) = E_1\phi(x_1)\varphi(x_2)\theta(x_3)$$

$$\phi(x_1)\varphi(x_2)\left(\frac{\hat{p}_3^2}{2m}\theta(x_3) + \frac{1}{2}m\omega^2x_3^2\theta(x_3)\right) = E_1\phi(x_1)\varphi(x_2)\theta(x_3)$$

Simplificando las tres ecuaciones, llegamos a la solución del enunciado:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_1^2\phi(x_1) + \frac{1}{2}m\omega^2x_1^2\phi(x_1) = E_1\phi(x_1)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_2^2\varphi(x_2) + \frac{1}{2}m\omega^2x_2^2\varphi(x_2) = E_2\varphi(x_2)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_3^2\theta(x_3) + \frac{1}{2}m\omega^2x_3^2\theta(x_3) = E_3\theta(x_3)$$

Si pusiéramos cada Hamiltoniano $\hat{H}_i$, siendo $\hat{H}_i \equiv \{\hat{H}_1, \hat{H}_2, \hat{H}_3\}$,en función de los operadores escalera $\hat{a}_i$ y $\hat{a}_i^\dagger$ llegamos a una ecuación de la energía análoga a la calculada en clase para el caso 1D.

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

Y finalmente la energía total del sistema será:

$$E(n_1,n_2,n_3) = \hbar\omega\left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2}\right)$$

3. Energía en los tres primeros Estados Excitados

Los tres primeros estados excitados son : $(1,0,0),(0,1,0)$ y $(0,0,1)$. Sus energías correspondientes son:

3.1. Estado $(1,0,0)$:

$$E(1,0,0)=\hbar\omega\left(1+0+0+\frac{3}{2}\right)=\frac{5}{2}\hbar\omega$$

3.2. Estado $(0,1,0)$:

$$E(0,1,0)=\hbar\omega\left(0+1+0+\frac{3}{2}\right)=\frac{5}{2}\hbar\omega$$

3.3. Estado $(0,0,1)$:

$$E(0,0,1)=\hbar\omega\left(0+0+1+\frac{3}{2}\right)=\frac{5}{2}\hbar\omega$$

4. Combinaciones (n_1,n_2,n_3)

Para ver el tipo de degeneración en nuestro sistema podemos organizar una tabla con todas las combinaciones de los números cuánticos (n_1,n_2,n_3) por cada nivel energético junto con la energia resultante.

Nivel de Energía	(n_1,n_2,n_3)	E
1	$(1,0,0),(0,1,0),(0,0,1)$	$\frac{5}{2}\hbar\omega$
2	$(1,1,0),(1,0,1),(0,1,1),(2,0,0),(0,2,0),(0,0,2)$	$\frac{7}{2}\hbar\omega$

Cuadro 1: Energía del oscilador armónico en función de (n_1,n_2,n_3)

Al calcular las energías de los dos primeros niveles excitados se observa que siempre habrá degeneración para toda combinación de números cuánticos. Dado que $n_1+n_2+n_3$ siempre tiene que dar el nivel energético en el que está el oscilador y la ecuación de la energía, obtenida anteriormente, está en función de esta suma todos los estados energéticos de un mismo nivel siempre van a estar degenerados.