1 Oscilador Harmonico

Al aplicar el metodo de separacion de variables la ecuacion de Schrodinger se obtiene la ecuacion de Schrodinger unidimensional para una funcion $\psi = \psi(x)$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi \tag{1}$$

Un sistema de oscilador armonico es cuando el potencial en la ecuacion (**??**) es

$$V(x) = -\frac{1}{2}Kx^2.$$

donde K es una constante.

El desarrollo se simplifica en gran medida al hacer el cambio a unidades adimensionales:

- Variable adimensional ξ
- Esta variable se relaciona con x por medio de la longitud λ de modo que $x = \lambda\xi$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial(\lambda\xi)^2} = \left(-\frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{mK\lambda^2}{\hbar^2}\xi^2\right)\psi$$
$$\frac{\partial^2\psi}{\partial\xi^2} = \left(-\frac{2mE\lambda^2}{\hbar^2} + \frac{mK\lambda^4}{\hbar^2}\xi^2\right)\psi$$

- Hacemos $mK\lambda^4/\hbar^2 = 1$, de donde

$$\lambda = (\hbar^2/mK)^{1/4}$$

- Relacionamos la frecuencia angular del oscilador con la constante de fuerza

$$\omega = \sqrt{\frac{K}{m}} \implies K = m\omega^2$$

- La variable adimensional queda

$$\lambda\xi = x \implies \xi = \left(\frac{mK}{\hbar^2}\right)^{1/4} x = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x$$

- Introducimos la energia adimensional ϵ

$$\epsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

- Sustituyendo estas expresiones en la ecuacion de Schrödinger

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial\xi^2} = \left(-\frac{2mE\lambda^2}{\hbar^2} + \frac{mK\lambda^4}{\hbar^2}\xi^2\right)\psi$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial\xi^2} = \left(-\frac{2m(\epsilon\hbar\omega/2)(\hbar^2/m^2\omega^2)^{1/2}}{\hbar^2} + \xi^2\right)\psi$$

- Finalmente la ecuacion de Schrödinger adimensional es:

$$\boxed{\frac{\partial^2\psi}{\partial\xi^2} = -2\left(\epsilon - \frac{\xi^2}{2}\right)\psi} \tag{2}$$

con $V(\xi) = \frac{1}{2}\xi^2$.

1.1 Solucion Exacta

1.1.1 Analisis asintotico

Para grande ξ, las soluciones de (**??**), donde ϵ se puede despreciar, son de la forma

$$\psi(\xi) \sim \xi^n e^{\pm\xi^2/2},$$

donde n cualquier valor finito. El exponente con signo positivo da lugar a funciones de onda no normalizables por lo que corresponde a soluciones no fisicas. Entonces asumimos que su comportamiento asintotico hace que la funcion de onda sea

$$\psi(\xi) = H(\xi)e^{-\xi^2/2} \tag{3}$$

donde $H(\xi)$ es alguna funcion bien comportada para ξ grande (de modo que el comportamiento asintotico este determinado por el factor $e^{-\xi^2/2}$). En particular $H(\xi)$ no debe crecer como e^{ξ^2} para asi obtener soluciones fisicas. Bajo asumir que la funcion de onda es (**??**), la ecuacion (**??**) se convierte en una ecuacion para $H(\xi)$:

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}\left(H(\xi)e^{-\xi^2}/2\right) = -2\left(\epsilon - \frac{\xi^2}{2}\right)H(\xi)e^{-\xi^2/2}$$
$$\frac{\mathrm{d}^2H(\xi)}{\mathrm{d}\xi^2}e^{-\xi^2/2} - \xi\frac{\mathrm{d}H(\xi)}{\mathrm{d}\xi}e^{-\xi^2/2} - \xi\frac{\mathrm{d}H(\xi)}{\mathrm{d}\xi}e^{-\xi^2/2} + \xi^2H(\xi)e^{-\xi^2/2} - H(\xi)e^{-\xi^2/2} = -2\left(\epsilon - \frac{\xi^2}{2}\right)H(\xi)e^{-\xi^2/2}$$
$$\frac{\mathrm{d}^2H(\xi)}{\mathrm{d}\xi^2} - 2\xi\frac{\mathrm{d}H(\xi)}{\mathrm{d}\xi} + (2\epsilon - 1)H(\xi) = 0$$

Se expande la solucion $H(\xi)$ en una serie de potencias

$$H(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n\xi^n$$

la primer derivada es simplemente

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} nA_n\xi^{n-1}$$

para la segunda derivada, diferenciamos cada termino

$$\frac{\mathrm{d}^2H}{\mathrm{d}\xi^2} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}(A_1 + 2A_2\xi + 3A_3\xi^2 + ...) = 2A_2 + 2*3A_3\xi + 3*4A_4\xi^2 + ... = \sum_{n=0}^{\infty}(n+1)(n+2)A_{n+2}\xi^n$$

sustituyendo en la ecuacion para $H(\xi)$ se tiene

$$
\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{d}^2H(\xi)}{\mathrm{d}\xi^2} - 2\xi\frac{\mathrm{d}H(\xi)}{\mathrm{d}\xi} + (2\epsilon - 1)H(\xi) = 0 \\
&\sum_{n=0}^{\infty}\{(n+1)(n+2)A_{n+2}\xi^n - 2\xi(nA_n\xi^{n-1}) + (2\epsilon-1)A_n\xi^n\} = 0 \\
&\sum_{n=0}^{\infty}\{(n+1)(n+1)A_{n+2} + (2\epsilon - 2n - 1)A_n\}\xi^n = 0
\end{aligned}
$$

esta expresion se debe satisfacer para todo ξ por el teorema de existencia y unicidad, entonces los coeficientes de todo orden deben ser cero:

$$(n+2)(n+1)A_{n+2} + (2\epsilon - 2n - 1)A_n = 0$$

asi, dados A_0 y A_1, se puede determinar por recursion $H(\xi)$ como una serie de potencias

$$A_{n+2} = \frac{(2\epsilon - 2n - 1)A_n}{n^2 + 3n + 2} \tag{4}$$

Para n muy grande, se tiene:

$$A_{n+2} \sim \frac{2A_n}{n}$$

Se resuelve esta recursion para el caso par e impar:

- Para una potencia par $n = 2k$:

$$A_{2k+2} \sim \frac{1}{k}A_{2k}$$

- Iterando:

$$A_{2k} \sim \frac{1}{k-1}A_{2k-2} \sim \frac{1}{k-1}\cdot\frac{1}{k-2}A_{2k-4} \sim \frac{A_0}{(k-1)!}$$

- Usando $(k-1)! = k!/k$, para k muy grande, la solucion a la recursion es

$$A_{2k} \sim \frac{A_0}{k!}$$

- Similarmente, para una potencia impar $n = 2k+1$:

$$A_{2k+3} \sim \frac{2}{2k+1}A_{2k+1} \sim \frac{1}{k}A_{2k+1}$$
$$A_{2k+1} \sim \frac{A_1}{k!}$$

- Por lo tanto, para n muy grande, la recursion se comporta como:

$$A_n \sim \frac{1}{(n/2)!}$$

Esto implica:

$$H(\xi) \sim \sum_k \left[\frac{A_0}{k!}\xi^{2k} + \frac{A_1}{k!}\xi^{2k+1}\right] = A_0 e^{\xi^2} + A_1 \xi e^{\xi^2}$$

Esta expresion se interpreta como que la recurrencia (**??**) produce una funcion $H(\xi)$ que crece como e^{ξ^2} y da soluciones divergentes, i.e. no fisicas. Para prevenir este comportamiento, debemos truncar la serie despues de algun n y asi reducir la solucion a un polinomio de grado finito. Entonces, en la recursion (**??**), para que la serie termine,

$$A_{n+2} = \frac{(2\epsilon - 2n - 1)A_n}{(n+2)(n+1)}$$
$$2\epsilon - 2n - 1 = 0$$
$$\epsilon = n + \frac{1}{2}$$

donde n es un entero positivo. Esta condicion nos da la cuantizacion de la energia del oscilador harmonico:

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega, \quad n \in \mathbb{Z}^+ \tag{5}$$

Los polinomios correspondientes $H_n(\xi)$ son los polinomios de Hermite, donde $H_n(\xi)$:

- Es de grado n en ξ
- Tiene n nodos
- Es par para n par e impar para n impar

Finalmente, la funcion de onda correspondiente a la energia E_n es

$$\psi_n(\xi) = H_n(\xi)e^{-\xi^2/2}$$