

Solución algebraica. Operadores de creación y aniquilación.

En este apartado vamos a resolver de nuevo el problema del oscilador armónico utilizando un método mucho más elegante mediante la notación de Dirac, en lugar de utilizar directamente la representación coordenadas. Anteriormente vimos que el operador Hamiltoniano para el oscilador armónico era:

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

donde los operadores \hat{x} y \hat{p} verifican la regla de conmutación $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$

Queremos resolver la ecuación de autovalores del Hamiltoniano ya que nos proporciona los estados estacionarios. Es decir, que queremos encontrar los vectores $|\varphi\rangle$ y valores E que verifican la siguiente ecuación:

$$\hat{H}|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$$

Vamos a definir los siguientes dos operadores adimensionales:

$$\bar{x} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x} \quad \text{y} \quad \bar{p} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}\hat{p}$$

que verifican la regla de conmutación $[\bar{x}, \bar{p}] = i$

El operador Hamiltoniano en función de estos nuevos operadores vale:

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}(\bar{x}^2 + \bar{p}^2)$$

Si los operadores \bar{x} y \bar{p} fueran números en lugar de operadores podríamos haber escrito el Hamiltoniano también de la forma $\hbar\omega(\bar{x} - i\bar{p})(\bar{x} + i\bar{p})/2$, aunque sabemos que no es posible. Sin embargo, vamos a ver cómo se puede simplificar el problema de autovalores del hamiltoniano introduciendo los siguientes operadores:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\bar{x} + i\bar{p}) \quad \text{y} \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\bar{x} - i\bar{p})$$

Está claro que uno es el adjunto del otro. A partir de estos operadores podemos obtener los operadores \bar{x} y \bar{p} de la forma:

$$\bar{x} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a) \quad \text{y} \quad \bar{p} = \frac{i}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a)$$

Vamos a calcular el conmutador de los operadores a y a^\dagger :

$$[a, a^\dagger] = \frac{1}{2}[\bar{x} + i\bar{p}, \bar{x} - i\bar{p}] = -\frac{i}{2}[\bar{x}, \bar{p}] + \frac{i}{2}[\bar{p}, \bar{x}] = 1$$

A partir de los operadores a y a^\dagger podemos definir un nuevo operador que será el producto de los dos:

$$N = a^\dagger a = \frac{1}{2}(\bar{x} - i\bar{p})(\bar{x} + i\bar{p}) = \frac{1}{2}(\bar{x}^2 + \bar{p}^2 + i(\bar{x}\bar{p} - \bar{p}\bar{x})) = \frac{1}{2}(\bar{x}^2 + \bar{p}^2 - 1)$$

De modo que podemos expresar el operador Hamiltoniano en función de este nuevo operador como:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right)$$

Vamos a obtener otros dos conmutadores que serán de utilidad:

$$\begin{aligned} [N, a] &= [a^\dagger a, a] = a^\dagger [a, a] + [a^\dagger, a] a = -a \\ [N, a^\dagger] &= [a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger [a, a^\dagger] + [a^\dagger, a^\dagger] a = a^\dagger \end{aligned}$$

Si resolvemos el problema de autovalores del operador N habremos resuelto también el problema de autovalores del Hamiltoniano ya que \hat{H} es una función de N . Vamos a suponer que n (que no tiene por que ser un entero) es un autovalor de N y $|\varphi_n\rangle$ un autovector correspondiente a dicho autovalor, de modo que $N|\varphi_n\rangle = n|\varphi_n\rangle$. Vamos a ver que el $a^\dagger|\varphi_n\rangle$ también es un autovector de N :

$$Na^\dagger|\varphi_n\rangle = (a^\dagger N + a^\dagger)|\varphi_n\rangle = (n+1)a^\dagger|\varphi_n\rangle$$

Por tanto el ket $a^\dagger|\varphi_n\rangle$ es un autovector de N de autovalor $n+1$. Por este motivo el operador a se denomina operador de creación. Vamos a ver que el ket $a|\varphi_n\rangle$ también es un autovector del operador N :

$$Na|\varphi_n\rangle = (aN - a)|\varphi_n\rangle = (n-1)a|\varphi_n\rangle$$

de modo que también es un autovector pero de autovalor $n-1$. Por este motivo el operador a se denomina operador de aniquilación.

En el apartado anterior vimos que los autovalores del hamiltoniano deben ser mayores o iguales que cero. Vamos a ver que el espectro de autovalores del operador N está constituido por los números enteros positivos, es decir, $n = 0, 1, 2, \dots$. Vamos a suponer que no fuera así, que modo que pudiera existir un autovalor de N que fuera un número real n no entero. En este caso, al autovector correspondiente $|\varphi_n\rangle$ podemos aplicarle el operador a y obtendríamos otro autovector de autovalor $n-1$. Si hacemos esto sucesivamente en algún momento obtendremos autovalores de N que den lugar a valores de la energía negativos, lo cual sabemos que no es posible. La única forma de que la sucesiva aplicación del operador a se corte en algún momento, de modo que no obtengamos autovalores cada vez menores, consiste en que los autovalores n sean números enteros. De esta forma, si partimos de un cierto autovalor n y al correspondiente autovector $|\varphi_n\rangle$ le aplicamos el operador a obtendremos un nuevo autovector de autovalor $n-1$. Llegará un momento en el que obtengamos el autovector $|\varphi_1\rangle$. Si a este vector le aplicamos el operador a obtendremos un autovector de N de autovalor 0, es decir, proporcional al $|\varphi_0\rangle$. Podemos pensar que si a este vector le aplicamos de nuevo el operador a , obtendremos un autovector de autovalor -1 , es decir, proporcional al $|\varphi_{-1}\rangle$. Pero esto no es así, ya que si calculamos la norma del vector $a|\varphi_0\rangle$, nos queda: $\langle\varphi_0|a^\dagger a|\varphi_0\rangle = \langle\varphi_0|N|\varphi_0\rangle = 0$ y esto sólo es posible si el ket $a|\varphi_0\rangle$ vale 0. Por tanto, se corta la serie y no obtenemos autovectores de \hat{H} con energías negativas. Debido a la relación que existe entre los operadores N y \hat{H} los autovalores de \hat{H} son los números:

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

Vamos a encontrar el estado fundamental del Hamiltoniano. Este estado es un autovector de N de autovalor 0, es decir, con la notación que estamos utilizando será el vector $|\varphi_0\rangle$. Según acabamos de ver este vector satisface la condición $a|\varphi_0\rangle = 0$, de modo que:

$$(\bar{x} + i\bar{p})|\varphi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} + i \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} \hat{p} \right) |\varphi_0\rangle = 0$$

Vamos a resolver esta ecuación utilizando la representación coordenadas:

$$m\omega x\varphi_0(x) + \hbar \frac{d\varphi_0(x)}{dx} = 0$$

integrando esta ecuación se obtiene que

$$\varphi_0(x) = ce^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2}$$

que es el mismo resultado que obtuvimos en el apartado anterior. Si queremos que el estado fundamental esté normalizado la constante c debe valer $c = (m\omega/\pi\hbar)^{1/4}$ (salvo un factor de fase arbitrario). Vamos a ver cómo podemos obtener el resto de las autofunciones del hamiltoniano. Partiremos de un autovector de N , $|\varphi_n\rangle$ de autovalor n normalizado de modo que $\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle = 1$. Vamos a ver cómo podemos obtener un autovector de autovalor $n+1$ también normalizado. Al vector anterior le aplicamos el operador a^\dagger :

$$a^\dagger|\varphi_n\rangle = c_n^+|\varphi_{n+1}\rangle$$

Veamos cuánto tiene que valer c_n^+ para que $|\varphi_{n+1}\rangle$ también esté normalizado. Tomamos la norma del vector anterior:

$$\langle\varphi_n|aa^\dagger|\varphi_n\rangle = \langle\varphi_n|(a^\dagger a + 1)|\varphi_n\rangle = (n+1) = |c_n^+|^2 \langle\varphi_{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle$$

de modo que si queremos que $|\varphi_{n+1}\rangle$ esté normalizado c_n^+ debe valer $c_n^+ = \sqrt{n+1}$ (salvo un factor de fase). Por tanto $a^\dagger|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle$. De esta forma, a partir del vector $|\varphi_n\rangle$ podemos obtener el vector $|\varphi_{n+1}\rangle$, o bien a partir del vector $|\varphi_{n-1}\rangle$ el vector $|\varphi_n\rangle$ de la forma:

$$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} a^\dagger |\varphi_{n-1}\rangle$$

Si partimos del estado fundamental, mediante esta relación de recurrencia podemos obtener cualquier autovector:

$$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} a^\dagger |\varphi_{n-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}} a^{\dagger 2} |\varphi_{n-2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n(n-1)\dots 1}} a^{\dagger n} |\varphi_0\rangle$$

de modo que

$$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} a^{\dagger n} |\varphi_0\rangle$$

Vamos ahora a definir los polinomios de Hermite, que nos permitirán expresar las autofunciones del operador Hamiltoniano. Por definición el polinomio de Hermite $H_n(y)$ viene dado por la expresión (fórmula de Rodrigues):

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2}$$

Vamos a ver cómo podemos expresar las autofunciones del Hamiltoniano en función de estos polinomios. Hemos visto que el estado $|\varphi_n\rangle$ se puede obtener a partir del estado fundamental. En la representación coordenadas:

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \frac{\hbar}{\sqrt{m\hbar\omega}} \frac{d}{dx} \right) \right]^n \varphi_0(x)$$

Podemos utilizar la variable adimensional $y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$ de modo que:

$$\varphi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(y - \frac{d}{dy} \right)^n \varphi_0(y) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(y - \frac{d}{dy} \right)^n e^{-y^2/2}$$

Supongamos que tenemos una función $f(y)$. Vamos a ver que obtenemos cuando aplicamos el operador $\left(y - \frac{d}{dy} \right)$ a la función $e^{y^2/2} f(y)$:

$$\left(y - \frac{d}{dy} \right) e^{y^2/2} f(y) = y e^{y^2/2} f(y) - y e^{y^2/2} f(y) - e^{y^2/2} \frac{df(y)}{dy}$$

de modo que

$$\left(y - \frac{d}{dy} \right) e^{y^2/2} f(y) = -e^{y^2/2} \frac{df(y)}{dy}$$

Del mismo modo

$$\left(y - \frac{d}{dy} \right)^2 e^{y^2/2} f(y) = - \left(y - \frac{d}{dy} \right) e^{y^2/2} \frac{df(y)}{dy} = e^{y^2/2} \frac{d^2 f(y)}{dy^2}$$

Si aplicamos n veces el operador anterior obtendremos:

$$\left(y - \frac{d}{dy} \right)^n e^{y^2/2} f(y) = (-1)^n e^{y^2/2} \frac{d^n f(y)}{dy^n}$$

Por tanto para el caso $f(y) = e^{-y^2}$ obtenemos la relación:

$$\left(y - \frac{d}{dy} \right)^n e^{-y^2/2} = (-1)^n e^{y^2/2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2} = e^{-y^2/2} H_n(y)$$

Por último podemos expresar ya el estado $\varphi_n(y)$ en función de los polinomios de Hermite:

$$\varphi_n(y) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(y) e^{-y^2/2}$$

A partir de la definición de los polinomios de Hermite podemos calcular los primeros polinomios, que son:

$$\begin{aligned} H_0(y) &= 1 \\ H_1(y) &= 2y \\ H_2(y) &= 4y^2 - 2 \\ H_3(y) &= 8y^3 - 12y \\ &\vdots \end{aligned}$$

Vamos a ver ahora algunas de las propiedades de los polinomios de Hermite. En primer lugar, si derivamos la expresión de la definición de los polinomios de Hermite obtenemos la siguiente relación:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dy} \left[(-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2} \right] &= (-1)^n 2ye^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2} + (-1)^n e^{y^2} \frac{d^{n+1}}{dy^{n+1}} e^{-y^2} \\ &= 2yH_n(y) - H_{n+1}(y) \end{aligned}$$

Por tanto

$$H_n(y) = \left(2y - \frac{d}{dy} \right) H_{n-1}(y)$$

Esta relación de recurrencia permite obtener sucesivamente los polinomios de Hermite a partir del primero. Vamos a ver otra forma de obtener los polinomios de Hermite. Si desarrollamos la función $e^{-(y-t)^2}$ en serie de potencias de t obtenemos el siguiente resultado

$$e^{-(y-t)^2} = \sum_n \frac{t^n}{n!} \left(\frac{d^n}{dt^n} e^{-(y-t)^2} \right)_{t=0} = \sum_n \frac{(-1)^n t^n}{n!} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2}$$

por tanto

$$e^{y^2} e^{-(y-t)^2} = e^{2yt-t^2} = \sum_n \frac{(-1)^n t^n}{n!} e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2} = \sum_n \frac{H_n(y)}{n!} t^n$$

Es decir, que los coeficientes del desarrollo en serie de la función e^{2yt-t^2} son precisamente los polinomios de Hermite. La función e^{2yt-t^2} se dice que es la función generadora de los polinomios de Hermite. Vamos a ver cómo podemos utilizar la función generadora para obtener otras relaciones de recurrencia de los polinomios de Hermite. Si derivamos la función e^{2yt-t^2} respecto de y obtenemos que

$$2te^{2yt-t^2} = \underbrace{\sum_n \frac{H'_n(y)}{n!} t^n}_{\text{}} = \sum_n \frac{2H_n(y)}{n!} t^{n+1} = \underbrace{\sum_n \frac{2H_{n-1}(y)}{(n-1)!} t^n}_{\text{}}$$

Si los dos términos marcados con llaves son iguales es por que los coeficientes son iguales, de modo que:

$$\frac{H'_n(y)}{n!} = \frac{2H_{n-1}(y)}{(n-1)!} \implies H'_n(y) = 2nH_{n-1}(y)$$

que es una nueva relación de recurrencia.

De las relaciones

$$H_n(y) = 2yH_{n-1}(y) - H'_{n-1}(y) \quad \text{y} \quad H'_n(y) = 2nH_{n-1}(y)$$

podemos obtener una relación entre polinomios de Hermite de distinto grado ya que:

$$H_n(y) = 2yH_{n-1}(y) - H'_{n-1}(y) = 2yH_{n-1}(y) - 2(n-1)H_{n-2}$$

o bien

$$H_{n+1}(y) = 2yH_n(y) - 2nH_{n-1}(y)$$

Por último vamos a obtener la ecuación diferencial que satisfacen los polinomios de Hermite, conocida como la ecuación diferencial de Hermite. Utilizaremos de nuevo las dos relaciones anteriores:

$$H_n(y) = 2yH_{n-1}(y) - H'_{n-1}(y) = 2y\frac{H'_n(y)}{2n} - \frac{H''_n(y)}{2n}$$

de modo que

$$H''_n(y) - 2yH'_n(y) + 2nH_n(y) = 0$$

que es la ecuación de Hermite (se puede comprobar que es similar a la que satisfacía la función $u(y)$ que apareció en el apartado anterior).

Para finalizar este apartado, vamos a calcular algunas magnitudes de los estados estacionarios como son los valores medios y dispersiones de la posición y del momento. Para calcular dichos valores medios conviene utilizar los operadores de creación y aniquilación.

Vamos a recordar cómo actúan estos dos operadores. Si sobre un estado $|\varphi_n\rangle$ aplicamos el operador a^\dagger obtenemos un estado proporcional a $|\varphi_{n+1}\rangle$

$$a^\dagger |\varphi_n\rangle = c_n^+ |\varphi_{n+1}\rangle$$

Si los dos estados están normalizados y multiplicamos la expresión anterior por su hermítico conjugado obtenemos que

$$\langle \varphi_n | aa^\dagger | \varphi_n \rangle = \langle \varphi_n | a^\dagger a + 1 | \varphi_n \rangle = n + 1 = |c_n|^2$$

de modo que tomábamos $c_n = \sqrt{n+1}$.

Del mismo modo si aplicamos el operador a sobre el estado $|\varphi_n\rangle$ obtenemos un estado proporcional a $|\varphi_{n-1}\rangle$

$$a |\varphi_n\rangle = c_n |\varphi_{n-1}\rangle$$

y realizando la misma operación que en el caso anterior:

$$\langle \varphi_n | a^\dagger a | \varphi_n \rangle = n = |c_n|^2$$

y escogiendo el mismo criterio para la fase de c_n obtenemos que $c_n = \sqrt{n}$. Resumiendo:

$$a^\dagger |\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1} |\varphi_{n+1}\rangle \quad \text{y} \quad a |\varphi_n\rangle = \sqrt{n} |\varphi_{n-1}\rangle$$

Vamos a calcular el valor medio de la posición si la partícula se encuentra en un estado estacionario $|\varphi_n\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \langle \varphi_n | \hat{x} | \varphi_n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle \varphi_n | (a^\dagger + a) | \varphi_n \rangle = \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\sqrt{n+1} \langle \varphi_n | \varphi_{n+1} \rangle + \sqrt{n} \langle \varphi_n | \varphi_{n-1} \rangle \right) = 0 \end{aligned}$$

donde hemos utilizado la propiedad de ortogonalidad de los autovectores del hamiltoniano.

De la misma forma podemos comprobar que el valor medio del momento en un estado estacionario es nulo:

$$\begin{aligned}\langle p \rangle &= \langle \varphi_n | \hat{p} | \varphi_n \rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \langle \varphi_n | (a^\dagger - a) | \varphi_n \rangle = \\ &= i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \left(\sqrt{n+1} \langle \varphi_n | \varphi_{n+1} \rangle - \sqrt{n} \langle \varphi_n | \varphi_{n-1} \rangle \right) = 0\end{aligned}$$

Vamos a calcular ahora el valor medio de \hat{x}^2 para lo cual vamos a escribir este operador en función de los operadores de creación y aniquilación:

$$\begin{aligned}\hat{x}^2 &= \frac{\hbar}{2m\omega} (a^\dagger + a) (a^\dagger + a) = \frac{\hbar}{2m\omega} (a^{\dagger 2} + a^2 + a^\dagger a + aa^\dagger) = \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} (a^{\dagger 2} + a^2 + 2a^\dagger a + 1)\end{aligned}$$

Está claro que los términos $a^{\dagger 2}$ y a^2 no contribuyen en el valor medio de \hat{x}^2 para un estado estacionario de modo que:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} (2n + 1) = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

Podemos hacer lo mismo con el operador \hat{p}^2 :

$$\begin{aligned}\hat{p}^2 &= -\frac{m\hbar\omega}{2} (a^\dagger - a) (a^\dagger - a) = -\frac{m\hbar\omega}{2} (a^{\dagger 2} + a^2 - a^\dagger a - aa^\dagger) = \\ &= -\frac{m\hbar\omega}{2} (a^{\dagger 2} + a^2 - 2a^\dagger a - 1)\end{aligned}$$

de modo que

$$\langle p^2 \rangle = m\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

De las expresiones encontradas podemos concluir que para un estado estacionario

$$\begin{aligned}(\Delta x)^2 &= \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{E_n}{m\omega^2}, & (\Delta p)^2 &= m\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) = mE_n \\ \text{y } \Delta x \Delta p &= \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right)\end{aligned}$$

lo cual está en conformidad con el principio de indeterminación. Podemos ver que cuanto mayor es la energía de la partícula más deslocalizada estará dentro del potencial. Algo similar ocurre en la descripción clásica ya que cuanto mayor es la energía mayor es la región en la que se mueve la partícula.

Por último vamos a calcular los valores medios de la energía potencial y cinética:

$$\langle V \rangle = \frac{1}{2} m\omega^2 \langle \hat{x}^2 \rangle = \frac{E_n}{2} \quad \text{y} \quad \langle T \rangle = \frac{1}{2m} \langle \hat{p}^2 \rangle = \frac{E_n}{2}$$

Por tanto $\langle V \rangle = \langle T \rangle$, lo cual es una consecuencia del teorema del virial.