Solución analítica. Polinomios de Hermite.

En primer lugar, vamos a resolver el problema de autovalores del Hamiltoniano utilizando la representación coordenadas. La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en la representación coordenadas es:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}kx^2\right)\varphi(x)=E\varphi(x)$$

Conviene utilizar variables adimensionales para escribir la ecuación con mayor claridad. La constante $\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ tiene dimensiones de longitud, de modo que vamos a definir una nueva variable adimensional:

$$y=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$$

La derivada segunda que aparece en la ecuación hay que escribirla en función de esta nueva variable:

$$\frac{d^2}{dx^2}=\frac{m\omega}{\hbar}\frac{d^2}{dy^2}$$

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en función de la nueva variable y queda:

$$-\frac{\hbar\omega}{2}\frac{d^2\varphi}{dy^2}+\frac{1}{2}\hbar\omega y^2\varphi=E\varphi$$

Por último, si definimos un nuevo parámetro adimensional $\lambda=2\frac{E}{\hbar\omega}$:

$$\frac{d^2\varphi}{dy^2}+(\lambda-y^2)\varphi=0$$

Como podemos comprobar la ecuación queda mucho más sencilla utilizando parámetros y variables adimensionales. Tenemos que encontrar las soluciones de esta ecuación que sean normalizables y por tanto que verifiquen la condición $\varphi_{y\to\pm\infty}=0$. Como veremos, no todos los valores de λ son posibles si queremos que se verifique la condición anterior, de modo que el espentro del hamiltoniano es discreto. Vamos a ver en primer lugar una propiedad de los autovalores del Hamiltoniano. Si escribimos el valor medio de la energía para un cierto estado estacionario:

$$\langle H\rangle=E=\frac{\langle\hat{p}^2\rangle}{2m}+\frac{1}{2}k\left\langle\hat{x}^2\right\rangle\geq 0$$

Por tanto los autovalores del Hamiltoniano verifican la condición $E\geq 0$ y del mismo modo $\lambda\geq 0$. Vamos a resolver ahora la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Lo primero que haremos es analizar el comportamiento de la solución lejos del origen. Cuando $y\to\pm\infty$ podemos despreciar λ frente a y^2 en la ecuación, de modo que:

$$\lim_{y\to\pm\infty}\frac{\varphi''}{y^2\varphi}=1$$

Podemos ver que la función $e^{-y^2/2}$ presenta el mismo comportamiento ya que:

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

Por tanto el comportamiento asintótico de la función φ en $y \to \pm\infty$ viene dado por la función anterior (la función $e^{y^2/2}$ se comporta también igual que la función φ en $y \to \pm\infty$ sin embargo conduce a soluciones que no son normalizables). Por tanto, podemos escribir la solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo de la siguiente forma:

$$\varphi(y) = u(y)e^{-y^2/2}$$

donde el producto $u(y)e^{-y^2/2}$ tiene que converger a cero en $y \to \pm\infty$. Vamos a ver la ecuación diferencial que debe verificar la función $u(y)$. Introduciendo la función $\varphi(y)$ anterior en la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, teniendo en cuenta que:

$$\varphi'' = u''e^{-y^2/2} - 2yu'e^{-y^2/2} - ue^{-y^2/2} + y^2ue^{-y^2/2}$$

se obtiene

$$\left(u'' - 2yu' - u + y^2u\right) e^{-y^2/2} + \left(\lambda - y^2\right) ue^{-y^2/2} = 0$$

o bien

$$u'' - 2yu' + (\lambda - 1)\, u = 0$$

Para resolver esta ecuación diferencial vamos a desarrollar la función u en potencias de y.

$$u = \sum_{n=0}^{\infty} a_n y^n$$

Introducimos este desarrollo en serie en la ecuación, teniendo en cuenta que

$$\begin{aligned} u' &= \sum_{n=1}^{\infty} n a_n y^{n-1} = \sum_{n=0}^{\infty} n a_n y^{n-1} \\ \text{y} \quad u'' &= \sum_{n=2}^{\infty} n\,(n-1)\, a_n y^{n-2} = \sum_{n=0}^{\infty} (n+2)\,(n+1)\, a_{n+2} y^n \end{aligned}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} (n+2)\,(n+1)\, a_{n+2} y^n - 2y \sum_{n=0}^{\infty} n a_n y^{n-1} + (\lambda - 1) \sum_{n=0}^{\infty} a_n y^n = 0$$

o bien

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left[(n+2)\,(n+1)\, a_{n+2} - (2n + 1 - \lambda)\, a_n\right] y^n = 0$$

Para que esta función de y sea nula todos los coeficientes del desarrollo deben ser nulos, por lo que obtenemos la siguiente relación de recurrencia para los coeficientes a_n:

$$a_{n+2} = \frac{2n + 1 - \lambda}{(n+2)\,(n+1)} a_n$$

Mediante esta relación de recurrencia obtenemos la solución de la ecuación. Como la ecuación diferencial es de segundo orden en la solución deben aparecer dos constantes de integración, de modo que podemos tomar como constantes de integración los coeficientes a_0 y a_1. A partir de estos dos coeficientes, mediante la relación de recurrencia, podemos obtener el resto de los coeficientes del desarrollo de la función $u(y)$. Vamos a analizar ahora el comportamiento de la función $u(y)$ para valores grandes de y. Dentro del desarrollo de $u(y)$ en serie de potencias de y, los coeficientes más significativos para valores grandes de y serán los de n grande, de modo que vamos a analizar cómo se comportan los coeficientes a_n para valores grandes de n. De acuerdo con la relación de recurrencia se obtiene que:

$$\frac{a_{n+2}}{a_n} = \frac{2n+1-\lambda}{(n+2)\,(n+1)} \sim \frac{2}{n} \qquad \text{para } n \gg 1$$

Por otro lado vamos a desarrollar la función e^{y^2} en potencias de y:

$$e^{y^2} = \sum_{n=0,1,\cdots}^{\infty} \frac{y^{2n}}{n!} = \sum_{n=0,2,\cdots}^{\infty} \frac{y^n}{n/2!} = \sum_{n=0,2,\cdots}^{\infty} c_n y^n$$

de modo que los coeficientes del desarrollo de la función e^{y^2} se comportan de la siguiente forma para valores grandes de n:

$$\frac{c_{n+2}}{c_n} = \frac{\dfrac{1}{(n+2)\,/2!}}{\dfrac{1}{n/2!}} = \frac{\dfrac{1}{\left(\dfrac{n}{2}+1\right) n/2!}}{\dfrac{1}{n/2!}} = \frac{2}{n+1} \sim \frac{2}{n} \qquad \text{para } n \gg 1$$

En consecuencia, la función $u(y)$ se comporta como la función e^{y^2} para valores grandes de y, por tanto al multiplicar $u(y)$ por $e^{-y^2/2}$ se obtiene una función que diverge para $y \to \pm\infty$. La única posibilidad de que el producto $u(y)e^{-y^2/2}$ sea convergente para $y \to \pm\infty$ consiste en que el desarrollo en serie de la función $u(y)$ no contenga los infinitos términos, sino que se corte para algún valor de n, de modo que a partir de ese valor el resto de los coeficientes sean nulos y $u(y)$ sea un polinomio. Para que esto ocurra se debe verificar que

$$2n + 1 - \lambda = 0$$

para algún valor de n. Esta ecuación nos da los posibles valores de λ, de modo que $\lambda = 2n+1$ donde n es un número entero. Los autovalores del hamiltoniano son por tanto de la forma:

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

y forman un espectro discreto no degenerado. Nos queda un pequeño detalle y es que tenemos dos series de coeficientes números: unos que parten del valor a_0 y otros que parten del valor a_1 (potencias pares e impares del desarrollo). Si una de las dos serie se cortan la otra no tiene por que cortarse, de modo que tenemos que exigir que el coeficiente $a_{0,1}$ de la serie que no se corta sea nulo. De este modo sólo nos queda una constante arbitraria que nos permite normalizar las autofunciones del hamiltoniano. Vamos a ver cómo se generan las autofunciones del Hamiltoniano.

El primer autovalor se obtiene para $n = 0$ y por tanto $\lambda = 1$. En la relación de recurrencia vemos que la serie de potencias pares se corta en el segundo término, es decir que sólo aparece un témino par, a_0. En este caso tenemos que exigir que a_1 sea nulo. El estado fundamental es por tanto de la forma:

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \qquad \text{y} \qquad \varphi_0(y) = a_0 e^{-y^2/2} = C_0 e^{-y^2/2}$$

donde C_0 es una constante de normalización. Podemos ver que la energía del estado fundamental se corresponde con la estimación que hicimos previamente a partir del principio de indeterminación.

El primer estado escitado corresponde a $n = 1$ y por tanto $\lambda = 3$. En este caso es la serie de potencias impares la que se corta, por lo que hay que imponer que a_0 sea nulo. El primer estado excitado es por tanto de la forma:

$$E_1 = \frac{3\hbar\omega}{2} \qquad \text{y} \qquad \varphi_1(y) = a_1 y e^{-y^2/2} = C_1 2y e^{-y^2/2}$$

donde de nuevo C_1 es una constante de normalización (posteriormente veremos por qué introducimos las constantes C_0, C_1,$\cdots$ en lugar de utilizar las a_0, a_1,$\cdots$).

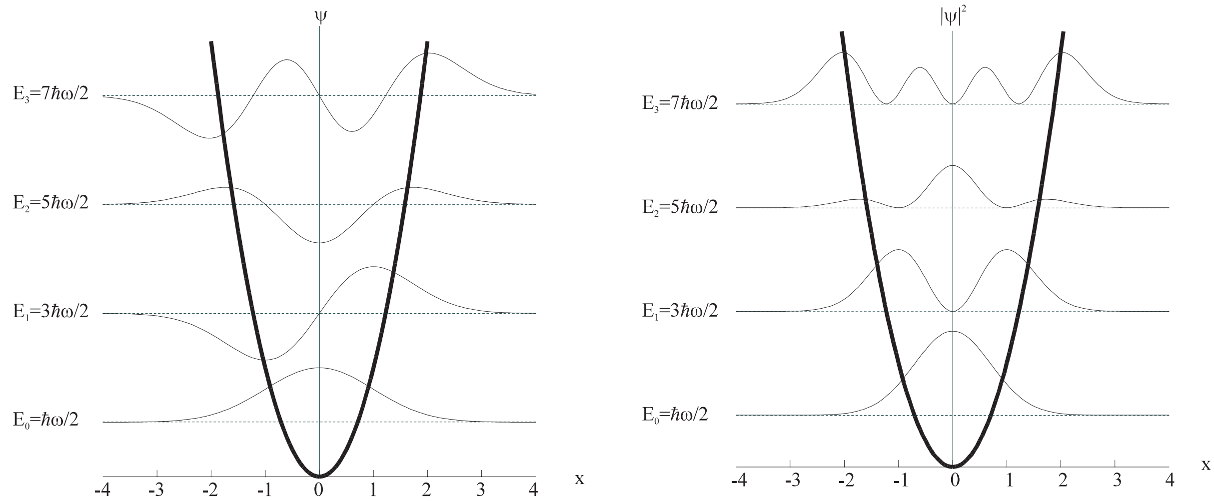
El segundo estado escitado se obtiene para $n = 2$ y por tanto $\lambda = 5$. Ahora es la serie de coeficientes pares la que se corta de modo que $a_1 = 0$. Si partimos de a_0 el siguiente coeficiente será $a_2 = -2a_0$, de modo que podemos escribir el segundo estado excitado como:

$$E_2 = \frac{5\hbar\omega}{2} \qquad \text{y} \qquad \varphi_2(y) = \left(a_0 - 2a_0 y^2\right) e^{-y^2/2} = C_2 \left(4y^2 - 2\right) e^{-y^2/2}$$

Así podemos seguir sucesivamente. En general los autovalores y autofunciones del Hamiltoniano son de la forma:

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \qquad \text{y} \qquad \varphi_n(y) = C_n H_n(y) e^{-y^2/2}$$

donde las funciones $H_n(y)$ son polinomios de grado n que se denominan los polinomios de Hermite. Se puede comprobar que las autofunciones del Hamiltoniano forman una base del espacio de funciones de onda. En el siguiente apartado veremos la forma explícita de los polinomios de Hermite y algunas de sus propiedades. En la siguiente figura podemos ver las primeras autofunciones del Hamiltoniano, así como la densidad de probabilidad de encontrar a la partícula.


ψ
E₃=7ħω/2
E₂=5ħω/2
E₁=3ħω/2
E₀=ħω/2
-4 -3 -2 -1 0 1 2 3 4
x
|ψ|²
E₃=7ħω/2
E₂=5ħω/2
E₁=3ħω/2
E₀=ħω/2
-4 -3 -2 -1 0 1 2 3 4
x