Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Fisico-Matemáticas

BÚSQUEDA DE OPERADORES FACTORIZABLES QUE CUMPLEN CON LA RELACIÓN DE HEISENBERG PARA EL OSCILADOR ARMÓNICO CUÁNTICO UNIDIMENSIONAL

Tesis presentada al

Colegio de Física

como requisito parcial para la obtención del grado de

Licenciado en Física

por

Alberto Israel Gómez Paredes

asesorado por

Dr. J. Fernando Rojas R.

Puebla Pue.
Septiembre de 2013

Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Fisico-Matemáticas

BÚSQUEDA DE OPERADORES FACTORIZABLES QUE CUMPLEN CON LA RELACIÓN DE HEISENBERG PARA EL OSCILADOR ARMÓNICO CUÁNTICO UNIDIMENSIONAL

Tesis presentada al

Colegio de Física

como requisito parcial para la obtención del grado de

Licenciado en Física

por

Alberto Israel Gómez Paredes

asesorado por

Dr. J. Fernando Rojas R.

Puebla Pue.
Septiembre de 2013

Título: BÚSQUEDA DE OPERADORES FACTORIZABLES QUE CUMPLEN CON LA RELACIÓN DE HEISENBERG PARA EL OSCILADOR ARMÓNICO CUÁNTICO UNIDIMENSIONAL

Estudiante: ALBERTO ISRAEL GÓMEZ PAREDES

COMITÉ

Presidente

Secretario

Vocal

Vocal

Dr. J. Fernando Rojas R.
Asesor

AGRADECIMIENTOS

A mi madre, por su total apoyo tanto en tiempos luminosos como oscuros. Que todo sea luz.

A mi familia nuclear; presentes y no presentes.

A mi mejor amiga Maribel Sanchez.

A mis amigos y camaradas Fernando Rojas y Jacobo Oliveros por su apoyo en procesos de aprendizaje varios.

Índice general

1. OPERADORES LINEALES DIFERENCIAL E INTEGRAL QUE SATISFACEN EL ÁLGEBRA DE HEISENBERG **3**

2. FUNDAMENTOS TEÓRICO CUÁNTICOS: OSCILADOR ARMÓNICO CUÁNTICO UNIDIMENSIONAL **13**

2.0.1. FORMA DE LA SOLUCIÓN PARA LAS FUNCIONES DE ONDA 16

2.0.2. USO DE LOS OPERADORES DE CREACIÓN Y ANIQUILACIÓN PARA ENCONTRAR EIGENVALORES Y EIGENVECTORES DEL HAMILTONIANO DEL OSCILADOR ARMÓNICO CUÁNTICO UNIDIMENSIONAL 18

2.0.3. EIGENVALORES DE LA ENERGÍA 20

2.0.4. EIGENESTADOS DE LA ENERGÍA EN EL ESPACIO DE POSICIÓN 23

3. CONSTRUCCIÓN ALTERNATIVA DE OPERADORES DE CONSTRUCCIÓN Y ANIQUILACIÓN **25**

4. APLICACIÓN AL OSCILADOR ARMÓNICO CUÁNTICO UNIDIMENSIONAL **35**

5. CONCLUSIONES **45**

ÍNDICE GENERAL

RESUMEN

Se trata de la busqueda de operadores diferenciales e integrales, que satisfacen la relación de Heisenberg, que puedan aplicarse a la solución de potenciales en Mecánica Cuántica, estos operadores a su vez pueden verse como la suma de operadores multiplicados por funciones, además, en cada sistema cuántico habrán de satisfacer las distintas relaciones de conmutación que cumplen los operadores en la teoría cuántica clásica, como un ejemplo de esto se hará un desarrollo análogo al que se realiza en la teoría clásica para el oscilador armónico unidimensional.

OBJETIVO

Buscar la forma ideal de operadores que satisfacen la relación de Heisenberg, tal que también satisfagan las relaciones de conmutación de los operadores convencionales de la Mecánica Cuántica, y sea posible manejar por partes estos operadores, observando su acción sobre las eigenfunciones como sumas de energía, además estos operadores axtraen más información sobre el sistema, información que normalmente se encuantra implícita en las eigenfunciones, Así también se espera que este trabajo sirva para hacer algunos cálculos de manera más corta y sencilla.

INTRODUCCIÓN

El propósito de esta tesis es intentar construir un desarrollo basado en el artículo de G Dattoli, D Levi y P. Winternitz; "Álgebra de Heisenberg, Calculo Umbral y Polinomios Ortogonales", donde se proponen dos operadores; un operador diferencial de segundo orden $\hat{P}$ y un operdor integral de primer orden $\hat{M}$. Que sean de utilidad para resolver diversos sistemas cuánticos, es decir desarrollar todo un procedimiento alterno al uso de la ecuación de Schrödinger y la representación matricial que propuso Heisenberg para la Mecánica Cuántica partiendo siempre de la forma original de los operadores $\hat{P}$ y $\hat{M}$ [1].

Expresándose estos operadores como:

$$\hat{P} = \Phi_2(x)\hat{D}_x^2 + \Phi_1(x)\hat{D}_x + \Phi_0(x)$$

$$\hat{M} = g(x)\hat{D}_x^{-1} + k(x)$$

La idea de dicha construcción puede encontrar su fundamento en parte, al tratamiento de Erwin Schrödinger al oscilador armónico cuántico unidimensional [6] que presenta en su artículo: Cuantización como problema de autovalores [4], otra motivación para dicha construcción son todos los problemas relacionados con tecnología derivada de la Física de estado sólido como los enrejados vibrantes, si bien en ese caso hablaríamos de un conjunto de átomos y no de una sola partícula, por lo que el potencial cambiaría. El tratamiento de Schrödinger consiste en factorizar al operador hamiltoniano para dicho caso en la forma:

$$\left(\frac{d^2}{dy^2} - y^2\right)\Psi = \left[\left(\frac{d}{dy} - y\right)\left(\frac{d}{dy} + y\right) - 1\right]\Psi$$

siendo nuestra ecuación de Schrödinger original:

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

donde $x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}y$, y $E = \frac{\omega\hbar}{2}\epsilon$.

Demostraremos que estos operadores cumplen con la relación de Heisenberg, las relaciones de conmutación para el caso del oscilador armónico cuántico unidimensional, haremos ver a su suma y resta como operadores análogos a los operadores de creación y aniquilación para el sistema ya mensionado. Una vez que tengamos su forma explícita analizaremos su acción sobre las eigenfunciones e indagaremos sobre cómo continuar con el proceso iterativo de busqueda de la forma exacta para el operador hamiltoniano de ese sistema.

Capítulo 1

OPERADORES LINEALES DIFERENCIAL E INTEGRAL QUE SATISFACEN EL ÁLGEBRA DE HEISENBERG

Al momento de aplicar nuestro propio desarrollo basado este a su vez en el artículo, nos referiremos inmediatamente a uno de los sistemas "simples"de la Mecánica Cuántica, pero a la vez un fenómeno bastante universal ya que encuentra su análogo inmediato en cualquier otra rama de la Física; ya sea Mecánica Clásica, Termodinámica, Física Molecular etc. donde nos encontramos con sistemas donde se realizan movimientos oscilatorios con suma frecuencia. Para el caso de la Mecánica Cuántica; el oscilador armónico cuántico unidimensional.

Definimos dos operadores lineales $\hat{P}$ y $\hat{M}$ de la siguiente forma [1]:

$$\hat{P} = \Phi_2(x)\hat{D}_x^2 + \Phi_1(x)\hat{D}_x + \Phi_0(x) \tag{1.1}$$

$$\hat{M} = g(x)\hat{D}_x^{-1} + k(x) \tag{1.2}$$

donde

$$\hat{D}_x = \frac{d}{dx} \tag{1.3}$$

y

$$\hat{D}_x^{-1}u(x) = \int_{x_0}^{x} u(x)dx \tag{1.4}$$

además; $\Phi_2(x), \Phi_1(x), \Phi_0(x), g(x), k(x)$ son funciones $r+1$ veces diferenciables.

Por hipótesis $\hat{P}\hat{M}$ y $\hat{M}\hat{P}$ son operadores diferenciales y cumplen

$$\left[\hat{P},\hat{M}\right]=\hat{1} \tag{1.5}$$

la cual es la relación de Heisenberg.

realicemos el producto

$$\hat{P}\hat{M}=\Big(\Phi_2(x)\hat{D}_x^2+\Phi_1(x)\hat{D}_x+\Phi_0(x)\Big)\Big(g(x)\hat{D}_x^{-1}+k(x)\Big) \tag{1.6}$$

esto es

$$\begin{aligned}
\hat{P}\hat{M}u(x) &= \Big(\Phi_2(x)\hat{D}_x^2+\Phi_1(x)\hat{D}_x+\Phi_0(x)\Big)\Big(g(x)\hat{D}_x^{-1}+k(x)\Big)u(x) \\
&= \Phi_2(x)\hat{D}_x\Big(g'(x)\hat{D}_x^{-1}u(x)+g(x)\hat{D}_x\hat{D}_x^{-1}u(x)\Big) \\
&\quad +\Phi_1(x)\Big(g'(x)\hat{D}_x^{-1}u(x)+g(x)\hat{D}_x\hat{D}_x^{-1}u(x)\Big) \\
&\quad +\Phi_0(x)g(x)\hat{D}_x^{-1}u(x)+\Phi_2(x)\hat{D}_x\left(k'(x)\,u(x)+k(x)u(x)'\right) \\
&\quad +\Phi_1(x)\left(k'(x)\,u(x)+k(x)u'(x)\right)+\Phi_0(x)(k(x)u(x))
\end{aligned} \tag{1.7}$$

reducimos los términos de la forma $\hat{D}_x\hat{D}_x^{-1}u(x)$

$$\begin{aligned}
\hat{P}\hat{M}u(x) &= \Phi_2(x)\hat{D}_x\Big(g'(x)\hat{D}_x^{-1}u(x)+g(x)u(x)\Big) \\
&\quad +\Phi_1(x)\Big(g'(x)\hat{D}_x^{-1}u(x)+g(x)u(x)\Big) \\
&\quad +\Phi_0(x)g(x)\hat{D}_x^{-1}u(x)+\Phi_2(x)(k''(x)u(x)+2k'(x)u'(x)+k(x)u''(x)) \\
&\quad +\Phi_1(x)\left(k'(x)\,u(x)+k(x)u'(x)\right)+\Phi_0(x)(k(x)u(x)) \\
&= \Phi_2(x)\Big(g''(x)\hat{D}_x^{-1}u(x)+2g'(x)u(x)+g(x)u'(x)\Big) \\
&\quad +\Phi_1(x)\Big(g'(x)\hat{D}_x^{-1}u(x)+g(x)u(x)\Big)+\Phi_0(x)g(x)\hat{D}_x^{-1}u(x) \\
&\quad +\Phi_2(x)(k''(x)u(x)+2k'(x)u'(x)+k(x)u''(x)) \\
&\quad +\Phi_1(x)\left(k'(x)\,u(x)+k(x)u'(x)\right)+\Phi_0(x)(k(x)u(x))
\end{aligned} \tag{1.8}$$

así, obtenemos la expresión

$$\begin{aligned}
\hat{P}\hat{M}u(x) &= \left[\Phi_2(x)g''(x)+\Phi_1(x)g'(x)+\Phi_0(x)g(x)\right]\hat{D}_x^{-1}u(x) \\
&\quad +\Phi_2(x)\left(2g'(x)u(x)+g(x)u'(x)\right) \\
&\quad +\Phi_1(x)g(x)u(x)+\Phi_2(x)(k''(x)u(x)+2k'(x)u'(x)+k(x)u''(x)) \\
&\quad +\Phi_1(x)\left(k'(x)\,u(x)+k(x)u'(x)\right)+\Phi_0(x)k(x)u(x)
\end{aligned} \tag{1.9}$$

hemos hallado el producto $\hat{P}\hat{M}$ el cual contiene un término proporcional a $\hat{D}_x^{-1}u(x)$, este estará ausente al cumplirse la condición:

$$\Phi_2(x)g''(x) + \Phi_1(x)g'(x) + \Phi_0(x)g(x) = 0 \tag{1.10}$$

obteniendo así, para la expresión (1.6)

$$\begin{aligned}\hat{P}\hat{M}u(x) &= \Phi_2(x)\left(2g'(x)u(x) + g(x)u'(x)\right) \\ &\quad +\Phi_2(x)(k''(x)u(x) + 2k'(x)u'(x) + k(x)u''(x)) \\ &\quad +\Phi_1(x)\left(g(x)u(x) + k'(x)\,u(x) + k(x)u'(x)\right) + \Phi_0(x)k(x)u(x).\end{aligned} \tag{1.11}$$

Hallemos ahora el producto

$$\hat{M}\hat{P} = \Big(g(x)\hat{D}_x^{-1} + k(x)\Big)\Big(\Phi_2(x)\hat{D}_x^2 + \Phi_1(x)\hat{D}_x + \Phi_0(x)\Big) \tag{1.12}$$

i.e.

$$\begin{aligned}\hat{M}\hat{P}u(x) &= \Big(g(x)\hat{D}_x^{-1} + k(x)\Big)\Big(\Phi_2(x)\hat{D}_x^2 + \Phi_1(x)\hat{D}_x + \Phi_0(x)\Big)u(x) \\ &= g(x)\hat{D}_x^{-1}\Big[\Phi_2(x)\hat{D}_x^2 + \Phi_1(x)\hat{D}_x + \Phi_0(x)\Big]u(x) \\ &\quad +k(x)\Big(\Phi_2(x)\hat{D}_x^2 + \Phi_1(x)\hat{D}_x + \Phi_0(x)\Big)\end{aligned} \tag{1.13}$$

de esta última ecuación observemos el primer sumando, al cual podemos aplicar el **Teorema extendido de Leibnitz** para antiderivadas [1]:

$$\hat{D}_x^{-1}\left[f(x)u(x)\right] = \sum_{r=0}^{\infty}(-1)^r\left[D^r f(x)\right]D^{-(1+r)}u(x) \tag{1.14}$$

donde $f(x)$ puede ser una función o un operador dependiente de x.
Ahora podemos escribir.

$$\begin{aligned}\hat{D}_x^{-1}\left[\Phi_2(x)\hat{D}_x^2+\Phi_1(x)\hat{D}_x+\Phi_0(x)\right]u(x) &= \sum_{r=0}^{\infty}(-1)^r\left(D^r\Phi_2(x)\right)D^{-(1+r)}\hat{D}_x^2u(x) \\ &\quad+\left(D^r\Phi_1(x)\right) \\ &\quad\cdot\left(D^{-(1+r)}\hat{D}_xu(x)\ (-1)^r\left(D^r\Phi_0(x)\right)\right) \\ &\quad\cdot\left(D^{-(1+r)}u(x)\right)\end{aligned} \tag{1.15}$$

observando únicamente que en nuestro caso $g(x)\hat{D}_x^{-1}\left[\Phi_2(x)\hat{D}_x^2+\Phi_1(x)\hat{D}_x+\Phi_0(x)\right]u(x) = g(x)\hat{D}_x^{-1}\left[f(x)u(x)\right]$ y calculando hasta el orden cuarto de la serie observaremos el siguiente comportamiento:

$$\begin{aligned}\hat{D}_x^{-1}\left[\Phi_2(x)\hat{D}_x^2+\Phi_1(x)\hat{D}_x+\Phi_0(x)\right] &= \{[\Phi_2(x)D_x^{-1}(\hat{D}_x^2u(x))+\Phi_1(x)D_x^{-1}(\hat{D}_xu(x)) \\ &\quad+\Phi_0(x)D_x^{-1}u(x)] \\ &\quad-[\left(\hat{D}_x\Phi_2(x)\right)D_x^{-2}(\hat{D}_x^2u(x)) \\ &\quad+\left(\hat{D}_x\Phi_1(x)\right)D_x^{-2}(\hat{D}_xu(x)) \\ &\quad+\left(\hat{D}_x\Phi_0(x)\right)D_x^{-2}u(x)] \\ &\quad+[\left(\hat{D}_x^2\Phi_2(x)\right)D_x^{-3}(\hat{D}_x^2u(x)) \\ &\quad+\left(\hat{D}_x^2\Phi_1(x)\right)D_x^{-3}(\hat{D}_xu(x)) \\ &\quad+\left(\hat{D}_x^2\Phi_0(x)\right)D_x^{-3}u(x)] \\ &\quad-[\left(\hat{D}_x^3\Phi_2(x)\right)D_x^{-4}(\hat{D}_x^2u(x)) \\ &\quad+\left(\hat{D}_x^3\Phi_1(x)\right)D_x^{-4}(\hat{D}_xu(x)) \\ &\quad+\left(\hat{D}_x^3\Phi_0(x)\right)D_x^{-4}u(x)] \\ &\quad+[\left(\hat{D}_x^4\Phi_2(x)\right)D_x^{-5}(\hat{D}_x^2u(x)) \\ &\quad+\left(\hat{D}_x^4\Phi_1(x)\right)D_x^{-5}(\hat{D}_xu(x)) \\ &\quad+\left(\hat{D}_x^4\Phi_0(x)\right)D_x^{-5}u(x)]-...\}\end{aligned}$$

por lo que obtenemos

$$\begin{aligned}
\hat{D}_x^{-1}\left[\Phi_2(x)\hat{D}_x^2+\Phi_1(x)\hat{D}_x+\Phi_0(x)\right] &= \{\left[\Phi_2(x)D_x-\Phi_2'(x)+\Phi_1(x)\right]u(x)\\
&+\left[\Phi_2''(x)D_x-\Phi_2'(x)+\Phi_1(x)\right]D_x^{-1}u(x)\\
&-\left[\Phi_2'''(x)D_x-\Phi_1''(x)+\Phi_0(x)\right]D_x^{-2}u(x)\\
&+\left[\Phi_2^{(4)}(x)D_x-\Phi_1'''(x)+\Phi_0''(x)\right]D_x^{-3}u(x)\\
&-\left[\Phi_2^{(5)}(x)D_x-\Phi_1^{(4)}(x)+\Phi_0'''(x)\right]D_x^{-4}u(x)\\
&+...\}
\end{aligned}$$

pero contamos con la condición [1]:

$$\Phi_2''(x)D_x-\Phi_1'(x)+\Phi_0(x)=0 \tag{1.16}$$

por lo que el producto $g(x)\hat{D}_x^{-1}\left[\Phi_2(x)\hat{D}_x^2+\Phi_1(x)\hat{D}_x+\Phi_0(x)\right]$ será igual a
$g(x)\hat{D}_x^{-1}\left[\Phi_2(x)\hat{D}_x^2+\Phi_1(x)\hat{D}_x+\Phi_0(x)\right]=g(x)\left[\Phi_2(x)D_x-\Phi_2'(x)+\Phi_1(x)\right]u(x)$
donde los coeficientes D_x^{-k} con $k\geq 2$ son iguales a 0 como consecuencia de la Ec. (1.16).

Así tenemos que la Ec.1.13 se expresa como:

$$\begin{aligned}
\hat{M}\hat{P}u(x) &= g(x)\left[\Phi_2(x)D_x-\Phi_2'(x)+\Phi_1(x)\right]u(x)\\
&+k(x)\left[\Phi_2(x)D_x^2+\Phi_1(x)D_x+\Phi_0(x)\right]u(x)
\end{aligned} \tag{1.17}$$

completemos el cálculo del conmutador $\left[\hat{P},\hat{M}\right]$, recordando que dicho conmutador debiera cumplir con la relación de Heisenberg [1]; $\left[\hat{P},\hat{M}\right]=\hat{1}$. así, de las Ecs. (1.11) y (1.17) obtenemos:

$$\begin{aligned}
\left[\hat{P},\hat{M}\right]u(x) &= \{\hat{P}\hat{M}-\hat{M}\hat{P}\}u(x)\\
&= \{\Phi_2(x)(2g'(x)u(x)+g(x)u'(x))\\
&+\Phi_2(x)\left(k''(x)u(x)+2k'(x)u'(x)+k(x)u''(x)\right)\\
&+\ \Phi_1(x)\left(g(x)u(x)+k'(x)\,u(x)+k(x)u'(x)\right)\\
&+\Phi_0(x)k(x)u(x)\\
&-\left(k(x)\left[\Phi_2(x)D_x^2+\Phi_1(x)D_x+\Phi_0(x)\right]u(x)\right.\\
&\left.+g(x)\left[\Phi_2(x)D_x-\Phi_2'(x)+\Phi_1(x)\right]u(x)\right)\}
\end{aligned}$$

para hallar $\left[\hat{P},\hat{M}\right]=\hat{1}$ contamos con otras dos condiciones [1]:

$$\begin{aligned}
2\Phi_2(x)g'(x)+\Phi_2'(x)g(x) &= 1\\
k'(x) &= 0
\end{aligned} \tag{1.18}$$

de lo anterior

$$\begin{aligned}\left[\hat{P},\hat{M}\right]u(x) &= \{(2\Phi_2(x)g'(x)u(x)+\Phi_2(x)g(x)u'(x))\\ &\quad +\Phi_2(x)\left[k''(x)u(x)+2k'(x)u'(x)+k(x)u''(x)\right]\\ &\quad +\Phi_1(x)\left[g(x)u(x)+k'(x)u(x)+k(x)u'(x)\right]+\Phi_0(x)k(x)u(x)\\ &\quad -(k(x)\left[\Phi_2(x)D_x^2+\Phi_1(x)D_x+\Phi_0(x)\right]u(x)\\ &\quad +g(x)\left[\Phi_2(x)D_x-\Phi_2'(x)+\Phi_1(x)\right]u(x))\}\end{aligned}$$

Podemos ahora analizar únicamente el término: $2\Phi_2(x)g'(x)u(x)+\Phi_2(x)g(x)u'(x) = 2\Phi_2(x)g'(x)u(x)+\Phi_2(x)g(x)\hat{D}_xu(x)$, del conocido teorema de la derivada de un producto de funciones $f:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ si $\gamma=\alpha\beta$ entonces $\gamma'=\alpha'\beta+\alpha\beta'$ ó $\alpha\beta'=\gamma'-\alpha'\beta$. Si nuestro término $(\Phi_2(x)g(x))\,u'(x)$ lo comparamos con $\alpha\beta'$. Entonces obtenemos

$$\begin{aligned}(\Phi_2(x)g(x))u'(x) &= (\Phi_2(x)g(x)u(x))'-(\Phi_2(x)g(x))'u(x)\\ &\quad \text{ó}\\ \Phi_2(x)g(x)\hat{D}_xu(x) &= \hat{D}_x\left(\Phi_2(x)g(x)u(x)\right)-\hat{D}_x(\Phi_2(x)g(x))u(x)\end{aligned}$$

así, podemos escribir

$$\begin{aligned}2\Phi_2(x)g'(x)u(x)+\Phi_2(x)g(x)\hat{D}_xu(x) &= 2\Phi_2(x)g'(x)u(x)\\ &\quad +\hat{D}_x\left(\Phi_2(x)g(x)u(x)\right)\\ &\quad -\hat{D}_x(\Phi_2(x)g(x))u(x)\\ &= 2\Phi_2(x)g'(x)u(x)+\Phi_2'(x)g(x)u(x)\\ &\quad +\Phi_2(x)\left(g'(x)u(x)+g(x)u'(x)\right)\\ &\quad -\left(\Phi_2'(x)g(x)+\Phi_2(x)g'(x)\right)u(x)\end{aligned}\tag{1.19}$$

podemos ahora reescribir la Ec. (1.19) como

$$\begin{aligned}\Phi_2(x)(2g'(x)u(x)+g(x)u'(x)) &= \left[2\Phi_2(x)g'(x)+\Phi_2'(x)g(x)\right]u(x)\\ &\quad +\Phi_2(x)\left(g'(x)u(x)+g(x)u'(x)\right)\\ &\quad -\left(\Phi_2'(x)g(x)+\Phi_2(x)g'(x)\right)u(x)\end{aligned}\tag{1.20}$$

pero sabemos de nuestra condicion 1.18 que:

$$2\Phi_2(x)g'(x)+\Phi_2'(x)g(x) = 1$$

por lo tanto:

$$
\begin{aligned}
[\hat{P},\hat{M}] &= u(x)+\Phi_2(x)\left(g'(x)u(x)+g(x)u'(x)\right)-(\Phi_2'(x)g(x)+\Phi_2(x)g'(x))u(x)\\
&+\Phi_2(x)\left[k''(x)u(x)+2k'(x)u'(x)+k(x)u''(x)\right]\\
&+\Phi_0(x)k(x)u(x)-(k(x)\left[\Phi_2(x)D_x^2+\Phi_1(x)D_x+\Phi_0(x)\right]u(x)\\
&+g(x)\left[\Phi_2(x)D_x-\Phi_2'(x)+\Phi_1(x)\right]u(x))\}.
\end{aligned}
$$

¿Qué ocurre si aplicamos la condición (1.18) específicamente $k'(x)=0$?. Obtendremos:

$$
\begin{aligned}
\left[\hat{P},\hat{M}\right]u(x) &= \{u(x)+\Phi_2(x)\left(g'(x)u(x)+g(x)u'(x)\right)\\
&-\left(\Phi_2'(x)g(x)+\Phi_2(x)g'(x)\right)u(x)+\Phi_2(x)k(x)u''(x)\\
&+\Phi_1(x)\left[g(x)u(x)+k(x)u'(x)\right]+\Phi_0(x)k(x)u(x)\\
&-(k(x)\left[\Phi_2(x)D_x^2+\Phi_1(x)D_x+\Phi_0(x)\right]u(x)\\
&+g(x)\left[\Phi_2(x)D_x-\Phi_2'(x)+\Phi_1(x)\right]u(x))\}
\end{aligned}
$$

además la relación de Heisenberg nos impone la condición de frontera en $x=x_0$, esta es:

$$
\left[\Phi_2(x)u'(x)-\Phi_2'(x)u(x)+\Phi_1(x)u(x)\right]|_{x=x_0}=0 \tag{1.21}
$$

si por hipótesis nos encontramos en el punto $x=x_0$, y factorizamos $u(x)$ en (1.21), obtenemos

$$
\left[\Phi_2(x)D_x-\Phi_2'(x)+\Phi_1(x)\right]u(x)\,|_{x=x_0}=0 \tag{1.22}
$$

entonces

$$
\begin{aligned}
\left[\hat{P},\hat{M}\right]u(x) &= \{u(x)+\Phi_2(x)\left(g'(x)u(x)+g(x)u'(x)\right)\\
&-\left(\Phi_2'(x)g(x)+\Phi_2(x)g'(x)\right)u(x)\\
&+\Phi_2(x)k(x)u''(x)+\Phi_1(x)\left(g(x)u(x)+k(x)u'(x)\right)\\
&+\Phi_0k(x)u(x)-k(x)\left[\Phi_2(x)D_x^2+\Phi_1(x)D_x+\Phi_0(x)\right]u(x)\}
\end{aligned}
$$

restando los términos que son iguales tenemos

$$
\begin{aligned}
\left[\hat{P},\hat{M}\right]u(x) &= \{u(x)+\Phi_2(x)g(x)u'(x)-\Phi_2'(x)g(x)u(x)+\Phi_1(x)g(x)u(x)\}\\
&= \{u(x)+g(x)\left(\Phi_2(x)u'(x)-\Phi_2'(x)u(x)+\Phi_1(x)u(x)\right)\}
\end{aligned}
$$

pero recordando nuestra condición de frontera Ec. (1.21) que nos encontramos en el punto $x=x_0$.

$$\left[\hat{P},\hat{M}\right]u(x)=\{u(x)+g(x)(0)\}=\hat{1}u(x)$$

$$\therefore\ \left[\hat{P},\hat{M}\right]=\hat{1}$$

la cual es nuestra ecuación (1.5), es decir la relación de Heisenberg.

Por otro lado, al resolver la Ec. (1.18)

$$\begin{aligned} 2\Phi_2(x)g'(x)+\Phi_2'(x)g(x) &= 1 \\ k'(x) &= 0 \end{aligned}$$

con la condición de frontera (Ec. (1.21)) [1].

$$\left[\Phi_2(x)u'(x)-\Phi_2'(x)u(x)+\ \Phi_1(x)u(x)\right]|_{x=x_0}=0$$

si deseamos encontrar $g(x)$ y $\Phi_2(x)$ una en términos de la otra y viceversa, procedemos de la siguente manera.

De la teoría de ecuaciones diferenciales como un teorema, sabemos que una ecuación del tipo $\frac{dy(x)}{dx}+P(x)y(x)=Q(x)$ tiene por solución:

$$y(x)e^{\int P(x)dx}=\int Q(x)e^{\int P(x)dx}+C$$

observamos que podemos escribir la Ec. (1.18) como:

$$g'(x)+\frac{\Phi_2'(x)}{2\Phi_2(x)}g(x)=\frac{1}{2\Phi_2(x)}$$

por lo que de la teoría de ecuaciones diferenciales

$$\begin{aligned} P(x) &= \frac{\Phi_2'(x)}{2\Phi_2(x)} \\ &\text{y} \\ Q(x) &= \frac{1}{2\Phi_2(x)} \end{aligned}$$

así, podemos hallar la solución de (1.18) como:

$$g(x)e^{\int \frac{\Phi_2'(x)}{2\Phi_2(x)}dx} = \int \left(\frac{1}{2\Phi_2(x)}\right) e^{\int \frac{\Phi_2'(x)}{2\Phi_2(x)}dx} + C \tag{1.23}$$

reexpresemos $e^{\int \frac{\Phi_2'(x)}{2\Phi_2(x)}dx}$ en una forma más útil. Haciendo el cambio de variable $u(x) = \Phi_2(x)$ entonces $du(x) = \Phi_2'(x)dx$. Es decir.

$$\begin{aligned} e^{\int \frac{\Phi_2'(x)}{2\Phi_2(x)}dx} &= e^{\int \frac{du(x)}{2u(x)}dx} = e^{\frac{1}{2}\ln|u(x)|} \\ &= (e^{\ln|u(x)|})^{\frac{1}{2}} = (|u(x)|)^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

así, el término del lado derecho de la ecuación (1.23) queda como

$$\int \frac{1}{2\Phi_2(x)}(|u(x)|)^{\frac{1}{2}}dx + c \tag{1.24}$$

pero sabemos que $|u(x)| = \sqrt{u(x)^2}$ y que $u(x) = \Phi_2(x)$ por lo que

$$\begin{aligned} \int \frac{1}{2\Phi_2(x)}(|u(x)|)^{\frac{1}{2}}dx + c &= \frac{1}{2}\int \frac{\left(\sqrt{\Phi_2(x)^2}\right)^{\frac{1}{2}}}{\Phi_2(x)}dx + c \\ &= \frac{1}{2}\int \frac{(\Phi_2(x))^{\frac{1}{2}}}{\Phi_2(x)}dx + c \\ &= \frac{1}{2}\int \frac{1}{\sqrt{\Phi_2(x)}}dx + c \end{aligned}$$

ahora, si observamos el lado izquierdo de nuestra ecuación (1.23), vemos que ya hemos expresado de forma conveniente a

$$e^{\int \frac{\Phi_2'(x)}{2\Phi_2(x)}dx} = (|u(x)|)^{\frac{1}{2}}$$

aplicando el cambio de variabe $u(x) = \Phi_2(x)$, entonces $du(x) = \Phi_2'(x)dx$. Así, claramente

$$e^{\int \frac{\Phi_2'(x)}{2\Phi_2(x)}dx} = \sqrt{\Phi_2(x)}\text{ , por lo que }\; g(x)e^{\int \frac{\Phi_2'(x)}{2\Phi_2(x)}dx} = g(x)\sqrt{\Phi_2(x)}$$

si igualamos lo que obtuvimos de ambos lados de la ecuación (1.23) obtenemos:

$$g(x)\sqrt{\Phi_2(x)} = \frac{1}{2}\int \frac{1}{\sqrt{\Phi_2(x)}}dx + c$$

ahora bien, sabemos que nos econtramos al rededor de un punto de frontera x_0 por lo que podemos expresar a la integral como:

$$g(x) = \frac{1}{2\sqrt{\Phi_2(x)}} \left\{ \int_{x_0}^{x} \frac{1}{\sqrt{\Phi_2(\xi)}} d\xi + \frac{c}{\sqrt{\Phi_2(x_0)}} \right\} \tag{1.25}$$

luego, transformando la Ec.(1.18): $2\Phi_2(x)g'(x) + \Phi_2'(x)g(x) = 1$, multiplicando ambos lados de esta ecuación por $g(x)$ obtenemos.

$$\frac{d}{dx}\left(\Phi_2(x)g(x)^2\right) = g(x).$$

También es posible expresar esto último como $d\left(\Phi_2(x)g(x)^2\right) = g(x)dx$ de donde podemos hallar la forma explícita de $\Phi_2(x)$ al integrar, además recordando que nos encontramos al rededor del punto frontera x_0 y sabiendo que no podemos utilizar los límites de integración con la misma nomenclatura que el argumento de la función, expresemos a $\Phi_2(x)$ como:

$$\Phi_2(x) = \frac{1}{g(x)^2} \left\{ \int_{x_0}^{x} g(\eta)d\eta + \frac{c}{g(x_0)^2} \right\} \tag{1.26}$$

Capítulo 2

FUNDAMENTOS TEÓRICO CUÁNTICOS: OSCILADOR ARMÓNICO CUÁNTICO UNIDIMENSIONAL

Antes de discutir sobre el oscilador armónico cuántico unidimensional, hay que recordar que dentro de la Mecánica Cuántica se desarrollaron dos enfoques alternos. Para tratar el movimiento de una partícula que se mueve bajo la acción de una fuerza tenemos la ecuación de Schrödinger que nos relaciona la onda-partícula y la fuerza que se ejerce sobre esta, dicha ecuación es [3]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x,t) = \frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial^2 t} \tag{2}$$

Por otro lado existe el tratamiento matricial de Heisenberg, el cual maneja cantidades dinámicas tales como x, $p(x)$ y E representadas por matrices. Pero continuando con el enfoque que nosotros seguiremos, observaremos como debe cambiar su forma la ecuación de Schrödinger para el caso que estudiaremos es decir para el oscilador armónico cuántico unidimensional, en este caso requerimos de dicha ecuación en la forma

$$\frac{\partial\Psi}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\Psi \tag{2.1}$$

Es decir independiente del tiempo, en el mismo contexto, tratamos con una partícula sujeta a una fuerza elástica, entonces el potencial estará dado por $V(x) = m\varpi^2\hat{x}^2$, siendo ϖ la fecuencia clásica. Así nuestra ecuación adquiere la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2} + (\frac{1}{2}m\hbar^2\varpi^2 - E)\Psi = 0 \tag{2.2}$$

si además realizamos la siguiente sustitución

$x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}y$, y $E = \frac{\omega\hbar}{2}\epsilon$.

Nuestra ecuación se convierte en

$$\frac{d^2\Psi}{dy^2} + (\epsilon - y^2)\Psi = 0 \tag{2.3}$$

Para encontrar la fórma de sus soluciones, observamos que para $|x|$ suficientemente grande, la energía potencial es siempre mayor que la energía total, por lo que la solución de nuestra ecuación de onda es una combinación de exponenciales reales, así la solución para $|x|$ son de la forma

$\exp \int_a^x \sqrt{2m(V-E)}/\hbar \, dx$ pero hemos dicho que para $|x|$ suficientemente grande: $V >> E$ por lo que $\sqrt{2m(V-E)}$ es aproximadamente $\sqrt{V} = \sqrt{\frac{m}{2}}\omega x$ de aquí que la solución sea del orden

$$A \exp\Big(\frac{m\omega}{\hbar}\frac{x^2}{2}\Big) + B \exp\Big(-\frac{m\omega}{\hbar}\frac{x^2}{2}\Big)$$

como debemos encontrar la solución que decaiga exponencialmente para $|x|$ suficientemente grande elegimos

$$\exp\Big(-\frac{m\omega}{\hbar}\frac{x^2}{2}\Big). \tag{2.4}$$

Para poder delimitar en forma total la forma de la solución, apliquemos el método de factorizació de Schrödinger para nuestra ecuación de onda, esto es, factorizamos el operador Hamiltoniano en dos operadores de la siguiente forma:

$$\Big(\frac{d^2}{dy^2} - y^2\Big)\Psi = \Big[\Big(\frac{d}{dy} - y\Big)\Big(\frac{d}{dy} + y\Big) - 1\Big]\Psi$$

por lo que la ecuación (2.3) puede escribirse como

$$\Big(\frac{d}{dy} - y\Big)\Big(\frac{d}{dy} + y\Big)\Psi_\epsilon = -(\epsilon - 1)\Psi_\epsilon \tag{2.5}$$

donde Ψ_ϵ es la eigenfunción perteneciente al eigenvalor ϵ. Si ahora multiplicamos la ecuación anterior por un operador diferencial en la siguiente forma, obtendremos

$$\Big(\frac{d}{dy} + y\Big)\Big(\frac{d}{dy} - y\Big)\Big(\frac{d}{dy} + y\Big)\Psi_\epsilon = \Big(\frac{d^2}{dy^2} - y^2 - 1\Big)\Big(\frac{d}{dy} + y\Big)\Psi_\epsilon = -(\epsilon - 1)\Big(\frac{d}{dy} + y\Big)\Psi_\epsilon \tag{2.6}$$

observando el

$$\Big(\frac{d}{dy}+y\Big)\Psi_\epsilon=\Phi_\epsilon \tag{2.7}$$

de donde utilizando la última igualdad de la ecuación (2.6) obtenemos

$$\Big(\frac{d^2}{dy^2}-y^2\Big)\Phi_\epsilon=-(\epsilon-2)\Phi_\epsilon. \tag{2.8}$$

Así concluimos que si Ψ_ϵ es una eigenfunción de la ecuación de Schrödinger correspondiente al eigenvalor ϵ, entonces

$$\Phi_\epsilon=\Big(\frac{d}{dy}+y\Big)\Psi_\epsilon \tag{2.9}$$

es una eigenfunción de la misma ecuación correspondiente a un eigevalor $\epsilon-2$. Así dada una solución siempre podemos deducir otra. Por lo que repitiendo este proceso llegamos a la conclusión de que si ϵ es un eigenvalor, entonces $\epsilon-2n$ es tambié un eigenvalor, siempre que n sea un número entero. Bajo el análisis anterior, si n es suficientemente grande, los eigenvalores y por lo tanto la energía serán negativos, sin embargo podemos ver que la energía siempre es positiva, para el valor promedio de E tenemos:

$$\overline{E}=\int\Psi^*H\Psi dx=-\int\frac{\hbar^2}{2m}\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{dx^2}dx+\int\Psi^*\frac{m\omega^2x^2}{2}dx$$

la cual resolviendo por partes nos conduce a

$$\overline{E}=\frac{\hbar^2}{2m}\int\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\frac{\partial\Psi}{\partial x}dx+\frac{m\omega^2}{2}\int\Psi^*x^2\Psi dx$$

siendo ambas integrales positivas por lo que $\overline{E}>0$. Además para una eigenfunción:

$$\overline{E}=\int\Psi_E^*H\Psi_E dx=E\int\Psi^*=E$$

lo que indica que E y por lo tanto ϵ deben ser positivos.
Para no encontrarnos en una contradicción impongamos la siguiente condición a los eigenvalores,

recordando nuestra ecuación (2.5) tenemos que

$$\Big(\frac{d}{dy}-y\Big)\Big(\frac{d}{dy}+y\Big)\Psi_\epsilon=\frac{d^2}{dy^2}\Psi_\epsilon-y^2\Psi_\epsilon+\Psi_\epsilon=0. \tag{2.10}$$

Es decir de (2.10) vemos que el valor más bajo para ϵ debe ser $\epsilon = 1$. Entonces los únicos valores de ϵ deben ser tales que $\epsilon - 2n = 1$, donde n es un entero. De lo anterior los eigevalores seran de la forma

$$\epsilon = 2n + 1$$

y por lo tanto los eigenvalores son

$$E = (2n+1)\frac{\hbar\omega}{2} = \Big(n + \frac{1}{2}\Big)\hbar\omega \tag{2.11}$$

2.0.1. FORMA DE LA SOLUCIÓN PARA LAS FUNCIONES DE ONDA

Apoyandonos en la eigenfunción para el estado base y del operador diferencial introducido por Schrödinger

$$\frac{d\Psi_0}{dy} + y\Psi_0 = 0 \tag{2.12}$$

la solución es

$$\Psi_0 = Ae^{\frac{-y^2}{2}} \tag{2.13}$$

donde A es constante. Para normalizar la función de onda elegimos $A = 1/\sqrt{\pi}$. siendo el estado más bajo de energía una simple función gausiana. Así, las funciones de onda restantes pueden ser obtenidas de Ψ_0, para esto escribimos la ecuación de Schrödinger en la forma:

$$\Big(\frac{d}{dy} + y\Big)\Big(\frac{d}{dy} - y\Big)\Psi_\epsilon = -(\epsilon + 1)\Psi_\epsilon \tag{2.14}$$

si ahora multiplicamos por la izquierda a esta última ecuación por $\Big(\frac{d}{dy} - y\Big)$ obtenemos

$$\Big(\frac{d}{dy} - y\Big)\Big(\frac{d}{dy} + y\Big)\Big(\frac{d}{dy} - y\Big)\Psi_\epsilon = \Big(\frac{d^2}{dy^2} - y^2 + 1\Big)\Big(\frac{d}{dy} - y\Big)\Psi_\epsilon = -(\epsilon + 1)\Big(\frac{d}{dy} - y\Big)\Psi_\epsilon \tag{2.15}$$

haciendo el primer producto del lado izquierdo

$$\Big(\frac{d^2}{dy^2}-y^2\Big)\Big(\frac{d}{dy}-y\Big)\Psi_\epsilon=-(\epsilon+2)\Big(\frac{d}{dy}-y\Big)\Psi_\epsilon \tag{2.16}$$

observamos que la eigenfunción

$$\Phi=\Big(\frac{d}{dy}-y\Big)\Psi_\epsilon$$

satisface la ecuación de Schrödinger, pero corresponde a un eigenvalor $\epsilon+2$. Entonces, si tenemos una eigenfunción, nosotros podemos generar la siguiente eigenfunción para un estado superior de energía utilizando el operador

$$\Big(\frac{d}{dy}-y\Big)$$

en esta forma podemos obtener todas las eigenfunciones a partir de Φ_0. La n-ésima eigenfunción es por lo tanto

$$\Psi_n=C_n(-1)^n\Big(\frac{d}{dy}-y\Big)^n\Psi_0=C_n(-1)^n\Big(\frac{d}{dy}-y\Big)^n e^{\frac{-y^2}{2}} \tag{2.17}$$

siendo C_n una constante de normalización, si aplicamos el operador diferencial un par de veces, obtenemos las primeras eigenfunciónes

$$\Psi_0=\alpha e^{\frac{-y^2}{2}}$$

$$\Psi_1=\beta 2y e^{\frac{-y^2}{2}}$$

$$\Psi_2=\gamma(2y^2-1)e^{\frac{-y^2}{2}}$$

en general vemos que Ψ_n es igual a $e^{\frac{-y^2}{2}}$ por un polinomio de grado n-ésimo, por lo que podemos escribir

$$\Psi_n=C_n e^{\frac{-y^2}{2}}H_n(y) \tag{2.18}$$

siendo $H_n(y)$ el polinomio en cuestión, llamado polinomio de Hermite donde C_n es una constante de normalización. Para hallar tal constante tomamos:

$$\Psi_n=C_n^* e^{\frac{-y^2}{2}}H_n(y)$$

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

esto del hecho de que para cualquier función arbitrariaΦ se cumple la relación

$$\Big(\frac{d}{dy}-y\Big)\Phi=e^{\frac{y^2}{2}}\frac{d}{dy}(e^{\frac{-y^2}{2}}\Phi)$$

por lo que podemos hallar C_n a partir de

$$(-1)^n|C_n|^2 \int_{-\text{ínf}}^{\text{ínf}} H_n(y) \frac{d}{dy}(e^{-y^2} dy = 1 \tag{2.19}$$

de donde C_n resulta ser

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}}. \tag{2.20}$$

Finalmente la función de onda normalizada será

$$\Psi_n(y) = \frac{e^{\frac{-y^2}{2}} H_n(y)}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} \tag{2.21}$$

2.0.2. USO DE LOS OPERADORES DE CREACIÓN Y ANIQUILACIÓN PARA ENCONTRAR EIGENVALORES Y EIGENVECTORES DEL HAMILTONIANO DEL OSCILADOR ARMÓNICO CUÁNTICO UNIDIMENSIONAL

Consideremos de nuevo la ecuación de Schrödinger que junto con la función de onda contiene toda la información sobre la energía para el oscilador armónico cuántico, si ahora pensamos en el espacio de operadores que actuan sobre las funciónes, o vectores de onda, en ese caso el operador Hamiltoniano para el caso unidimensional basados en la ecuación (2.2) debe por tanto tener la forma[2]:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \hat{X}^2 \omega^2 \tag{2.22}$$

siendo $\hat{P} = \hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}$. Si ahora escribimos el Hamiltoniano en términos de operadores adimensionales

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{p}^2 + \hat{q}^2) \tag{2.23}$$

siendo $\hat{p} = \hat{P}/\sqrt{m\hbar\omega}$ y $\hat{q} = \hat{X}\sqrt{m\omega/\hbar}$. Introducimos ahora los operadores de aniquilación y creación

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{q} + \hat{i}p) \tag{2.24}$$

$$\hat{a}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{q} - \hat{i}p) \tag{2.25}$$

siendo estos operadores no Hermíticos, además notemos que

$$\hat{a}^{\dagger}\hat{a} = \frac{1}{2}(\hat{q} - i\hat{p})(\hat{q} + \hat{i}p) = \frac{1}{2}(\hat{q}^2 + i\hat{p}^2) + \frac{i}{2}[\hat{q}, \hat{p}] \tag{2.26}$$

y a partir del hecho de que $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$, podemos verificar que

$$[\hat{q}, \hat{p}] = \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{X}, \frac{1}{m\omega}\hbar\hat{P}\right] = \frac{1}{\hbar}[\hat{X}, \hat{P}] = i$$

De lo anterior

$$(\hat{q}^2 + \hat{p}^2) = \hat{a}^{\dagger}\hat{a} + \frac{1}{2}. \tag{2.28}$$

Así, de las ecuaciónes (2.23) y (2.28) obtenemos

$$\hat{H} = \hbar\omega\Big(\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + \frac{1}{2}\Big) = \hbar\omega\Big(\hat{N} + \frac{1}{2}\Big) \tag{2.29}$$

siendo

$$\hat{N} = \hat{a}^{\dagger}\hat{a} \tag{2.30}$$

donde $\hat{N}$ es conocido como el *operador de número* el cual es hermitiano. Ahora podemos usar la ecuacion (2.27) para deducir:

$$[\hat{a}^{\dagger}, \hat{a}] = -i[\hat{q}, \hat{p}] = 1 \tag{2.31}$$

2.0.3. EIGENVALORES DE LA ENERGÍA

Notemos ahora, que $\hat{H}$ dada por la ecuación (2.31) conmuta con $\hat{N}$, por lo que $\hat{H}$ y $\hat{N}$ tienen un conjunto de eigenestados mutuos, si los denotamos por $|n\rangle$ entonces se ha de cumplir

$$\hat{N}\,|n\rangle = n\,|n\rangle \tag{2.32}$$

y

$$\hat{H}\,|n\rangle = E_n\,|n\rangle \tag{2.33}$$

los vectores $|n\rangle$ son entonces los eigenestados de energía. Combinando ahora las ecuaciones (2.29) y (2.33) tenemos

$$E_n = \Big(n + \frac{1}{2}\Big)\hbar\omega \tag{2.34}$$

mostraremos en breve que n solo puede tener valores enteros positivos. Ahora, de las ecuaciones (2.29) y (2.31) podemos deducir las siguientes relaciones de conmutación

$$[\hat{a}, \hat{H}] = \hbar\omega\hat{a} \tag{2.35}$$

$$[\hat{a}^\dagger, \hat{H}] = -\hbar\omega\hat{a}^\dagger \tag{2.36}$$

de estas relaciones de conmutación, junto con la ecuación (2.33) se puede deducir

$$\hat{H}(\hat{a}\,|n\rangle) = (\hat{a}\hat{H} - \hbar\omega\hat{a})\,|n\rangle = (E_n - \hbar\omega)(\hat{a}\,|n\rangle) \tag{2.37}$$

$$\hat{H}(\hat{a}^\dagger\,|n\rangle) = (\hat{a}^\dagger\hat{H} - \hbar\omega\hat{a})\,|n\rangle = (E_n - \hbar\omega)(\hat{a}^\dagger\,|n\rangle). \tag{2.38}$$

Así, $\hat{a}\,|n\rangle$ y $\hat{a}^\dagger\,|n\rangle$ son eigenestados de $\hat{H}$ con eigenvalores $(E_n - \hbar\omega)$ y $(E_n - \hbar\omega)$ respectivamente. Entonces la acción de $\hat{a}$ y $\hat{a}^\dagger$ es generar nuevos estados más bajos y altos por una cantidad $\hbar\omega$. Es por eso que también son conocidos como operadores de bajada y subida, o de aniquilación y creación.

Ahora, de la ecuación (2.31) y del hecho de que $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$, podemos hacer ver que

$$[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a} \tag{2.39}$$

$$[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \tag{2.40}$$

de estas ecuaciones es inmediato ver que $\hat{N}\hat{a} = \hat{a}(\hat{N}-1)$ y $\hat{N}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger(\hat{N}+1)$, si ahora sustituimoes en el vector de estado en la ecuación (2.32)obtenemos.

$$\hat{N}(\hat{a}\,|n\rangle) = \hat{a}(\hat{N}-1)\,|n\rangle = (n-1)(\hat{a}\,|n\rangle) \tag{2.41}$$
$$\hat{N}(\hat{a}^\dagger\,|n\rangle) = \hat{a}^\dagger(\hat{N}+1)\,|n\rangle) = (n+1)(\hat{a}^\dagger\,|n\rangle) \tag{2.42}$$

estas relaciones nos muestran que $|n\rangle$ y $\hat{a}^\dagger\,|n\rangle$ son eigenestados de $\hat{N}$ con eigen valores $\hat{N}-1$ y $\hat{N}+1$, respectivamente. Así, si llamamos a la acción de $\hat{a}$ sobre $|n\rangle$ como $|n-1\rangle$, y a la acción de $\hat{a}^\dagger$ sobre $|n\rangle$ como $|n-1\rangle$. De este hecho y de la ecuación (2.39) podemos escribir

$$\hat{a}\,|n\rangle = C_n\,|n-1\rangle \tag{2.43}$$

donde C_n es la constante de normalización, para hallar su valor consederamos

$$(\langle n|\,\hat{a}^\dagger)\hat{a}\,|n\rangle = |C_n|^2\,\langle n-1|\,|n-1\rangle = |C_n|^2$$

por otro lado recordando al *operador de número*

$$(\langle n|\,\hat{a}^\dagger)\hat{a}\,|n\rangle = \langle n|\,\hat{a}^\dagger\hat{a}\,|n\rangle = n\,\langle n|\,|n\rangle$$

por lo tanto

$$|C_n|^2 = n \tag{2.44}$$

de donde claramente n no puede ser negativo, si sustituimos (2.44) en (2.43) tenemos que

$$\hat{a}\,|n\rangle = n\,|n-1\rangle\,. \tag{2.45}$$

Esta ecuación muestra que la aplicación consecutiva del operador $\hat{a}$ sobre $|n\rangle$ genera una secuencia de eigenvectores:

$$|n-1\rangle$$
$$|n-2\rangle$$
$$|n-3\rangle$$
$$...$$

observando que $|n\rangle >= 0$ y $\hat{a}\,|0\rangle = 0$, así esta secuencia debe terminar en $n = 0$.

De la misma forma que en la aplicación de $\hat{a}$ se observa que

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \tag{2.46}$$

significa que la aplicación sucesiva de $\hat{a}^\dagger$ sobre $|n\rangle$ genera una sucesión infinita de eigenvectores:

$$|n+1\rangle$$
$$|n+2\rangle$$
$$|n+3\rangle$$
$$...$$

Y dado que $|n\rangle$ es un entero positivo, el espectro de energía del oscilador armónico es por lo tanto discreto.

Ahora, la forma exacta de los eigenestados es facil de deducir, de (2.46) podemos escribir los distintos eigenvectores en términos del estado base como y

$$
\begin{aligned}
|1\rangle &= \hat{a}^\dagger |0\rangle \\
|2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a}^\dagger |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2!}}(\hat{a}^\dagger)^2 |0\rangle \\
|3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{a}^\dagger |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3!}}(\hat{a}^\dagger)^2 |0\rangle \\
&... \\
|n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}^\dagger |n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^2 |0\rangle .
\end{aligned}
$$

Podemos concluir que para hallar cualquier eigenestado $|n\rangle$, solo necesitamos aplicar $\hat{a}^\dagger$ sobre $|0\rangle$ n veces. En este punto hay que notar que $\langle n' | n\rangle = \delta_{n',n} \langle n' | n\rangle$, desde que ninguno de los eigenestados de $\hat{H}$ es degenerado. Además $|0\rangle$, $|1\rangle$, $|2\rangle$,...,$|n\rangle$, son eigenestados simultaneos de $\hat{H}$ y $\hat{N}$, además el conjunto $|n\rangle$ es un conjunto linealmente independiente maximal siendo cada uno de sus elementos ortogonal. i.e.

$$\sum_{n=0}^{+\infty} |n\rangle \langle n| = 1.$$

2.0.4. EIGENESTADOS DE LA ENERGÍA EN EL ESPACIO DE POSICIÓN

Sabemos que conociendo la función de onda para el estado base podemos averiguar la función de onda para cualquier otro estado por medio de aplicar iterativamente el operador $\hat{a}^\dagger$, ahora determinemos la función de onda en la representación de posición, recordemos que definimos un operador $\hat{p}$, $\hat{p} = \hat{P}/\sqrt{m\hbar\omega}$, el cual en la representación de posición se expresa como

$$\hat{p} = -\frac{i\hbar}{\sqrt{m\hbar\omega}}\frac{d}{dx} = -ix_0\frac{d}{dx} \tag{2.47}$$

donde $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$ es la constante con unidades de longitud. Se puede hacer ver sin mucha dificultad que $\hat{a}$ y $\hat{a}^\dagger$ se expresan en la representación de momento como

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\frac{\hat{X}}{x_0} + x_0\frac{d}{dx}\Big) = \frac{1}{x_0\sqrt{2}}\Big(\hat{X} + x_0^2\frac{d}{dx}\Big) \tag{2.48}$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\frac{\hat{X}}{x_0} - x_0\frac{d}{dx}\Big) = \frac{1}{x_0\sqrt{2}}\Big(\hat{X} - x_0^2\frac{d}{dx}\Big) \tag{2.49}$$

usando (2.48) podemos escribir

$$\langle x|\,\hat{a}\,|0\rangle = \frac{1}{x_0\sqrt{2}}\,\langle x|\,\hat{X} + x_0^2\frac{d}{dx}\,|0\rangle = \frac{1}{x_0\sqrt{2}}\Big(x\Psi_0(x) + x_0^2\frac{d\Psi_0(x)}{dx}\Big) \tag{2.50}$$

por lo tanto, $\Psi_0(x)\frac{d\Psi_0(x)}{dx} = -\frac{x}{x_0^2}\Psi_0(x)$.

donde $\Psi_0(x) = \langle x|0\rangle$ es la función de estado para el estado base. La solución de esta ecuación diferencial es

$$\Psi_0(x) = Ae^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} \tag{2.51}$$

donde A es la constante que ya sabemos hallar a partir de la condición de normalización, por lo que la funicón de onda para el estado base es

$$\Psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}. \tag{2.52}$$

De nuevo podemos hallar cualquier eigenestado por medio de aplicaciones sucesivas del operador $\hat{a}^\dagger$ sobre el estado base, i.e.

$$\begin{aligned} \langle x|1\rangle = \langle x|\, \hat{a}^\dagger\, |0\rangle &= \frac{1}{x_0\sqrt{2}}\Big(x - x_0^2\frac{d}{dx}\Big)\, \langle x\,|0\rangle \\ &= \frac{\sqrt{2}}{x_0} x\Psi_0(x) \\ &\quad o \\ \Psi_1(x) = \frac{\sqrt{2}}{x_0} x\Psi_0(x) &= \sqrt{\frac{2}{\sqrt{pi}x_0^3}}\, x e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}. \end{aligned}$$

podemos actuar así sucesivamente hasta obtener en n-ésimo estado de energía i.e.

$$\langle x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\, \langle x|(\hat{a}^\dagger)|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\Big(\frac{1}{\sqrt{2}x_0}\Big)^n \Big(x - x_0^2\frac{d}{dx}\Big)^n \Psi_0(x)$$

es decir

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^n n!}}\frac{1}{x_0^{n+1/2}}\Big(x - x_0^2\frac{d}{dx}\Big)^n e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}$$

y sabiendo que los polinomios de Hermite son

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y2}\frac{d^n}{dy^n}e^- y^2$$

podemos escribir

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^n n!}} e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} H_n(x/x_0).$$

Dicha función de onda es par o impar dependiendo de n. Hemos recordado la construcción de los operadores de creación y aniquilación, así como la relación de Heisenberg que cumplen los operadores de momento y de posición $\hat{p}$, $\hat{x}$. ¿Podremos construir para el caso del oscilador armónico cuántico con nuestros operadores $\hat{M}$, $\hat{P}$ un desarrollo algebráico similar que nos lleve a encontrar los eigenvalores y los eigenestados de este Hamiltoniano?.

Capítulo 3

CONSTRUCCIÓN ALTERNATIVA DE OPERADORES DE CONSTRUCCIÓN Y ANIQUILACIÓN

Consideremos nuestros dos operadores lineales Ecs. (1.1) y (1.2) [1].

$$\begin{aligned}\hat{P} &= \Phi_2(x)\hat{D}_x^2 + \Phi_1(x)\hat{D}_x + \Phi_0(x) \\ &\text{y} \\ \hat{M} &= g(x)\hat{D}_x^{-1} + k(x)\end{aligned}$$

Si sustituimos a $\hat{p}$ por $\hat{M}$ y a $\hat{x}$ por $\hat{P}$ en operadores con una forma análoga a los operadores bien conocidos de construcción y aniquilación, tenemos [2]:

$$\begin{aligned}\hat{a} &= \alpha\hat{M} - \alpha i\hat{P} \\ &\text{y} \\ \hat{a}^\dagger &= \beta\hat{M} + \beta i\hat{P}\end{aligned} \tag{3}$$

esta última elección en la sustitución debido a que si tomamos nuestra $\hat{p}$ por $\hat{P}$ y a $\hat{x}$ por $\hat{M}$ aunque pueda parecer contraintuitivo, si hacemos el desarrollo algebráico idéntico no obtenemos las relaciones de conmutación idénticas que requerimos para desarrollar el oscilador armónico cuántico unidimensional.

Antes de proseguir construyamos un operador: $\hat{P}_1$ definiéndolo como:

$$\hat{P}_1 = i\hat{P} \tag{3.1}$$

así construimos dos operadores $\hat{P}_1$ y $\hat{M}$ consistentes con la relación de Heisenberg en la forma que necesitamos, ya que de usar a $\hat{P}$ y $\hat{M}$ en forma directa llegaríamos a una contradicción matemática y a una expresión sin sentido físico.

Así, tenemos:

$$\begin{aligned} \hat{a} &= \alpha(\hat{M} - i\hat{P}_1) \\ &\text{y} \\ \hat{a}^\dagger &= \beta(\hat{M} + i\hat{P}_1) \end{aligned} \tag{3.2}$$

Con la finalidad de hallar la forma de los eigenvectores y eigenvalores del operador Hamiltoniano, realicemos el mismo proceso algebráico que se usa con los operadores de creación y destrucción en los libros convencionales de Mecánica Cuántica.

Realicemos entonces el producto $\hat{a}^\dagger\hat{a}$:

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger\hat{a} &= \left(\beta\hat{M} + \beta i\hat{P}_1\right)\left(\alpha\hat{M} - \alpha i\hat{P}_1\right) \\ &= \beta\alpha\hat{M}^2 - i\beta\alpha\hat{M}\hat{P}_1 + i\beta\alpha\hat{P}_1\hat{M} + \beta\alpha\hat{P}_1^2 \end{aligned} \tag{3.3}$$

pero sabemos que $\hat{P}_1^2 = i^2\hat{P}^2$ por lo que

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger\hat{a} &= \beta\alpha\hat{M}^2 + i\beta\alpha\left[\hat{P}_1, \hat{M}\right] + \beta\alpha\hat{P}_1^2 \\ &= \beta\alpha\hat{M}^2 + \beta\alpha i \cdot i \cdot \hat{1} + \beta\alpha\hat{P}_1^2 \\ &= \beta\alpha\hat{M}^2 + \beta\alpha\hat{P}_1^2 - \beta\alpha \end{aligned}$$

hipótesis: dado que $\hat{P} = \hat{M}$ y $\hat{x} = \hat{P}_1$ entonces $\beta\alpha = \frac{1}{2}$, [2] esto para que los dos primeros sumandos nos aporten el operador Hamiltoniano. Así,

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger\hat{a} &= \beta\alpha\hat{M}^2 + \beta\alpha\hat{P}_1^2 - \beta\alpha \\ &= \frac{1}{2}\left(\hat{M}^2 + \hat{P}_1^2\right) - \beta\alpha = \hat{H} - \beta\alpha \end{aligned}$$

es decir

$$\hat{a}^{\dagger}\hat{a} = \hat{H} - \frac{1}{2} \tag{3.4}$$

sea ahora el producto $\hat{a}\hat{a}^{\dagger}$ i.e.

$$\begin{aligned}
\hat{a}\hat{a}^{\dagger} &= \left(\alpha\hat{M} - \alpha i\hat{P}\right)\left(\beta\hat{M} + \beta i\hat{P}\right) = \alpha\beta\hat{M}^2 + i\alpha\beta\hat{M}\hat{P}_1 - i\alpha\beta\hat{P}_1\hat{M} + \alpha\beta\hat{P}_1^2 \\
&= \alpha\beta\hat{M}^2 + i\alpha\beta\left[\hat{M}\hat{P}_1 - \hat{P}_1\hat{M}\right] = \alpha\beta\hat{M}^2 + \alpha\beta i\cdot i\cdot -\hat{1} \\
&= \alpha\beta\hat{M}^2 + i\alpha\beta\hat{M}\hat{P}_1 + \alpha\beta
\end{aligned}$$

$$\therefore \hat{a}\hat{a}^{\dagger} = \hat{H} + \beta\alpha \tag{3.5}$$

sumemos ahora $\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^{\dagger} = \hat{H} - \beta\alpha + \hat{H} + \beta\alpha$, para obtener.

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\left(\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^{\dagger}\right) \tag{3.6}$$

averiguemos qué nos aporta el conmutador $\left[\hat{a}^{\dagger}, \hat{H}\right]$ [2]. Sea entonces.

$$\begin{aligned}
\left[\hat{a}^{\dagger}, \hat{H}\right] &= \hat{a}^{\dagger}\frac{1}{2}\left(\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^{\dagger}\right) - \frac{1}{2}\left(\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^{\dagger}\right)\hat{a}^{\dagger} \\
&= \frac{1}{2}\left(\hat{a}^{\dagger 2}\hat{a} + \hat{a}^{\dagger}\hat{a}\hat{a}^{\dagger}\right) - \frac{1}{2}\left(\hat{a}^{\dagger}\hat{a}\hat{a}^{\dagger} + \hat{a}\hat{a}^{\dagger 2}\right) \\
&= \frac{1}{2}\left(\hat{a}^{\dagger 2}\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^{\dagger 2}\right)
\end{aligned}$$

para poder proseguir hallemos de acuerdo a nuestras definiciones $\hat{a}^{\dagger 2}\hat{a}$ y $\hat{a}\hat{a}^{\dagger 2}$. Hallemos primero

$$\hat{a}^{\dagger 2} = \left(\beta\hat{M} + \beta i\hat{P}_1\right)\left(\beta\hat{M} + \beta i\hat{P}_1\right) = \beta^2\hat{M}^2 + i\beta^2\hat{M}\hat{P}_1 + i\beta^2\hat{P}_1\hat{M} - \beta^2\hat{P}_1^2$$

luego:

$$\begin{aligned}
\hat{a}^{\dagger 2}\hat{a} &= \left(\beta^2\hat{M}^2 + i\beta^2\hat{M}\hat{P}_1 + i\beta^2\hat{P}_1\hat{M} - \beta^2\hat{P}_1^2\right)\left(\alpha\hat{M} - \alpha i\hat{P}_1\right) \\
&= \beta^2\alpha\hat{M}^3 - i\hat{a}\beta^2\hat{M}^2\hat{P}_1 + i\beta^2\alpha\hat{M}\hat{P}_1\hat{M} + \beta^2\alpha\hat{M}\hat{P}_1^2 \\
&\quad + i\beta^2\alpha\hat{P}_1\hat{M}^2 + \hat{a}\beta^2\hat{P}_1\hat{M}\hat{P}_1 - \beta^2\alpha\hat{P}_1^2\hat{M} + i\beta\alpha\hat{P}_1^3
\end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}
\hat{a}\hat{a}^{\dagger 2} &= \left(\alpha\hat{M} - \alpha i\hat{P}\right)\left(\beta^2\hat{M}^2 + i\beta^2\hat{M}\hat{P}_1 + i\beta^2\hat{P}_1\hat{M} - \beta^2\hat{P}_1^2\right) \\
&= \alpha\beta^2\hat{M}^3 + i\alpha\beta^2\hat{M}^2\hat{P}_1 + i\alpha\beta^2\hat{M}\hat{P}_1\hat{M} - \alpha\beta^2\hat{M}\hat{P}_1^2 \\
&\quad - \beta^2 i\alpha\hat{P}_1\hat{M}^2 + \alpha\beta^2\hat{P}_1\hat{M}\hat{P}_1 + \alpha\beta^2\hat{P}_1^2\hat{M} + i\alpha\beta^2\hat{P}_1^3
\end{aligned}$$

por lo que

$$\begin{aligned}
\left[\hat{a}^{\dagger},\hat{H}\right] &= \frac{1}{2}\left(\hat{a}^{\dagger 2}\hat{a}-\hat{a}\hat{a}^{\dagger 2}\right)\\
&= \frac{1}{2}(\beta^2\alpha\hat{M}^3 - i\hat{a}\beta^2\hat{M}^2\hat{P}_1 + i\beta^2\alpha\hat{M}\hat{P}_1\hat{M} + \beta^2\alpha\hat{M}\hat{P}_1^2\\
&\quad +i\beta^2\alpha\hat{P}_1\hat{M}^2 + \hat{a}\beta^2\hat{P}_1\hat{M}\hat{P}_1 - \beta^2\alpha\hat{P}_1^2\hat{M}\\
&\quad +i\beta\alpha\hat{P}_1^3 - \ \alpha\beta^2\hat{M}^3 + i\alpha\beta^2\hat{M}^2\hat{P}_1 + i\alpha\beta^2\hat{M}\hat{P}_1\hat{M}\\
&\quad -\alpha\beta^2\hat{M}\hat{P}_1^2 - \beta^2 i\alpha\hat{P}_1\hat{M}^2 + \alpha\beta^2\hat{P}_1\hat{M}\hat{P}_1 + \alpha\beta^2\hat{P}_1^2\hat{M} + i\alpha\beta^2\hat{P}_1^3)\\
&= i\alpha\beta^2\left[\hat{P}_1,\hat{M}^2\right] + \alpha\beta^2\left[\hat{M},\hat{P}_1^2\right]
\end{aligned}$$

utilizando la ley distributiva de los conmutadores tenemos

$$\begin{aligned}
\left[\hat{a}^{\dagger},\hat{H}\right] &= i\alpha\beta^2\left(\left[\hat{P}_1,\hat{M}\right]\hat{M} + \hat{M}\left[\hat{P}_1,\hat{M}\right]\right) + \alpha\beta^2\left(\left[\hat{M},\hat{P}_1\right]\hat{P}_1 + \hat{P}_1\left[\hat{M},\hat{P}_1\right]\right)\\
&= i\alpha\beta^2\left(i\hat{1}\cdot\hat{M} + \hat{M}\hat{1}\cdot i\right) + \alpha\beta^2\left(-\hat{1}\cdot i\hat{P}_1 + \hat{P}_1 i\cdot -\hat{1}\right)\\
&= -\beta\hat{M} - \beta i\hat{P}_1
\end{aligned}$$

recordando que definimos a $\hat{a}^{\dagger} = \beta\hat{M} + i\beta\hat{P}_1$ concluimos que

$$\therefore \left[\hat{a}^{\dagger},\hat{H}\right] = -\hat{a}^{\dagger} \tag{3.7}$$

sea ahora $\left[\hat{a}^{\dagger},\hat{H}\right] = \hat{a}^{\dagger}\hat{H} - \hat{H}\hat{a}^{\dagger} = -\hat{a}^{\dagger}$ si despejamos $\hat{H}\hat{a}^{\dagger}$ tenemos que $\hat{H}\hat{a}^{\dagger} = \hat{a}^{\dagger} + \hat{a}^{\dagger}\hat{H}$. Aplicando esto a un Eigenvector:

$$\begin{aligned}
\hat{H}\hat{a}^{\dagger}|E\rangle &= \left(\hat{a}^{\dagger} + \hat{a}^{\dagger}\hat{H}\right)|E\rangle\\
&= \hat{a}^{\dagger}|E\rangle + \hat{a}^{\dagger}\hat{H}|E\rangle = \hat{a}^{\dagger}|E\rangle + \hat{a}^{\dagger}E|E\rangle\\
&= \hat{a}^{\dagger}(E+1)|E\rangle
\end{aligned}$$

observamos que al igual que en el desarrollo usual de la mecánica cuántica $\hat{a}^{\dagger}(E+1)|E\rangle$ es un eigenvector de $\hat{H}$ con un eigenvalor $E+1$. Es decir.

$$\hat{H}|E\rangle = (E+1)|E+1\rangle$$

Ahora, debido a que se debe tener $\hat{H}|E+1\rangle = (E+1)|E+1\rangle$, siguiendo la misma regla se puede mostrar que

$$\begin{aligned}
&\hat{a}^{\dagger}|E\rangle = |E+1\rangle\\
&\hat{a}^{\dagger 2}|E\rangle = |E+2\rangle\\
&\hat{a}^{\dagger 3}|E\rangle = |E+2\rangle
\end{aligned}$$

...Y así sucesivamente. Es decir.

$$\hat{a}^{\dagger n}\left|E\right\rangle = \left|E+n\right\rangle .$$

Podemos ahora preguntarnos por la relación $\left[\hat{a},\hat{H}\right]$ [?]

$$\begin{aligned}\left[\hat{a},\hat{H}\right] &= \hat{a}\hat{H}-\hat{H}\hat{a}\\ &= \hat{a}\frac{1}{2}(\hat{a}^{\dagger}\hat{a}+\hat{a}\hat{a}^{\dagger})-\frac{1}{2}(\hat{a}^{\dagger}\hat{a}+\hat{a}\hat{a}^{\dagger})\hat{a}\\ &= \frac{1}{2}\hat{a}^{2}\hat{a}^{\dagger}-\frac{1}{2}\hat{a}^{\dagger}\hat{a}^{2}\end{aligned}$$

antes de averiguar la forma explicita de $\left[\hat{a},\hat{H}\right]$ hallemos $\hat{a}^2$:

$$\hat{a}^2=\left(\alpha\hat{M}-\alpha i\hat{P}_1\right)\left(\alpha\hat{M}-\alpha i\hat{P}_1\right)=\alpha^2\hat{M}^2-\alpha^2 i\hat{M}\hat{P}_1-\alpha^2 i\hat{P}_1\hat{M}-\alpha^2\hat{P}_1^2$$

luego

$$\begin{aligned}\hat{a}^2\hat{a}^{\dagger} &= \left(\alpha^2\hat{M}^2-\alpha^2 i\hat{M}\hat{P}_1-\alpha^2 i\hat{P}_1\hat{M}-\alpha^2\hat{P}_1^2\right)\left(\beta\hat{M}+\beta i\hat{P}_1\right)\\ \hat{a}^2\hat{a}^{\dagger} &= \beta\alpha^2\hat{M}^3+\alpha^2 i\beta\hat{M}^2\hat{P}_1-\alpha^2 i\beta\hat{M}\hat{P}_1\hat{M}+\alpha^2\beta\hat{M}\hat{P}_1^2-i\alpha^2\beta\hat{P}_1\hat{M}^2\\ &\quad+\alpha^2\beta\hat{P}_1\hat{M}\hat{P}_1-\alpha^2\beta\hat{P}_1^2\hat{M}-i\hat{a}^2\beta\hat{P}_1^3\end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}\hat{a}^{\dagger}\hat{a}^2 &= \left(\beta\hat{M}+\beta i\hat{P}_1\right)\left(\alpha^2\hat{M}^2-\alpha^2 i\hat{M}\hat{P}_1-\alpha^2 i\hat{P}_1\hat{M}-\alpha^2\hat{P}_1^2\right)\\ \hat{a}^{\dagger}\hat{a}^2 &= \beta\alpha^2\hat{M}^3-i\beta\alpha^2\hat{M}^2\hat{P}_1-i\beta\alpha^2\hat{M}\hat{P}_1\hat{M}-\beta\alpha^2\hat{M}\hat{P}_1^2+i\beta\alpha^2\hat{P}_1\hat{M}^2\\ &\quad+\beta\alpha^2\hat{P}_1\hat{M}\hat{P}_1+\alpha^2\beta\hat{P}_1^2\hat{M}-i\beta\alpha^2\hat{P}_1^3\end{aligned}$$

por lo que:

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}(\hat{a}^2\hat{a}^{\dagger}-\hat{a}^{\dagger}\hat{a}^2) &= \frac{1}{2}(\beta\alpha^2\hat{M}^3+\alpha^2 i\beta\hat{M}^2\hat{P}_1-\alpha^2 i\beta\hat{M}\hat{P}_1\hat{M}+\alpha^2\beta\hat{M}\hat{P}_1^2\\ &\quad-i\alpha^2\beta\hat{P}_1\hat{M}^2+\alpha^2\beta\hat{P}_1\hat{M}\hat{P}_1-\alpha^2\beta\hat{P}_1^2\hat{M}-i\hat{a}^2\beta\hat{P}_1^3\\ &\quad-\beta\alpha^2\hat{M}^3+i\beta\alpha^2\hat{M}^2\hat{P}_1+i\beta\alpha^2\hat{M}\hat{P}_1\hat{M}+\beta\alpha^2\hat{M}\hat{P}_1^2\\ &\quad-i\beta\alpha^2\hat{P}_1\hat{M}^2-\beta\alpha^2\hat{P}_1\hat{M}\hat{P}_1-\alpha^2\beta\hat{P}_1^2\hat{M}-\hat{a}^2\beta\hat{P}_1^2\hat{M}\\ &\quad+i\beta\alpha^2\hat{P}_1^3)\\ &= \frac{1}{2}\left(2i\beta\alpha^2(-2i\hat{M})+2\beta\alpha^2(-2i\hat{P}_1)\right)\end{aligned}$$

recordando que $\beta\alpha=\frac{1}{2}$

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}(\hat{a}^2\hat{a}^{\dagger}-\hat{a}^{\dagger}\hat{a}^2) &= \frac{1}{2}\left(i\alpha(-2i\hat{M})+\alpha(-2i\hat{P}_1)\right)\\ &= \frac{1}{2}\left(\alpha 2\hat{M}-2i\alpha\hat{P}_1\right)\\ &= \alpha\hat{M}-i\alpha\hat{P}_1\end{aligned}$$

de lo anterior

$$\left[\hat{a},\hat{H}\right]=\frac{1}{2}(\hat{a}^2\hat{a}^\dagger-\hat{a}^\dagger\hat{a}^2)=\alpha\hat{M}-i\alpha\hat{P}_1$$

y recordando la definicón inicial $\hat{a}=\alpha(\hat{M}-i\hat{P}_1)$ por lo que realmente

$$\left[\hat{a},\hat{H}\right]=\hat{a} \tag{3.8}$$

En completa consistencia con el desarrollo usual de los operadores de creación y destrucción de la literatura convencional.

Sea ahora

$\left[\hat{a},\hat{H}\right]=\hat{a}\hat{H}-\hat{H}\hat{a}=\hat{a}$ despejando $\hat{H}\hat{a}$

$\hat{H}\hat{a}=-\hat{a}+\hat{a}\hat{H}$

aplicando $\hat{H}\hat{a}$ al eigenestado $|E\rangle$

$$\begin{aligned}\hat{H}\hat{a}\,|E\rangle &= (-\hat{a}+\hat{a}\hat{H})\,|E\rangle=-\hat{a}\,|E\rangle+\hat{a}\hat{H}\,|E\rangle\\ &=\left(-\hat{a}+\hat{a}\hat{H}\right)|E\rangle=\hat{a}\,(-1+E)\,|E\rangle\\ &=\hat{a}\,(E-1)\,|E\rangle\end{aligned}$$

así llegamos a la conclusión que $\hat{a}\,|E\rangle$ nos aporta el estado $|E-1\rangle$, siguiendo la misma regla se puede mostrar que

$\hat{a}\,|E\rangle=|E-1\rangle$
$\hat{a}^2\,|E\rangle=|E-2\rangle$
$\hat{a}^3\,|E\rangle=|E-3\rangle$

...Y así sucesivamente.
Es decir

$$\hat{a}^n\,|E\rangle=|E-n\rangle \tag{3.9}$$

Antes de continuar demosle identidad explícita a α y β. hemos hallado que la relación $\left[\hat{a}^\dagger,\hat{H}\right]$ cumple ser.

$\left[\hat{a}^\dagger,\hat{H}\right]=-\hat{a}^\dagger$

$$=\beta(-\hat{M}-i\hat{P}_1)=-\beta(\hat{M}+i\hat{P}_1)$$

y la relación $\left[\hat{a}^\dagger, \hat{H}\right]$ es igual a.

$$\begin{aligned}\left[\hat{a}^\dagger, \hat{H}\right] &= \hat{a} \\ &= \alpha\hat{M} - i\alpha\hat{P}_1 = \alpha\left(\hat{M} - i\hat{P}_1\right)\end{aligned}$$

Con la única condición ya mencionada de que $\beta\alpha = \frac{1}{2}$ [2]. Si elegimos a $\beta = \frac{1}{i\sqrt{2}}$ y $\alpha = \frac{i}{\sqrt{2}}$ observamos que $\beta\alpha = \frac{1}{i\sqrt{2}}\frac{i}{\sqrt{2}} = \frac{1}{2}$.

Así, hemos construido operadores $\hat{a}$ y $\hat{a}^\dagger$ definiendolos como.

$$\hat{a} = \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{M} - i\hat{P}_1) \quad y \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{i\sqrt{2}}(\hat{M} + i\hat{P}_1) \tag{3.10}$$

Que se aplican de manera idéntica a los construidos en base a los operadores de momento $\hat{P}$ y de posición $\hat{x}$ ya conocidos.

Lo que resta hacer ver con nuestros nuevos operadores

$\hat{a} = \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{M} - i\hat{P}_1)$, $\hat{a}^\dagger = \frac{1}{i\sqrt{2}}(\hat{M} + i\hat{P}_1)$

es observar qué es lo que ocurre con la aplicación sucesiva del operador $\hat{a}$ sobre el eigenvector $|E\rangle$. La energía de la partícula debe ser positiva, debe existir un límite a la apliación sucesiva del operador $\hat{a}$. este límite se halla de calcular la norma del eigenvector $\hat{a}\,|E\rangle$, observamos también que su vector dual al construirlo no puede ser otra cosa que: $\langle E|\,\hat{a}^\dagger$. por lo tanto la norma de $\hat{a}\,|E\rangle$ es el bracket $\left(\langle E|\,\hat{a}^\dagger\right)(\hat{a}\,|E\rangle) = \langle E|\,\hat{a}^\dagger\hat{a}\,|E\rangle$ [3].

Pero sabemos que $\hat{a}^\dagger\hat{a} = \hat{H} - \frac{1}{2}$ por lo que

$$\langle E|\,\hat{a}^\dagger\hat{a}\,|E\rangle = E - \frac{1}{2} \geq 0$$

ó

$$E \geq \frac{1}{2}$$

lo que implica que la energía del oscilador armónico para el Estado Base es

$$E_0 = \frac{1}{2} \tag{3.11}$$

deducimos que si el estado de mínima energía es $|E_0\rangle$, entonces
$\hat{a}\,|E_0\rangle = 0$ ya que no puede existir un estado de energía menor a E_0. De lo anterior observamos

que cualquier estado se obtiene de la aplicación sucesiva del operador $\hat{a}^\dagger$. Es decir:

$\hat{a}^\dagger \left|E_0\right\rangle = \left|E_1\right\rangle = \left|E_0+1\right\rangle$
$\hat{a}^\dagger \left|E_1\right\rangle = \hat{a}^{\dagger 2} \left|E_0\right\rangle = \left|E_2\right\rangle = \left|E_0+2\right\rangle$
$\hat{a}^\dagger \left|E_2\right\rangle = \hat{a}^{\dagger 3} \left|E_0\right\rangle = \left|E_3\right\rangle = \left|E_0+3\right\rangle$

entonces:

$\hat{H} \left|E_0\right\rangle = \frac{1}{2} \left|E_0\right\rangle$

de donde

$\hat{H}\hat{a}^\dagger \left|E_0\right\rangle = \hat{H} \left|E_0+1\right\rangle = (E_0+1) \left|E_0+1\right\rangle$
$= \left(1+\frac{1}{2}\right) \left|E_0+1\right\rangle = \left(1+\frac{1}{2}\right) \left|E_1\right\rangle$

y así sucesivamente.

$\hat{H}\hat{a}^{\dagger 2} \left|E_0\right\rangle = \left(2+\frac{1}{2}\right) \left|E_0+2\right\rangle = \left(2+\frac{1}{2}\right) \left|E_2\right\rangle$
$\hat{H}\hat{a}^{\dagger 2} \left|E_0\right\rangle = \left(2+\frac{1}{2}\right) \left|E_0+3\right\rangle = \left(3+\frac{1}{2}\right) \left|E_2\right\rangle$

De tal forma que

$$\hat{H}\hat{a}^{\dagger n} \left|E_0\right\rangle = \left(n+\frac{1}{2}\right) \left|E_0+n\right\rangle = \left(n+\frac{1}{2}\right) \left|E_0\right\rangle \tag{3.12}$$

De donde el espectro de energía está formado por:

$E = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, ...$

En general

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right) \tag{3.13}$$

donde $n = 0, 1, 2, ...$

En este punto hemos alcanzado plena congruencia implícita para nuestros operadores de construcción y aniquilación, ecuación (3.10).

Algo que requerimos en este momento para el oscilador armonico cuántico unidimensional es observar en forma explícita qué son los términos de nuestros operadores [1]

$\hat{P} = \Phi_2(x)\hat{D}_x^2 + \Phi_1(x)\hat{D}_x + \Phi_0(x)\ \ \hat{M} = g(x)\hat{D}_x^{-1} + k(x)$

ya hemos demostrado que

$\hat{a} = \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{M} - i\hat{P}_1)$

$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{i\sqrt{2}}(\hat{M} + i\hat{P}_1)$

cumplen bien con el desarrollo algebraico que se usa para resolver el hamiltoniano del oscilador armonico cuántico unidimensional. Intentaremos usar ese desarrollo para hacer evidentes qué son los terminos de nuestros operadores $\hat{P} = \Phi_2(x)\hat{D}_x^2 + \Phi_1(x)\hat{D}_x + \Phi_0(x)$ y $\hat{M} = g(x)\hat{D}_x^{-1} + k(x)$, es decir nuestras funciones $\Phi_2(x), \Phi_1(x), \Phi_0(x), g(x), k(x)$

Así como la forma explícita de nuestros operadores

$\hat{D}_x = \frac{d}{dx}$, y $\hat{D}_x^{-1}u(x) = \int_{x_0}^{x} u(x)dx$.

Capítulo 4

APLICACIÓN AL OSCILADOR ARMÓNICO CUÁNTICO UNIDIMENSIONAL

Sabemos que para el caso no relativista la ecuación de Schrödinger es

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi + \frac{1}{2}\varpi^2\hat{x}^2\Psi = E\Psi$$

además ocurre que $\frac{1}{2}\varpi^2\hat{x}^2 >> E$ de acuerdo al análisis de *WKB*. [3] Por lo que es válido escribir $\hat{H} = \hat{p}^2\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}\varpi^2\hat{x}^2$ el cual en términos de $\hat{P}_1$ y $\hat{M}$ puede escribirse como [5, 7, 9]:

$$\begin{aligned} \hat{H}e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x) &= \frac{1}{2}\{\left(g(x)\hat{D}_x^{-1} + k(x)\right)^2 \\ &\quad +i^2\left(\Phi_2(x)\hat{D}_x^2 + \Phi_1(x)\hat{D}_x + \Phi_0(x)\right)^2\}e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x) \end{aligned} \tag{4}$$

para intentar hacer coincidir esta ecuación con la del oscilador armónico cuántico unidimensional de la literatura usual, elegimos
$k(x) = \Phi_1(x) = \Phi_0(x) = 0$, por lo que podemos escribir en nuestro caso:

$$\hat{H}e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x) = \frac{1}{2}\left\{\left(g(x)\hat{D}_x^{-1}\right)^2 + i^2\left(\Phi_2(x)\hat{D}_x^2\right)^2\right\}e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x) \tag{4.1}$$

a partir de esta ecuación y recordando la condición $2\Phi_2(x)g'(x) + \Phi_2'(x)g(x) = 1$, si elegimos $g(x) = x$, entonces $g'(x) = 1$ y a $\Phi_2 = \frac{1}{2}$
entonces $\Phi_2' = 0$. Obtenemos así.

$$\hat{H}e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x)=\frac{1}{2}\left\{\left(x\hat{D}_x^{-1}\right)^2+i^2\left(\frac{1}{2}(x)\hat{D}_x^2\right)^2\right\}e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x) \tag{4.2}$$

Hallemos el primer término del lado derecho de nuestra ecuación del oscilador armónico cuántico unidimensional.

$\frac{1}{2}\left(x\hat{D}_x^{-1}\right)^2 e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x)=\frac{1}{2}x\int_{-\infty}^{\infty}x\int_{-\infty}^{\infty}e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x)dx^2$

encontramos según las tablas que [10]

$\int_{-\infty}^{\infty}e^{ixy}e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x)dx=(2\pi)^{\frac{1}{2}}e^{\frac{-y^2}{2}}H_n(y)i^n$

esta es una solución por adición de parámetro, que para nuestro caso puede ser considerada como

$\int_{-\infty}^{\infty}e^{izx}e^{\frac{-z^2}{2}}H_n(z)dz=(2\pi)^{\frac{1}{2}}e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x)i^n.$

así el primer término del lado derecho se puede escribir como

$\frac{1}{2}\left(x\hat{D}_x^{-1}\right)^2 e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x)=\frac{1}{2}x\int_{-\infty}^{\infty}x\sqrt{2\pi}e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x)i^n dx.$

el problema ahora se vuelve en hallar

$\int_{-\infty}^{\infty}x\sqrt{2\pi}e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x)i^n dx.$

de las tablas también contamos con las siguientes afirmaciones:

$$\begin{aligned}\int_0^{\infty}e^{-2\alpha x^2}x^{\nu}H_{2n}(x)dx &= (-1)^n\,2^{2n-\frac{3}{2}-\frac{1}{2}\nu}\cdot\frac{\Gamma\left(\frac{\nu+1}{2}\right)\Gamma\left(n+\frac{1}{2}\right)}{\sqrt{\pi}\alpha^{\frac{1}{2}}(\nu+1)}\\ &\quad\cdot F\left(-n,\frac{\nu+1}{2};\frac{1}{2};\frac{1}{2\alpha}\right)\\ (\operatorname{Re}\alpha &> 0,\operatorname{Re}\nu>1).\end{aligned} \tag{4.3}$$

$$\begin{aligned}\int_0^{\infty}e^{-2\alpha x^2}x^{\nu}H_{2n+1}(x)dx &= (-1)^n\,2^{2n-\frac{1}{2}\nu}\cdot\frac{\Gamma\left(\frac{\nu+1}{2}\right)\Gamma\left(n+\frac{1}{2}\right)}{\sqrt{\pi}\alpha^{\frac{1}{2}}(\nu+1)}\\ &\quad\cdot F\left(-n,\frac{\nu+1}{2};\frac{3}{2};\frac{1}{2\alpha}\right)\\ (\operatorname{Re}\alpha &> 0,\operatorname{Re}\nu>-2).\end{aligned} \tag{4.4}$$

siendo F una función hipergeométrica, aportándonos la teoría de funciones especiales la siguiente representación integral:

$$F(\alpha,\beta;\gamma;z) = \frac{1}{B(\beta,\gamma-\beta)}\int_0^1 t^{\beta-1}(1-t)^{\gamma-\beta-1}(1-tz)^{-\alpha}\,dt$$

$$(\operatorname{Re}\gamma > \operatorname{Re}\beta > 0).$$

así, la integral de las funciones de Hermite es

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} x\sqrt{2\pi}e^{\frac{-x^2}{2}}H_{2n}(x)i^n dx &= 2\int_0^{\infty}\sqrt{2\pi}e^{-2\alpha x^2}x^{\gamma}H_{2n}(x)i^n dx\\ &\text{ó}\\ \int_{-\infty}^{\infty} xe^{\frac{-x^2}{2}}H_{2n}(x)dx &= 2\int_0^{\infty}e^{-2\alpha x^2}x^{\gamma}H_{2n}(x)dx\end{aligned}$$

y utilizando la ecuación (4.3). Donde $\alpha = \frac{1}{4}$ y $\nu = 1$. Observando que $(\operatorname{Re}\alpha > 0, \operatorname{Re}\nu > -1)$. Un dominio prohibitivo de nuestras funciones gama [11], es decir, no integrables. Más aún

$$\begin{aligned}2\int_0^{\infty}e^{-2\alpha x^2}x^{\gamma}H_{2n}(x)dx &= 2\int_0^{\infty}e^{\frac{-x^2}{2}}xH_{2n}(x)dx \\ &= 2(-1)^n 2^{2n-\frac{3}{2}-\frac{1}{2}(1)}\cdot\frac{\Gamma\left(\frac{1+1}{2}\right)\Gamma\left(n+\frac{1}{2}\right)}{\sqrt{\pi}(\frac{1}{4})^{\frac{1}{2}}(1+1)}\\ &\quad\cdot F\left(-n,\frac{1+1}{2};\frac{1}{2};\frac{1}{2\left(\frac{1}{4}\right)}\right)\\ &= 2(-1)^n 2^{2n-\frac{4}{2}}\cdot\frac{\Gamma\left(\frac{1+1}{2}\right)\Gamma\left(n+\frac{1}{2}\right)4}{\sqrt{\pi}}\\ &\quad\cdot F\left(-n,1;\frac{1}{2};2\right)\end{aligned}\tag{4.5}$$

para poder evaluar esto, debemos hallar la integral de asociada a $F\left(-n,1;\frac{1}{2};2\right)$ que ya hemos mencionado, entonces ocurre que

$$F(\alpha,\beta;\gamma;z) = \frac{1}{B(\beta,\gamma-\beta)}\int_0^1 t^{\beta-1}(1-t)^{\gamma-\beta-1}(1-tz)^{-\alpha}\,dt$$

Es válida para: $\operatorname{Re}\gamma > \operatorname{Re}\beta > 0.$

En nuestro caso la función es $F(-n,1;\frac{1}{2};2)$. Claramente vemos que intentamos integrar para una elección prohibitiva del dominio ya que $\operatorname{Re}\gamma < \operatorname{Re}\beta$, y evidentemente al intentar integrar $F\left(-n,1;\frac{1}{2};2\right)$, en el cociente donde aparece nuestra función beta, ocurre que $B\left(1,-\frac{1}{2}\right)$ con este argumento no puede hallarse ya que por definición $\mathrm{Re}\,\gamma > \mathrm{Re}\,\beta > 0$, y nosotros tenemos el caso $\mathrm{Re}\,\beta < 0$. haciendo imposible computar nuestra ecuación (4.5).

Realicemos otro intento de hallar la forma explícita de las funciones $g(x)$, $\Phi_2(x)$. Así, nuevamente para intentar hacer coincidir esta ecuación con la del oscilador armónico cuántico unidimensional de la literatura usual, elegimos:

$k(x) = \Phi_1(x) = \Phi_0(x) = 0$, por lo que podemos escribir en nuestro caso:

$$\hat{H}e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x) = \frac{1}{2}\left\{\left(g(x)\hat{D}_x^{-1}\right)^2 + i^2\left(\Phi_2(x)\hat{D}_x^2\right)^2\right\}e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x) \tag{4.6}$$

a partir de esta ecuación y recordando la condición $2\Phi_2(x)g'(x) + \Phi_2'(x)g(x) = 1$, si elegimos $g(x) = 1$, entonces $g'(x) = 0$ y a $\Phi_2 = x$

entonces $\Phi_2' = 1$

obtenemos así:

$$\begin{aligned} \hat{H}e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x) &= \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x)dx \\ &\quad -\frac{1}{2}x\left(2\hat{D}_x^3e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x) + x\hat{D}_x^4e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x)\right) \end{aligned} \tag{4.7}$$

avocandonos a resolver el término integral: $\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x)dx$.

encontramos según las tablas que [10]

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ixy}e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x)dx = (2\pi)^{\frac{1}{2}}\,e^{\frac{-y^2}{2}}H_n(y)i^n$$

esta es una solución por adición de parámetro, que para nuestro caso puede ser considerada como:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ixz}e^{\frac{-z^2}{2}}H_n(z)dz = (2\pi)^{\frac{1}{2}}\,e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(y)i^n$$

por lo que aplicando esta forma dos veces obtenemos para el primer sumando de nuestra ecuación (4.7) (con su respectivo cambio de variable).

$$\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(y)dy = \pi e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x)i^{2n}$$

Por otro lado, aplicando el operador diferencial

$$\frac{1}{2}i^2\left(\Phi_2(x)\hat{D}_x^2\right)^2 e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x) = -\frac{1}{2}x\left(2\hat{D}_x^3e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x) + x\hat{D}_x^4e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x)\right)$$

O alternativamente

$$-\frac{1}{2}x\left(2\hat{D}_x^3 e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x)+x\hat{D}_x^4 e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x)\right)=-\frac{1}{2}x\left(2\hat{D}_x^3+x\hat{D}_x^4\right)e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x) \tag{4.8}$$

Observamos que obtenemos dos términos del lado derecho de la ecuación (4.8), apliquemos primero el operador diferencial $-x\hat{D}_x^3 e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x)$ para desarrollar el primer término del lado derecho, tenemos entonces [6, 8, 9]

$$\begin{aligned} -x\hat{D}_x^3 e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x) &= -x([H_n'''(x)-2xH_n'(x)-2H_n'(x) \\ &\quad +H_n'(x)(x^2-1)+2xH_n(x)] \\ &\quad -\left[H_n''(x)-2xH_n(x)+H_n(x)(x^2-1)x\right]) \end{aligned} \tag{4.9}$$

aplicando ahora el operador diferencial $-\frac{1}{2}x^2\hat{D}_x^4 e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x)$ al segundo término del lado derecho obtenemos.

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2}\left(x^2\hat{D}_x^4 e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x)\right) &= -\frac{1}{2}x^2(\left[H_n^{(4)}(x)+H_n''(x)(x^2-5)-2xH_n'''(x)+2xH_n'(x)\right] \\ &\quad -2x\left[H_n'''(x)-2xH_n''(x)+H'(x^2-3)+2xH_n(x)\right] \\ &\quad -\left[H_n''(x)-2xH_n'(x)+H_n(x)(x^2-1)(1-2x)\right])e^{\frac{-x^2}{2}} \end{aligned}$$

factorizando las funciones de Hermite de acuerdo a su grado de derivación y reagrupando términos, tenemos

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2}\left(x^2\hat{D}_x^4 e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x)\right) &= -\frac{1}{2}x^2(\left[H_n^{(4)}(x)-4xH_n'''(x)\right] \\ &\quad +H_n''(x)\left[(x^2-5)+4x^2-(1-2x)\right] \\ &\quad +H_n'(x)\left[2x-2x(x^2-3)+2x\,(1-2x)\right] \\ &\quad -H_n(x)\left[4x^2-(x^2-1)\,(1-2x)\right])e^{\frac{-x^2}{2}} \\ &= -\frac{1}{2}x^2(\left[H_n^{(4)}(x)-4xH_n'''(x)\right] \\ &\quad +H_n''(x)\left[(x^2-5)+2x-6\right] \\ &\quad +H_n'(x)\left[2x-2x^3+6x+2x-4x^2\right] \\ &\quad -H_n(x)\left[4x^2-x^2+2x^3+1-2x\right])e^{\frac{-x^2}{2}} \end{aligned}$$

i.e.

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2}\left(x^2\hat{D}_x^4 e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x)\right) &= -\frac{1}{2}x^2(\left[H_n^{(4)}(x)-4xH_n'''(x)\right]+H_n''(x)\left[5x^2+2x-6\right] \\ &\quad +H_n'(x)\left[-2x^3-4x^2+10x\right] \\ &\quad -H_n(x)\left[4x^2+3x^2-2x+1\right])e^{\frac{-x^2}{2}} \end{aligned}$$

Para eliminar las funciones de Hermite de orden de derivación cuártico y cúbico utilizaremos las relaciones de recurrencia satisfechas por los polinomios de Hermite y algunas otras que deduciremos es decir [8, 9]

1. $H_n''(x) - xH_n'(x) + nH_n(x) = 0$
2. $H_n'(x) = nH_{n-1}(x)$
3. $H_{n+1}(x) = xH_n(x) + nH_{n-1}(x)$

A partir de estas podemos deducir:

4. $H_n''(x) - xnH_{n-1}(x) + nH_n(x) = 0$
5. $H_{n+1}(x) = xH_n - H_n'(x)$

ahora bien, de la primera relación de recuerrencia podemos derivarla para obtener:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx}\left(H_n''(x) - xH_n'(x) + nH_n(x)\right) &= H_n'''(x) - H_n'(x) - xH_n''(x) + nH_n'(x) \\ &= 0 \end{aligned} \tag{4.10}$$

$$y$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2}\left(H_n''(x) - xH_n'(x) + nH_n(x)\right) &= H_n^{(4)}(x) - xH_n'''(x) - (2-n)H_n''(x) \\ &= 0 \end{aligned} \tag{4.11}$$

sustituimos $H_n^{(4)}(x) = xH_n'''(x) + (2-n)H_n''(x)$, y $H_n'''(x) = xH_n''(x) - H_n'(x)(n-1)$.

en nuestro desarrollo para $-\frac{1}{2}\left(x^2\hat{D}_x^4 e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x)\right)$, obteniendo.

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2}\left(x^2\hat{D}_x^4 e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x)\right) &= -\frac{1}{2}x^2([xH_n'''(x) + (2-n)H_n''(x) - 4xH_n'''(x)] \\ &\quad +H_n''(x)\left[5x^2 + 2x - 6\right] \\ &\quad -H_n'(x)\left[2x^3 + 4x^2 - 10x\right]) \\ &\quad -H_n(x)\left[2x^3 + 3x^2 - 2x + 1\right])e^{\frac{-x^2}{2}} \\ &= -\frac{1}{2}x^2(H_n''(x)\left[2x^2 + 2x - 4 - n\right] \\ &\quad -H_n'(x)\left[2x^3 + 4x^2 - 7x - 3xn\right] \\ &\quad -H_n(x)\left[2x^3 + 3x^2 - 2x + 1\right])e^{\frac{-x^2}{2}} \end{aligned}$$

Así, el término de la energía que parte de la aplicación de $\hat{P}_1$ será:

$$
\begin{aligned}
-\frac{1}{2}x\left(2\hat{D}_x^3+x\hat{D}_x^4\right)e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x) &= -x([H_n'''(x)-2H'(x)-2xH_n'(x)\\
&\quad +H_n'(x)(x^2-1)+2xH_n(x)]\\
&\quad -\left[H_n''(x)-2xH_n(x)+H_n(x)x(x^2-1)\right])e^{\frac{-x^2}{2}}\\
&\quad -\frac{1}{2}x^2(H_n''(x)\left[2x^2+2x-4-n\right]\\
&\quad -H'\left[2x^3+4x^2-7x-3xn\right]\\
&\quad -H_n(x)\left[2x^3+3x^2-2x+1\right])e^{\frac{-x^2}{2}}\\
&= \{-x([(xH_n''(x)-H_n'(x)(n-1)-2H'\\
&\quad -2xH_n'(x)+H_n'(x)(x^2-1)+2xH_n(x)]\\
&\quad -\left[H_n''(x)-2xH_n(x)+H_n(x)x(x^2-1)\right])\\
&\quad -\frac{1}{2}x^2(H_n''(x)\left[2x^2+2x-4-n\right]\\
&\quad -H'\left[2x^3+4x^2-7x-3xn\right]\\
&\quad -H_n(x)\left[2x^3+3x^2-2x+1\right])\}e^{\frac{-x^2}{2}}
\end{aligned}
$$

de nuevo sumando términos semejantes.

$$
\begin{aligned}
-\frac{1}{2}x\left(2\hat{D}_x^3+x\hat{D}_x^4\right)e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x) &= \{-x([xH_n''(x)-nH_n'(x)+H_n'(x)-2H'(x)\\
&\quad -2xH_n'(x)+H_n'(x)x^2-H_n'(x)+2xH_n(x)]\\
&\quad -\left[H_n''(x)-2xH_n(x)+H_n(x)x(x^2-1)\right])\\
&\quad -\frac{1}{2}x^2(H_n''(x)\left[2x^2+2x-4-n\right]\\
&\quad -H'\left[2x^3+4x^2-7x-3xn\right]\\
&\quad -H_n(x)\left[2x^3+3x^2-2x+1\right])\}e^{\frac{-x^2}{2}}\\
&= \{-x([xH_n''(x)-H_n''(x)]-H'(x)[n+2-(x-2)x]\\
&\quad +4xH_n(x)-H_n(x)x(x^2-1))\\
&\quad -x^2(H_n''(x)\left[x^2+x-2-\frac{n}{2}\right]+x^2H'(x)[x^3+2x^2]\\
&\quad +x^2H'\frac{1}{2}[-7x-3xn]\\
&\quad +\frac{1}{2}H_n(x)\left[2x^3+3x^2-2x+1\right])\}e^{\frac{-x^2}{2}}
\end{aligned}
$$

multiplicando por $-x$ y $-x^2$ fuera de los paréntesis:

$$\begin{aligned}
-\frac{1}{2}x\left(2\hat{D}_x^3 + x\hat{D}_x^4\right)e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x) &= \{-x^2H_n''(x) - xH_n''(x) + xH'(x)[n+2-(x-2)x] \\
&\quad -4x^2H_n(x) + H_n(x)x^2(x^2-1)) \\
&\quad -x^2H_n''(x)\left[x^2+x-2-\frac{n}{2}\right] \\
&\quad -x^4H'(x)\left[x^3+2x^2] - x^4H'\frac{1}{2}[-7x-3xn\right] \\
&\quad -\frac{1}{2}x^2H_n(x)\left[2x^3+3x^2-2x+1\right])\}e^{\frac{-x^2}{2}} \\
&= \{x^2H_n''(x) - x^4H''(x) - x^3H''(x) \\
&\quad -xH_n''(x) + \frac{x^2n}{2}H_n''(x) - x^3H_n'(x) \\
&\quad +2x^2H_n'(x) + 2xH_n'(x) - x^7H_n'(x) \\
&\quad -2x^6H_n'(x) + \frac{7}{2}x^5H_n'(x) + xnH_n'(x) \\
&\quad +\frac{3}{2}x^5nH_n'(x) - x^5H_n(x) - \frac{1}{2}x^4H_n(x) \\
&\quad +x^3H_n(x) - \frac{1}{2}x^2H_n(x)\}e^{\frac{-x^2}{2}}
\end{aligned}$$

usando la primera relación de recurrencia para eliminar el termino $H''(x)$ una vez factorizado, tenemos.

$$\begin{aligned}
-\frac{1}{2}x\left(2\hat{D}_x^3 + x\hat{D}_x^4\right)e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x) &= \{\left(-x^4 - x^3 + x^2 + \frac{x^2n}{2} + x\right)(xH_n'(x) - nH_n(x)) \\
&\quad -x^3H_n'(x) + 2x^2H_n'(x) + 2xH_n'(x) \\
&\quad -x^7H_n'(x) - 2x^6H_n'(x) + \frac{7}{2}x^5H_n'(x) \\
&\quad +xnH_n'(x) + \frac{3}{2}x^5nH_n'(x) \\
&\quad -x^5H_n(x) - \frac{1}{2}x^4H_n(x) \\
&\quad +x^3H_n(x) - \frac{1}{2}x^2H_n(x)\}e^{\frac{-x^2}{2}}
\end{aligned} \tag{4.12}$$

finalmente podemos reagrupar para obtener

$$
\begin{aligned}
-\frac{1}{2}x\left(2\hat{D}_x^3 + x\hat{D}_x^4\right)e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x) \quad = \quad & \{-x^7H_n'(x) - x^5H_n'(x) - x^4H_n'(x) + 3x^2H_n'(x) \\
& +\frac{x^3n}{2}H_n'(x) - 2x^6H_n'(x) + \frac{7}{2}x^5H_n'(x) \\
& +xnH_n'(x) + \frac{3x^5n}{2}H_n'(x) \\
& +(nx^4 + nx^3 - nx^2 - \frac{x^2n^2}{2} - xn)H_n(x) \\
& -x^5H_n(x) - \frac{1}{2}x^4H_n(x) \\
& +x^3H_n(x) - \frac{1}{2}x^2H_n(x)\}e^{\frac{-x^2}{2}}.
\end{aligned} \tag{4.13}
$$

Observamos que no aparece alguna función de Hermite que no esté siendo multiplicada por x o por alguna potencia de x; x^n, $n \in \mathbb{N}$. Más aún utilizando las relaciones de recurrencia que cumplen los polinomios de Hermite no ha sido posible expresar nuestro polinomio bajo la aplicación de nuestros operadores multiplicado por la función $e^{\frac{-x^2}{2}}$ como $n + \frac{1}{2}$.

Capítulo 5

CONCLUSIONES

Observamos que ya hemos alcanzado un grado de congruencia alto tras el esfuerzo iterativo de construir nuestro propio operador hamiltoniano, modificando en forma mínima matemáticamente $\hat{P}$ y $\hat{M}$ dados en nuestra referencia principal [1]. Ahora veremos que podemos averiguar aún más sobre nuestras funciones $g(x), \Phi_2(x)$.

En la tercera parte del artículo se propone la acción de los operadores, el diferencial de segundo orden $\hat{P}$ y el operdor integral de primer orden $\hat{M}$ en forma análoga a los operadores de aniquilación. Es decir:

$$
\begin{aligned}
\hat{P}u_n(x) &= nu_{n-1}(x) \\
\hat{M}u_n(x) &= u_{n+1}(x)
\end{aligned}
\tag{5}
$$

Las cuales implican

$$
\begin{aligned}
\hat{P}\hat{M} &= (n+1)u_n(x) \\
\left[\hat{P}, \hat{M}\right] &= \hat{1}u_n(x)
\end{aligned}
\tag{5.1}
$$

Intentemos usar esta información para averigüar más sobre la forma de nuestras funciones $g(x)$, y $\Phi_2(x)$. Pese a que a $\hat{P}$ y a $\hat{M}$ en el artículo se les aplica en forma análoga a los operadores de aniquilación y construcción, hemos mostrado que no pueden usarse directamente sino en forma de la suma o resta de ambos aperadores aplicandose sobre un vector de estado, es decir debemos usar la relación (3.4).

$$
\hat{a}^{\dagger}\hat{a} = \hat{H} - \frac{1}{2}
$$

i.e.

$$
\begin{aligned}
\hat{a}^{\dagger}\hat{a} &= \frac{1}{i\sqrt{2}}\left(\hat{M}+i\hat{P}_1\right)\cdot\frac{i}{\sqrt{2}}\left(\hat{M}+i\hat{P}_1\right)-\frac{1}{2} \\
&= \frac{1}{2}\left(\hat{M}^2-i\hat{M}\hat{P}_1+i\hat{P}_1\hat{M}-i^2\hat{P}_1^2\right)-\frac{1}{2} \\
&= \frac{1}{2}\left(\hat{M}^2+-1-i^2\hat{P}_1^2\right)-\frac{1}{2}
\end{aligned}
$$

Que aplicándose a una función $u_n(x)$ sería:

$$
\begin{aligned}
\hat{a}^{\dagger}\hat{a} &= \left(\frac{1}{2}\left(\hat{M}^2+-1-\hat{P}_1^2\right)-\frac{1}{2}\right)u_n(x) \\
& o \\
\hat{a}^{\dagger}\hat{a} &= \left(\frac{1}{2}\left(\hat{M}^2+-1-\hat{P}_1^2\right)-\frac{1}{2}\right)e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x)
\end{aligned}
$$

en particular para nuestro vector de estado. Por otra parte, de acuerdo con el artículo [1] (ecuaciones 17) se tiene que:

$$\hat{M}^2u_n(x)=u_{n+2}(x)$$

$$y$$

$$\hat{P}_1^2u_n(x)=-\hat{P}^2u_n(x)=-nu_{n-2}(x)$$

además gracias a la tercera relacion de recurrencia, podemos escribir

$$
\begin{aligned}
u_{n+2}(x) &= e^{\frac{-x^2}{2}}H_{n+2}(x)=e^{\frac{-x^2}{2}}\left(xH_{n+1}(x)-nH_n(x)\right) \\
& y \\
u_{n+1}(x) &= e^{\frac{-x^2}{2}}H_{n-2}(x)=e^{\frac{-x^2}{2}}\left(-\left(H_n(x)-xH_{n-1}(x)\right)\frac{1}{n}\right)
\end{aligned}
$$

por lo que $\hat{a}^{\dagger}\hat{a}$ que sería el análogo al operador de número [3], y este producto se puede escribir como

$$
\begin{aligned}
\hat{a}^{\dagger}\hat{a} &= \left(\frac{1}{2}\left(\hat{M}^2+-\hat{1}-\hat{P}_1^2\right)-\frac{1}{2}\right)e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x) \qquad (5.2)\\
&= \frac{1}{2}\left[\left(xH_{n+1}(x)-nH_n(x)\right)-H_n(x)+n\left(H_n(x)-xH_{n-1}(x)\right)\right]e^{\frac{-x^2}{2}} \\
& -\frac{1}{2}e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x) \\
&= \frac{1}{2}\left[\left(xH_{n+1}(x)-xnH_{n-1}(x)\right]e^{\frac{-x^2}{2}}-e^{\frac{-x^2}{2}}H_n(x)
\end{aligned}
$$

Observemos esta última ecuación:

$$\hat{a}^{\dagger}\hat{a} = \frac{1}{2}\left[(xH_{n+1}(x) - xnH_{n-1}(x)\right] e^{\frac{-x^2}{2}} - e^{\frac{-x^2}{2}} H_n(x) \tag{5.3}$$

De las ecuaciones 3.10, 5 y 5.1 podemos intuir que la aplicación de nuestro operador a uno de los eigenvectores del oscilador armónico cuántico realmente está actuando de manera similar al operador Hamiltoniano aportandonos un n-ésimo estado de energía más una cantidad de energía cuantificable, pareciera que nos aporta un estado "promedio"de energía, en forma análoga a como lo haría la aplicación del operador $\hat{a}^{\dagger}\hat{a}_{Clásico}$, ya que [3, 5]

$$\left[\hat{a}^{\dagger}, \hat{a}\right]_{Clásico} = \hat{a}^{\dagger}\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^{\dagger} = \hat{H} - \frac{1}{2} - \hat{a}\hat{a}^{\dagger}_{Clásico}$$

y aplicado este último operador a una eigenfunción del oscilador armǿnico cuántico nos debe de aportar:

$$\begin{aligned} \left(\hat{H} - \frac{1}{2} - \hat{a}\hat{a}^{\dagger}_{Clásico}\right)\Psi &= \left(n + \frac{1}{2}\right)\Psi - \frac{1}{2}\Psi - \hat{a}\hat{a}^{\dagger}_{Clásico}\Psi \\ &= n\Psi - \hat{a}\hat{a}^{\dagger}_{Clásico}\Psi. \end{aligned}$$

Este último resultado, así como el desarrollo que se ha realizado de nuestros operadores $\hat{a}, \hat{a}^{\dagger}$ en términos de nuestros operadores $\hat{P}_1, \hat{M}$ nos anima a continuar buscando la forma explícita de nuestras funciones $g(x)$ y $\Phi_2(x)$, la cual no debiera ser muy diferente al de las formas de las funciones implicadas en la cinemática de la mecánica clásica, si bien el trabajo realizado hasta ahora nos sugiere que podríamos modificar nuestras funciones en la forma:

$$\alpha_g g(x)$$
y
$$\beta_\phi \Phi_2(x)$$

Donde las funciones constantes α_g, $\beta_\phi \in \mathbb{C}$. Es decir en forma similar a la modificación de $\hat{P}_1 = i\hat{P}$. Lo anterior obviamente en congruencia con el artículo original.

Bibliografía

[1] G Dattoli, D Levi y P. Winternitz,
Heisenberg algebra, umbral calculus and orthogonal polynomials,
J. of Math.Phys. **49, 053509 (2008).**

**[2] Quantum Mechanics, Concepts and applications.
Nouredine Zettili.
JHON WILEY & SONS, LTD. 2001**

**[3] Quantum Theory
David Bohm
Dover Publications, INC. 1989**

**[4] Quantizierung als Eigenwertproblem
Anales de Física
1926, Suiza**

**[5] Quantum Mechanics
A. A. Sokolov, Y.M. Lostukov, Et al.
Holt, Rinehart and Winston, INC. 1966**

**[6] FUNDAMENTOS DE FÍSICA MODERNA
Robert M. Eisberg
LIMUSA, NORIEGA EDITORES. 2001**

**[7] THE FUNCTIONS OF MATHEMATICAL PHYSICS
Harry Hochstadt
Dover Publications, INC. 1986**

**[8] Ecuaciones de la Física Matemática
A.N. Tijonov, A.A. Samarsky.
Editiral Mir Moscú Mathematical Methods For Physicists**

**[9] Mathematical Methods For Physicists
George B. Arfken, Hans J Weber.
Elsevier Academic Press 2005'u 1983**

**[10] Table of Integrals Series and Products
I.S. Gradshtein, I.M. Ryzhik.
Academic Press 1965**

[11] **MATHEMATICS FOR PHYSICISTS**
Philippe Dennery, André Krzywicki
Dover Publications, INC. 1996