

# El límite del oscilador cuántico a la partícula libre

G.S. Pogosyan, L.E. Vicent y K.B. Wolf

Centro de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México,  
Apartado Postal 48-3, 62251 Cuernavaca, Morelos

Recibido el 15 de octubre de 2004; aceptado el 26 de enero de 2005

Cuando permitimos que la constante de Hooke de un oscilador armónico tienda a cero, el sistema se vuelve libre. Examinamos este límite en el contexto de la mecánica cuántica, donde los valores cuantizados de la energía se acumulan en un continuo y donde las funciones de Hermite se vuelven ondas planas.

*Descriptores:* Oscilador armónico; límites regulares; ondas planas.

When we let the Hooke constant of a harmonic oscillator tend to zero, the system becomes free. We examine this limit in the context of quantum mechanics, where the quantized energy values accumulate to a continuum, and where the Hermite functions become plane waves.

*Keywords:* Harmonic oscillator; regular limits; plane waves.

PACS: 02.30.Mv; 03.65.Db

## 1. Introducción: los sistemas clásicos

El oscilador armónico clásico es un sistema mecánico cuya fuerza de restitución  $-\kappa q$  es proporcional, por la constante de Hooke  $\kappa$ , a la separación  $q$  entre el punto masa  $\mu$  y el centro del oscilador. Su energía es

$$E^{\text{clásica}} = \frac{1}{2\mu}p^2 + \frac{\kappa}{2}q^2 \geq 0, \quad (1)$$

y su valor oscila en el tiempo entre el sumando cinético (proporcional a  $p^2$ ) y el sumando potencial (proporcional a  $q^2$ ); pero su suma, la energía total (1), es constante. El movimiento de su posición  $q(t)$  (así como su momento  $p(t) = \mu dq(t)/dt$ ) es armónico, es decir, su trayectoria es una senoide:

$$\begin{aligned} q(t) &= q_{\max} \sin(\omega t + \phi), \\ q_{\max}(E, \kappa) &:= \sqrt{\frac{2E}{\kappa}}, \\ \omega &:= \sqrt{\frac{\kappa}{\mu}}, \end{aligned} \quad (2)$$

donde el punto de retorno  $q_{\max}$  y la fase  $\phi$  están determinadas por las condiciones iniciales.

Cuando la fuerza de restitución de un oscilador se debilita hasta desaparecer (es decir, su constante de Hooke tiende a cero,  $\kappa \rightarrow 0$ ), el sistema se convierte en una partícula libre, cuya energía es toda cinética,

$$E^{\text{clásica}} = \frac{1}{2\mu}p^2 \geq 0. \quad (3)$$

En este artículo consideraremos el límite de una sucesión de osciladores, etiquetados por  $j \in \{1, 2, \dots\}$ , cuyos parámetros de Hooke son  $\kappa_j = \kappa_1/j$ , de modo que  $\lim_{j \rightarrow \infty} \kappa_j = 0$ . Las trayectorias  $q^{(j)}(t)$  formarán una sucesión correspondiente de sinusoides cuyas amplitudes  $q_{\max}^{(j)}$  y períodos  $(\omega^{(j)})^{-1}$  en (2) crecen proporcionales a  $j^{1/2} \rightarrow \infty$ .

El límite de estas trayectorias —en mecánica clásica— son líneas rectas.

En mecánica cuántica unidimensional, un potencial no-singular cuya contraparte clásica mantenga a las partículas en un intervalo finito (compacto), gozará de un espectro discreto y no-degenerado —y el del oscilador armónico además es igualmente espaciado. Entretanto, la partícula cuántica libre despliega un continuo de energías (cero y positivas); para cada valor (excepto cero), las funciones seno y coseno son las dos soluciones degeneradas en energía y distinguidas por su paridad [1]. Para examinar el proceso de límite de una sucesión de osciladores cuánticos al sistema libre debemos reemplazar el argumento somero del caso clásico anterior, por una observación más cuidadosa de cómo las energías discretas de los osciladores tienden a un continuo, y de cómo las funciones de onda de Hermite limitan a las funciones trigonométricas.

El límite libre del oscilador armónico y otros límites similares, aunque aparecen como fórmulas entre funciones especiales en tablas [2], no hemos encontrado mención de este caso concreto en los textos de mecánica cuántica. Aquí, nuestro propósito es analizar la contracción que sufren sistemas cuánticos que denominaremos “discretos o compactos” a límites “continuos o no-compactos” mediante este ejemplo distinguido. En la Sec. 2 recordaremos los sistemas cuánticos correspondientes; las tácticas para probar el límite serán expuestas en la Sec. 3 y aplicadas en la Sec. 4. Comentaremos el contexto de ésta en otras contracciones análogas en la Sec. 5.

## 2. Ecuaciones, energías y funciones de onda

La ecuación de Schrödinger del oscilador armónico cuántico, sus soluciones  $\Psi_n(q, \omega)$  de cuadrado integrable y valores propios de la energía, son bien conocidos [1]:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dq^2} + \frac{\mu\omega^2}{2} q^2 \right) \Psi_n(q, \omega) = E_n(\omega) \Psi_n(q, \omega), \quad (4)$$

$$\omega := \sqrt{\kappa/\mu}, \quad E_n(\omega) = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}),$$

$$n \in \{0, 1, 2, \dots\}. \quad (5)$$

La posición  $q$  tiene unidades de distancia y las funciones de onda normalizadas [véase abajo (8)] tienen unidades de raíz de distancia inversa. Definimos la variable y funciones de onda sin dimensiones

$$x := q\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}, \quad \psi_n(x) := \left(\frac{\hbar}{\mu\omega}\right)^{1/4} \Psi_n(q, \omega), \quad (6)$$

que resuelven la Ec. (4) en términos de una función gaussiana decreciente y polinomios de Hermite  $H_n(x)$ . Ellas son

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n! 2^n \sqrt{\pi}}} e^{-x^2/2} H_n(x), \quad (7)$$

y la normalización (sin unidades) es tal que

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx (\psi_n(x))^* \psi_{n'}(x) = \delta_{n,n'}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dq (\Psi_n(q, \omega))^* \Psi_{n'}(q, \omega). \quad (8)$$

En el límite, cuando la constante de Hooke se ha hecho cero, el sistema es libre, y las funciones de onda del sistema obedecen la ecuación de Schrödinger de ese sistema,

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dq^2} \Phi_\nu^\sigma(q) = F_\nu \Phi_\nu^\sigma(q), \quad F_\nu = \hbar\nu, \quad \frac{\mu q^2}{\hbar^2} \nu \geq 0. \quad (9)$$

Las soluciones de paridad definida por  $\sigma \in \{+, -\}$  son las funciones seno y coseno, cuya normalización se hace de manera que su integral sobre  $q$  no tenga unidades —como en (6) y (8). Esto se logra redefiniendo

$$\phi_p^\sigma(q) := \left(\frac{\mu\nu}{\hbar}\right)^{-\frac{1}{4}} \Phi_\nu^\sigma(q), \quad p := +\sqrt{2\hbar\mu\nu}, \quad \hbar\nu = \frac{p^2}{2\mu}, \quad (10)$$

donde es conveniente usar el parámetro  $p$  de momento, y las funciones trigonométricas

$$\phi_p^+(q) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos \frac{pq}{\hbar}, \quad \phi_p^-(q) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin \frac{pq}{\hbar}. \quad (11)$$

La normalización de estas funciones es en el sentido de Dirac,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq (\phi_p^\sigma(q))^* \phi_{p'}^{\sigma'}(q) = \hbar \delta_{\sigma,\sigma'} \delta(p - p')$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\nu}} \int_{-\infty}^{\infty} dq (\Phi_\nu^\sigma(q))^* \Phi_{\nu'}^{\sigma'}(q), \quad (12)$$

y tiene unidades de distancia, la cual se puede comparar con (8). (Las normalizaciones de Dirac deben probarse con cuidado, integrando ambos miembros de la ecuación anterior en compañía con funciones suaves de decrecimiento rápido, con un intercambio cuidadoso de integrales [3]).

### 3. Expresiones apropiadas para el límite

Analizaremos primero las energías de una secuencia de osciladores cuyas constantes de Hooke  $\{\kappa_j\}_{j=1}^\infty$  tienden a cero. Será más conveniente usar las frecuencias

$$\{\omega\}_{j=1}^\infty, \quad \omega_j := \sqrt{\kappa_j/\mu},$$

en términos de las cuales los niveles de energía  $E_n(\omega_j)$  estarán dados por (5); éstos son igualmente espaciados, con una separación constante  $\hbar\omega_j$ , decreciente con  $j$ , y un nivel base  $(1/2)\hbar\omega_j \rightarrow 0$  al cual colapsarán todos los estados con  $n$  finita. Cuando escogemos y fijamos una energía finita positiva para la partícula libre,  $F_\nu = \hbar\nu$  en (9), una secuencia de osciladores  $\omega_n$  en niveles  $n$  crecientes que tienden asintóticamente a esa energía es

$$E_n(\omega_n) \sim \hbar\omega_n n \sim F_\nu.$$

Por ello, la secuencia que escogemos consistirá de niveles  $n$  cada vez más altos, en osciladores cada vez más anchos:  $\omega_n \sim \nu/n$ . En consecuencia, adoptaremos la secuencia  $\omega_n = \nu/n$  ( $n \geq 1$ ), porque es la más sencilla de tratar analíticamente.

Escogimos la base de funciones seno y coseno en (11) porque tienen paridad definida,  $\phi_p^\sigma(-q) = \sigma \phi_p^\sigma(q)$ , así como la tienen las funciones de Hermite en (7),  $\psi_n(-x) = (-1)^n \psi_n(x)$ , en cada oscilador en la secuencia. Sería erróneo escoger, por ejemplo, las ondas viajeras

$$\phi_{\pm p}(q) = \phi_p^+(q) \pm i\phi_p^-(q) \propto \exp(\pm ipq/\hbar),$$

pues la secuencia no convergería a ellas. Similarmente, ciertas formas funcionales son más apropiadas que otras para evidenciar el límite que nos ocupa. En la función de onda (7), el factor gaussiano  $e^{-x^2/2} = \exp(-\mu\omega_n q^2/2\hbar)$  tiene claramente el límite 1 cuando  $n \rightarrow \infty$ , pero el límite  $n \rightarrow \infty$  de los polinomios de Hermite  $H_n(x)$  no aparece bien definido. El método de análisis que ofrecemos en este artículo consiste en reescribir los polinomios de Hermite como series hipergeométricas confluentes, o funciones de Kummer  ${}_1F_1(a; b; z) = M(a, b, z)$  [4], cuyas propiedades asintóticas se prestan óptimamente para este propósito. Sus expresiones son [4]:

$$H_n(x) = \begin{cases} \frac{(-1)^{\frac{1}{2}n} n!}{(\frac{1}{2}n)!} {}_1F_1(-\frac{1}{2}n; \frac{1}{2}; x^2), & n \text{ par,} \\ \frac{(-1)^{\frac{1}{2}(n-1)} n!}{(\frac{1}{2}(n-1))!} 2x {}_1F_1(-\frac{1}{2}(n-1); \frac{3}{2}; x^2), & n \text{ impar,} \end{cases} \quad (13)$$

donde para toda  $N \geq 0$  entera (nivel  $n$  par o impar),

$${}_1F_1(-N; b; x^2) := \sum_{k=0}^N \frac{\overbrace{(-N)(1-N)(2-N) \cdots (k-N-1)}^{k \text{ factores}} x^{2k}}{\underbrace{b(b+1)(b+2) \cdots (b+k-1)}_{k \text{ factores}} k!}, \tag{14}$$

la serie se corta y la función es un polinomio de grado  $N$ .

Los denominadores en (13)–(14) serán, para  $b = 1/2$  y  $3/2$ , son para  $b = 1/2$  :

$$\frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} \cdots \frac{1}{2}(2k-1) \cdot 1 \cdot 2 \cdots k = (2k)!/2^{2k}, \tag{15}$$

para  $b = 3/2$  :

$$\frac{3}{2} \cdot \frac{5}{2} \cdots \frac{1}{2}(2k+1) \cdot 1 \cdot 2 \cdots k = (2k+1)!/2^{2k}. \tag{16}$$

En cuanto a los numeradores, cuando  $N$  crece y al mismo tiempo hacemos decrecer la escala del argumento definiendo  $x =: y/2\sqrt{N}$ , los sumandos en (14) con (15) y (16) serán asintóticamente  $(-1)^k y^{2k}/(2k)!$  y  $(-1)^k y^{2k+1}/(2k+1)!$ , habiendo desaparecido todos los factores de  $N$ . Así vemos que los límites de las secuencias hipergeométricas son claramente

$$\lim_{N \rightarrow \infty} {}_1F_1\left(-N; \frac{1}{2}; y^2/4N\right) = \cos y, \tag{17}$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} {}_1F_1\left(-N; \frac{3}{2}; y^2/4N\right) = \text{sen } y/y, \tag{18}$$

y convergen en todo el plano complejo  $|y| < \infty$ .

Como  ${}_1F_1(a; b; 0) = 1$ , podemos verificar que  $H_n(0)$  (comparando con la Ref. 4), está dado correctamente por los prefactores en (13). En particular, notamos que las fases  $(-1)^{n/2}$  y  $(-1)^{(n-1)/2}$  solamente reflejan la definición histórica de los polinomios de Hermite, cuyos signos en el origen alternan, mientras que las funciones trigonométricas son  $\cos 0 = 1 = \lim_{y \rightarrow 0} \sin y/y$ . El factor de normalización y los resultados de (15)–(16) requieren la fórmula asintótica de Stirling [4] en su forma  $(2N)!/(N!)^2 \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 2^{2N+1}/\sqrt{\pi N}$ ; con ella probamos

$$n = 2m \quad \text{par:} \quad \frac{\sqrt{(2m)!}}{m! 2^m \pi^{1/4}} \xrightarrow{m \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{\pi}} m^{-1/4}, \tag{19}$$

$$n = 2m+1 \quad \text{impar:} \quad \frac{\sqrt{(2m+1)!}}{m! 2^{m+1/2} \pi^{1/4}} \xrightarrow{m \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{\pi}} m^{1/4}. \tag{20}$$

Recordamos que para  $n$  impar, en (13) aún es necesario multiplicar la serie hipergeométrica por  $2x = y/\sqrt{n}$ , por lo que las constantes frente a las funciones trigonométricas (20) tendrán el mismo comportamiento asintótico  $\sim n^{-1/4}/\sqrt{\pi}$ , tanto en el caso de  $n$  par como en el impar.

### 4. Comportamiento del límite

Los desarrollos de la sección anterior implican, para la función de onda (7) cuyo argumento es  $x = y/2\sqrt{n}$ , que

$$\lim_{m \rightarrow \infty} m^{1/4} (-1)^m \psi_{2m} \left( \frac{y}{2\sqrt{2m}} \right) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos y, \tag{21}$$

$n = 2m,$

$$\lim_{m \rightarrow \infty} m^{1/4} (-1)^m \psi_{2m+1} \left( \frac{y}{2\sqrt{2m+1}} \right) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \text{sen } y, \tag{22}$$

$n = 2m+1,$

donde las frecuencias y los argumentos son

$$\omega_n = \frac{\nu}{n}, \quad x = \frac{y}{2\sqrt{n}} = q \sqrt{\frac{\mu\nu}{\hbar n}} = q \frac{p}{2\hbar\sqrt{n}}, \quad y = \frac{pq}{\hbar}. \tag{23}$$

En consecuencia, hemos probado la contracción deseada para las funciones de onda físicas  $\Psi_n(q; \omega_n)$ , en la forma

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{2}n\right)^{1/4} (-1)^{n/2} \Psi_n(q; \omega_n) = \Phi_\nu^+(q), \tag{24}$$

$n \text{ par,}$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{2}[n-1]\right)^{1/4} (-1)^{(n-1)/2} \Psi_{n-1}(q; \omega_{n-1}) = \Phi_\nu^-(q), \tag{25}$$

$n \text{ impar,}$

con  $\omega_n = \nu/n$ . La norma de las funciones en la secuencia es  $n \rightarrow \infty$ , de modo que la integral (8) converge a (12) en el sentido esperado.

En la Fig. 1 mostramos el límite que nos ocupa para estados pares (izquierda) e impares (derecha) del oscilador armónico. Sus funciones sin unidades  $\psi_n(x)$  están graficadas con una escala horizontal determinada por las cotas del movimiento clásico,  $q_{\text{max}} = \sqrt{2E/\kappa} \Rightarrow x_{\text{max}}^{(n)} = \sqrt{2n+1}$ , y una escala vertical común. En cada gráfica a partir de  $n = 4$  indicamos un rectángulo cuyo ancho es  $4\pi n^{-1/2}$  y cuyo alto es  $2n^{-1/4}$ . El contenido de este rectángulo converge a las funciones trigonométricas en el intervalo  $-4\pi \leq y \leq 4\pi$ .

### 5. Contexto y conclusiones

Hemos probado analíticamente que las funciones de onda del oscilador armónico cuántico,  $\{\Psi_n(q, \omega_n)\}_{n=0}^\infty$  en (6)–(7), las cuales forman una base numerable y ortonormal en sentido de Kronecker bajo la integral (8), cuando  $n \rightarrow \infty$  se contraen a

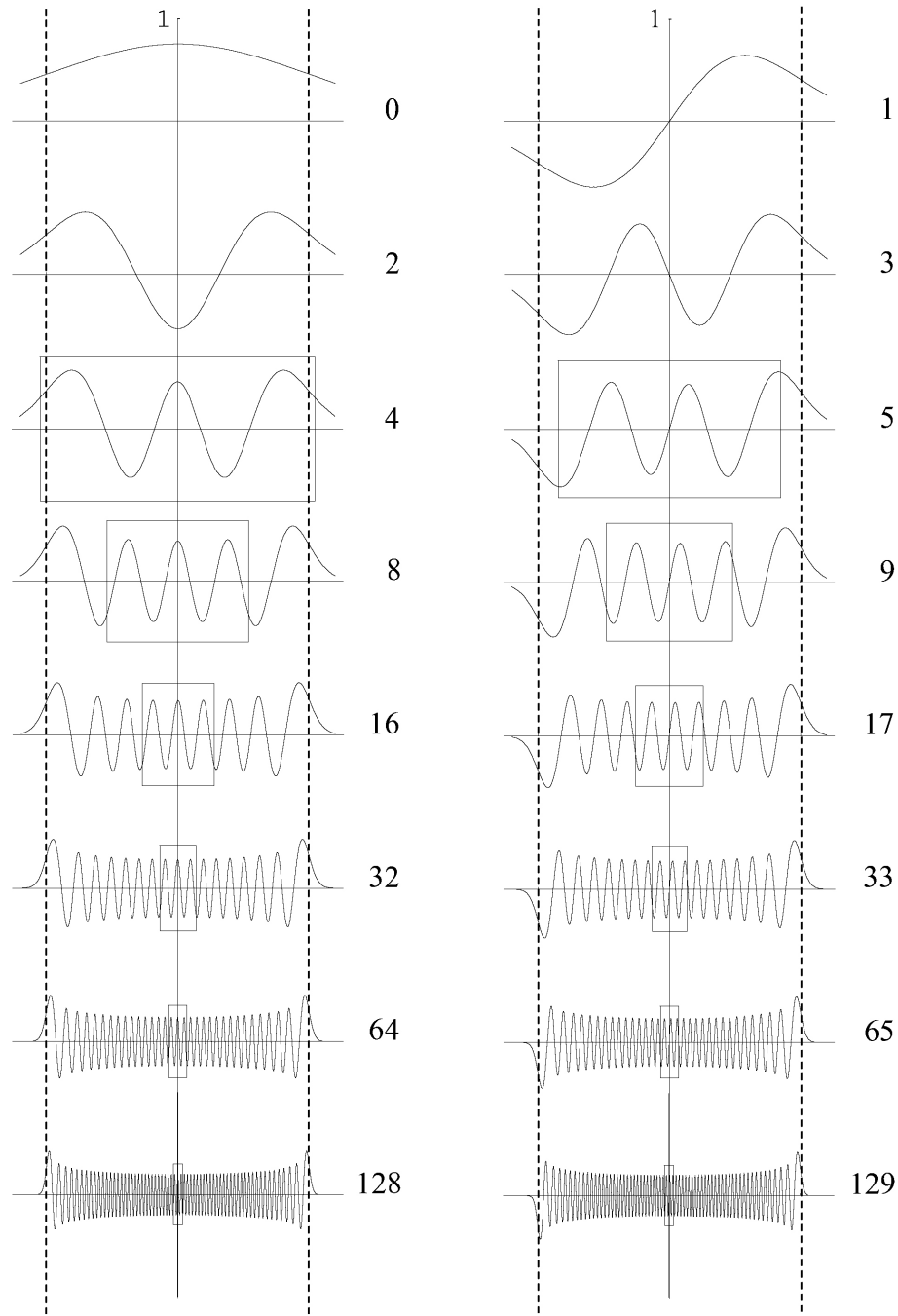


FIGURA 1. Funciones de onda del oscilador armónico cuántico,  $\psi_n(x)$  para  $n$  par (izquierda) y para  $n$  impar (derecha), representando los límites de las secuencias (21) y (22), respectivamente. La escala horizontal en  $x$  es tal que líneas verticales son las cotas del movimiento clásico,  $x_{\text{máx}}^{(n)} = \sqrt{2n + 1}$ . En cada gráfica (a partir de  $n = 4$ ) hay un rectángulo de ancho  $4\pi n^{-1/2}$  y alto  $2n^{-1/4}$ , cuyo contenido converge, conforme  $n \rightarrow \infty$ , a la función coseno y seno respectivamente, en su intervalo  $-4\pi \leq y \leq 4\pi$ .

las funciones de onda de la partícula libre,  $\{\Phi_p^\sigma(q)\}_{p \in \mathbb{R}^+}^{\sigma \in \{+, -\}}$  en (10)–(11), las cuales forman una base ortonormal en sentido de Dirac (12), en la forma descrita por (21) y (22). El límite fue probado representando los polinomios de Hermite como funciones hipergeométricas confluentes.

Existe una gran variedad de contracciones de sistemas ligados a sistemas libres que también se pueden tratar con métodos como el detallado aquí. Tales son los osciladores

armónicos unidimensionales con barrera centrífuga, cuyos potenciales son  $1/2(\kappa x^2 + \lambda/x^2)$ ,  $x > 0$ . Éstos se contraerán a partículas ‘libres’ con potenciales centrífugos solos,  $1/2\lambda/x^2$ . Estas contracciones establecerán que secuencias de funciones de Laguerre tienen por límite las funciones de Bessel de órdenes relacionados con  $\lambda$ , para  $\lambda > -1/4$ . Las funciones de Whittaker estarán en el límite cuando  $-1/4 < \lambda < 3/4$  (intervalo excepcional, espectro acotado

por debajo) y  $\lambda \leq -1/4$  (caso centrípeto fuerte, espectro no acotado por debajo). Allí los espectros no son únicos, pues hay una familia uniparamétrica de extensiones autoadjuntas para el operador hamiltoniano de Schrödinger, cuyos espectros no son igualmente espaciados.

Asimismo podemos inquirir sobre otros sistemas, como los osciladores repulsivos, cuyo potencial invierte el signo del armónico,  $-\kappa x^2$ , cuyo espectro es un doble continuo clasificado por energía  $E \in \mathfrak{R}$  y paridad  $\sigma \in \{+, -\}$ , y cuyas funciones de onda son de cilindro parabólico [3]. Cuando  $\kappa \rightarrow 0$ , la barrera que representa el potencial para las ondas viajeras de energía negativa se vuelve cada vez más ancha; como allí las funciones de onda decaen exponencialmente, en el límite todas se volverán cero. Solamente las soluciones de energía positiva tendrán límite a funciones trigonométricas. El límite a la función de Airy ocurre cerca del punto de retorno clásico y también es de interés [5]. Estas contracciones pueden presentar otras dificultades tácticas que merecerían un estudio monográfico.

En realidad, todas las contracciones mencionadas arriba (y algunas más) son casos particulares contenidos en el grupo de transformaciones relativistas en 2+1 dimensiones, cuando dejamos que la velocidad de la luz aumente al infinito, co-

mo lo hicieron İnönü y Wigner en 1953, en el artículo “On the contraction of groups and their representations” [6]. Un grupo homomorfo a ése es el de matrices reales de  $2 \times 2$ , que describe los sistemas mecánicos clásicos y cuánticos (¡y ópticos geométricos, ondulatorios y cuánticos!) llamados cuadráticos; éstos incluyen a los osciladores armónico y repulsivo (véase por ejemplo [7]: “The unitary irreducible representations of  $SL(2, \mathfrak{R})$  in all subgroup reductions”). Todas las funciones propias de estos sistemas involucran funciones hipergeométricas gaussianas y confluentes. Dentro de este esquema podemos estar seguros que los límites existirán, y para determinarlos analíticamente hemos propuesto aquí el uso de una serie apropiada para este objetivo particular.

### Agradecimientos

Es un gusto agradecer comentarios de Natig M. Atakishiyev (Instituto de Matemáticas, UNAM/Cuernavaca) y de Jamil Daboul (Departamento de Física, Universidad Ben Gurion, Beer Sheva), dando fe del apoyo de la DGAPA-UNAM al proyecto PAPIIT 102603 *Óptica Matemática*, así como la beca de posgrado de L.E.V. contenida en el proyecto SEP-CONACYT 44845 del mismo nombre.

- 
1. S. Flügge, *Problems in Quantum Mechanics* (Springer-Verlag, Heidelberg, 1971).
  2. I.S. Gradshteyn y I.N. Ryzhik, *Tables of Integrals, Series and Products* (Academic Press, San Diego CA, 6ª edición: 2000).
  3. K.B. Wolf, *Integral Transforms in Science and Engineering* (Plenum Publ. Corp., Nueva York, 1979).
  4. M. Abramowitz y I.A. Stegun *Handbook of Mathematical Functions* (Natl. Bureau of Standards, 1964).
  5. J. Daboul, G.S. Pogoyan y K.B. Wolf (trabajo sometido a publicación).
  6. E. İnönü y E.P. Wigner, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.* **39** (1953) 510.
  7. D. Basu y K.B. Wolf, *J. Math. Phys.* **23** (1982) 189.