revista mexicana de física 26 no. 3 (1980) 385-396


# EL OSCILADOR ANARMONICO: CASO CLASICO vs. CASO CUANTICO

L. Gottdiener
Departamento de Física, Facultad de Ciencias
Universidad Nacional Autónoma de México
(recibido 5 de agosto, 1977)

ABSTRACT

We consider an anharmonic oscillator with a cubic term in the potential, both in the classical and the quantum mechanical case. We use perturbation theory in the appropriate form, i.e. classical or quantum mechanical, to calculate various quantities of interest, and compare these for the two cases.

RESUMEN

Consideramos un oscilador anarmónico con un término cúbico en el potencial, en los casos clásico y cuántico. Utilizamos la teoría de perturbaciones en su forma apropiada, i.e. clásica o cuántica, para calcular algunas cantidades de interés, y comparamos éstas para los dos casos.

## I. INTRODUCCION

Entre las propiedades de un oscilador armónico clásico están las de que $\omega = \omega_o = (k/m)^{1/2}$, y $\bar{x} = \bar{x}_o = 0$ ($\bar{x}$ = valor promedio de x), para cualquier amplitud de la oscilación. Sin embargo, si al potencial armónico $V_o = \frac{1}{2} kx^2$ se le agrega una pequeña componente anarmónica proporcional, por ejemplo a $x^3$, de manera que

$$F = F_o + F' = -kx + \varepsilon kx^2 \quad , \tag{1}$$

y

$$V = V_o + V' = \frac{1}{2} kx^2 - \frac{1}{3} \varepsilon kx^3 \quad , \tag{2}$$

donde F es la fuerza y V el potencial, entonces, utilizando teoría de perturbaciones (ver Apéndice) se obtiene que la primera corrección distinta de cero a las cantidades de orden cero ($\bar{x}_o$ y $\omega_o$) está dada por las expresiones:

$$\bar{x} = \frac{1}{2}\,\varepsilon A^2 \tag{3a}$$

y

$$\omega = \omega_o + \omega_2 = \omega_o\,(1 - \frac{5}{12}\,\varepsilon^2 A^2) \quad , \tag{3b}$$

o sea que tanto $\omega$ como $\bar{x}$ dependen ahora de la amplitud A de la oscilación. También podemos escribir (3a) en la forma:

$$\bar{x} = \frac{\varepsilon}{k}\,E^{(o)} = \frac{\varepsilon}{m\omega_o^2}\,E^{(o)} \quad , \tag{3c}$$

donde $E^{(o)}$ es la energía del sistema sin perturbar (i.e. del oscilador armónico), en virtud de que la relación entre $E^{(o)}$ y la amplitud A es:

$$E^{(o)} = \frac{1}{2}\,kA^2 \tag{4}$$

Nos preguntamos si los resultados (3) para el sistema clásico tienen alguna significación en lo que se refiere al correspondiente sistema cuántico. Para contestar a esta pregunta, que es el propósito de este trabajo, consideraremos las siguientes cantidades: $\bar{x}$, la frecuencia de la radiación emitida por el oscilador (para el caso de que la partícula que realiza las oscilaciones tenga carga eléctrica), y los niveles de energía del sistema.

## II. $\bar{x}$

La cantidad $\bar{x}$, que podemos interpretar también como el desplazamiento de las oscilaciones debido a la anarmonicidad, está dada en mecánica cuántica por la expresión:

$$\bar{x} = \int \psi^* \, x\psi \; dx \quad , \tag{5}$$

y nos interesa el caso en que $\psi$ es una eigenfunción de la energía con número cuántico n, para el sistema con el potencial (2).

Para encontrar las eigenfunciones $\psi$ , utilizamos la teoría de perturbaciones de la mecánica cuántica[1]. Considerando a V' como una perturbación y al oscilador armónico como el sistema sin perturbar, entonces, si hacemos

$$\psi = \sum_i c_i \phi_i \quad , \tag{6}$$

donde $\phi_i$ son las eigenfunciones de la energía del oscilador armónico, la teoría de perturbaciones nos dice que las $c_i$, a primer orden, son

$$c_i = c_i^{(o)} + c_i^{(1)} \quad , \tag{7a}$$

$$c_i^{(o)} = \delta_{i,n} \quad , \tag{7b}$$

$$c_i^{(1)} = \frac{V'_{i,n}}{E_n^{(o)} - E_i^{(o)}} \quad , \tag{7c}$$

donde $V'_{i,n}$ es el elemento de matriz i,n de V' , y $E_i^{(o)}$ es la energía del nivel i del oscilador armónico:

$$E_i^{(o)} = \hbar\omega_o \left(i + \frac{1}{2}\right) \quad . \tag{8}$$

Los elementos de matriz de V' son esencialmente los de $x^3$. De la Ec. (2),

$$V'_{i,n} = -\frac{1}{3}\,\varepsilon\, k x^3_{i,n} \quad . \tag{9}$$

Para calcular $x^3_{i,n}$, se parte de la conocida expresión para los elementos de matriz de x[2]:

$$x_{i,n} = (\hbar/2m\omega_o)^{1/2}\left[\delta_{i-1,n}\sqrt{i} + \delta_{i+1,n}\sqrt{i+1}\right] \quad , \tag{10}$$

y se utiliza la regla de multiplicación de matrices

$$x^3_{i,n} = \sum_{j,k} x_{i,j}\, k_{j,k}\, x_{k,n} \quad . \tag{11}$$

Obtenemos entonces:

$$x^3_{i,n} = (\hbar/2m\omega_o)^{3/2}\left[\delta_{i-3,n}\sqrt{i(i-1)(i-2)} + \delta_{i-1,n}\, 3\, i^{3/2} + \delta_{i+1,n}\, 3(i+1)^{3/2} + \delta_{i+3,n}\sqrt{(i+1)(i+2)(i+3)}\right] \quad (12)$$

Vemos que $V'_{i,n}$ será distinto de cero solamente si $i-n = \pm 1, \pm 3$. Por lo tanto, de (6) y (7) tendremos que:

$$\psi = \phi_n + c^{(1)}_{n-3}\,\phi_{n-3} + c^{(1)}_{n-1}\,\phi_{n-1} + c^{(1)}_{n+1}\,\phi_{n+1} + c^{(1)}_{n+3}\,\phi_{n+3} \quad . \quad (13)$$

Al sustituir (13) en (5) se obtiene que $\bar{x}$ es igual a una suma de términos proporcionales a los elementos de matriz de x, de los cuales, en virtud de (10), sólo sobreviven aquellos de la forma $x_{i,i\pm 1}$. Entonces:

$$\bar{x} = 2c^{(1)}_{n-1}\, x_{n,n-1} + 2c^{(1)}_{n+1}\, x_{n,n+1} \quad . \quad (14)$$

De (7), (9) y (12), se obtiene

$$c^{(1)}_{n-1} = -\varepsilon m \frac{\omega_o}{\hbar}\left(\frac{\hbar}{2m\omega_o}\right)^{3/2} n^{3/2} \quad , \quad (15a)$$

$$c^{(1)}_{n+1} = \varepsilon m \frac{\omega_o}{\hbar}\left(\frac{\hbar}{2m\omega_o}\right)^{3/2} (n+1)^{3/2} \quad . \quad (15b)$$

Sustituyendo (15) y (10) en (14), se obtiene

$$\bar{x} = \frac{\varepsilon\hbar}{m\omega_o}\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad . \quad (16)$$

Para comparar esta expresión con el resultado clásico (3c), sustituimos en esta última ecuación la expresión (8) para el nivel sin perturbar $E^{(o)}$, y obtenemos

$$\bar{x} = \frac{\varepsilon\hbar}{m\omega_o}\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad , \quad (17)$$

expresión idéntica a (16). En conclusión, llegamos a que la Mecánica

Cuántica, Ec. (16), y la Mecánica Clásica, Ec. (17), predicen idénticos resultados, a primer orden en el parámetro $\varepsilon$, para el desplazamiento $\overline{x}$ de las oscilaciones.

## III. LA FRECUENCIA

Desde un punto de vista clásico, si la partícula que realiza las oscilaciones está provista de carga eléctrica, se producirá radiación electromagnética de frecuencia $\omega$ dada por la Ec. (3b)[3].

Desde una perspectiva cuántica, por otra parte, el sistema puede efectuar una transición del estado de energía $E_n$ en que se encontraba originalmente a otro de energía $E_{n'}$, simultáneamente con la emisión de un fotón de frecuencia $\omega$, determinada por la regla de Bohr

$$E_n - E_{n'} = \hbar\omega \quad . \tag{18}$$

Por otra parte, de la teoría de perturbaciones de la mecánica cuántica[1] sabemos que la expresión para los niveles de energía hasta segundo orden es

$$E_n = E_n^{(o)} + V'_{n,n} + \sum_{i\neq n} \frac{|V'_{i,n}|^2}{E_n^{(o)} - E_i^{(o)}} \tag{19}$$

Usando (8), (9), (12) y (19), obtenemos el conocido resultado para los niveles de energía del oscilador anarmónico:

$$E_n = E_n^{(o)} + E_n^{(2)} = \hbar\omega_o(n + \frac{1}{2}) - \frac{5}{12}\varepsilon^2 \frac{\hbar^2}{m}(n^2 + n + \frac{11}{30}) \tag{20}$$

Las transiciones posibles de un nivel de energía a otro están dadas por la regla de selección $n' = n-1$[4], por lo que, de (18) y (20),

$$\omega = \omega_o - \frac{5}{6}\varepsilon^2 \frac{\hbar}{m} n \quad . \tag{21}$$

De la Ec. (8) vemos que para $n \gg 1/2$ ,

$$E_n^{(o)} \simeq \hbar\omega_o n \quad ,$$

por lo que en este caso (21) es equivalente a

$$\omega = \omega_o - \frac{5}{6}\,\varepsilon^2\,\frac{E^{(o)}}{m\omega_o} \tag{22}$$

En términos de la amplitud clásica A que según la Ec. (4) le correspondería a $E^{(o)}$, podemos escribir (22) como

$$\omega = \omega_o\,(1 - \frac{5}{12}\;\varepsilon^2 A^2) \quad . \tag{23}$$

Al igual que en el caso de $\bar{x}$, vemos que los resultados cuántico (para $n \gg 1/2$) y clásico para la frecuencia de la radiación, dados por las Ecs. (23) y (3b), respectivamente, coinciden, esta vez hasta segundo orden en el parámetro $\varepsilon$. Este resultado no es inesperado, ya que constituye una manifestación del principio de correspondencia[5].

## IV. NIVELES DE ENERGIA

Por último, podemos preguntarnos si los resultados clásicos, en particular la Ec. (3b), nos permiten hacer algún tipo de predicción en cuanto a los niveles de energía cuánticos, dados por la Ec. (20). Desde luego notamos que hay una similitud entre $\omega$ (Ec. (3b)) y $E_n$ (Ec. (20)), en el sentido de que en ambos casos las correcciones a las cantidades de orden cero ($\omega_o$ y $E^{(o)}$) son negativas y dependen únicamente de $\varepsilon^2$, aunque este último punto es simplemente consecuencia del hecho de que un cambio de $\varepsilon$ por $-\varepsilon$ en la Ec. (2) produce un potencial $\overline{V}(x)$ que se obtendría también de reflejar el potencial $V(x)$ sobre el eje V, i.e. $\overline{V}(x) = V(-x)$, y por ello tanto $\omega$ como los niveles de energía deben ser los mismos para ambos potenciales. Para que esto suceda, tanto $\omega=\omega(A,\varepsilon)$ como $E_n = E_n(\varepsilon)$ deben depender de $\varepsilon$ solamente a través de potencias pares de $\varepsilon$. En base a la semejanza indicada, se ocurre que la relación entre $\omega_2$ y $E_n^{(2)}$ sea la misma que entre $E^{(o)}$ y $\omega_o$, o sea

$$E_n^{(o)} + E_n^{(2)} = \hbar(\omega_o+\omega_2)(n + \frac{1}{2}) \quad , \tag{24}$$

de donde, utilizando las Ecs. (3b), (4) y (8), se obtiene que $E^{(2)}$ es

$$-\frac{5}{6}\;\frac{\varepsilon^2\hbar^2(n+\frac{1}{2})^2}{m}\qquad ,$$

expresión que, aunque tiene la dependencia funcional adecuada en los diversos parámetros (para n no demasiado pequeña), difiere del resultado (20) por un factor de 1/2. En suma, nuestra conjetura, la Ec. (24), no es cuantitativamente correcta.

Para encontrar los niveles cuantizados correctos utilizando los resultados clásicos, usamos la condición de cuantización de Bohr-Sommerfeld(6):

$$\oint p\,dx \;=\; h(n+\tfrac{1}{2})\quad ,\quad (n=0,\,1,\,2,\ldots)\quad , \tag{25}$$

donde p es el momento lineal clásico. Podemos reeescribir esta expresión en la forma

$$2m\int_0^{\tau/2} v^2 dt \;=\; h(n+\tfrac{1}{2})\quad , \tag{26}$$

donde v es la velocidad y $\tau$ el período de oscilación.

Para utilizar la Ec. (26) necesitamos conocer v en función de t. Sabemos que la trayectoria x(t) del oscilador anarmónico clásico, hasta segundo orden en $\varepsilon$, está dada por (ver Apéndice):

$$x \;=\; x_o + \varepsilon x_1 + \varepsilon^2 x_2\quad , \tag{27a}$$

donde

$$x_o \;=\; A\cos\omega t\quad , \tag{27b}$$

$$x_1 \;=\; A^2\left[\frac{1}{2}-\frac{1}{3}\cos\omega t-\frac{1}{6}\cos(2\omega t)\right]\quad , \tag{27c}$$

$$x_2 \;=\; A^3\left[-\frac{1}{3}+\frac{29}{144}\cos\omega t+\frac{1}{9}\cos(2\omega t)+\frac{1}{48}\cos(3\omega t)\right]\quad , \tag{27d}$$

y $\omega$ está dada por la Ec. (3b). v, que se obtiene de derivar la Ec. (27a) con respecto a t, se sustituye en (26), y después de cierta cantidad de álgebra se obtiene

$$A^2 \frac{1}{2}\omega - \varepsilon A^3 \frac{1}{3}\omega + \varepsilon^2 A^4 \frac{5}{16}\omega = \frac{\hbar}{m}(n + \frac{1}{2}) \quad . \tag{28}$$

El lado izquierdo de esta ecuación depende de la energía E via la amplitud A y la frecuencia $\omega$, y se trata de despejar E de esta ecuación, a fin de obtener E en función del número cuántico n. Sustituyendo la expresión (3b) para $\omega$ en (28), se obtiene:

$$\frac{1}{2}A^2 - \varepsilon\frac{1}{3}A^3 + \varepsilon^2\frac{5}{48}A^4 = \frac{\hbar}{m\omega_o}(n + \frac{1}{2}) \quad . \tag{29}$$

Por otra parte, en vista de la Ec. (2), la relación entre E y A es:

$$E = \frac{1}{2}kA^2 - \frac{1}{3}\varepsilon kA^3 \quad . \tag{30}$$

Para obtener la relación inversa, i.e. A en función de E, resolvemos (30) para A usando el método de aproximaciones sucesivas y obtenemos, a segundo orden en $\varepsilon$:

$$A = \left(\frac{2E}{k}\right)^{1/2} + \varepsilon\frac{1}{3}\frac{2E}{k} + \varepsilon^2\frac{5}{18}\left(\frac{2E}{k}\right)^{3/2} \quad . \tag{31}$$

Sustituyendo (31) en (29), se obtiene, nuevamente a segundo orden en $\varepsilon$, la ecuación para E:

$$E + \frac{5}{12}\varepsilon^2\frac{E^2}{m\omega_o^2} = \hbar\omega_o(n + \frac{1}{2}) \quad , \tag{32}$$

de donde, resolviendo para E por aproximaciones sucesivas, se obtiene

$$E = \hbar\omega_o(n + \frac{1}{2}) - \frac{5}{12}\varepsilon^2\frac{\hbar^2}{m}(n^2 + n + \frac{1}{4}) \quad . \tag{33}$$

Esta es la expresión a la que queríamos llegar. Si la comparamos con el resultado cuántico (20), vemos que casi coinciden, excepto por el término 1/4 en (33) y el 11/30 en (20). Esta diferencia se hace más insignificante a medida que n aumenta, y aún para n tan bajo como n = 3, las expresiones difieren en menos de 1%.

En conclusión, vemos que de los resultados para la trayectoria de un oscilador anarmónico clásico, obtenidos utilizando la teoría de perturbaciones clásica hasta segundo orden, obtenemos los niveles de energía de un oscilador anarmónico cuántico que se encuentran usando la teoría de perturbaciones cuántica hasta segundo orden (aparte de una pequeña discrepancia para los valores más bajos de n).

Como conclusión global, y en respuesta a la pregunta planteada en la Introducción, podemos decir que para las tres cantidades examinadas, $\bar{x}$, la frecuencia y los niveles de energía, existe una conexión significativa entre el caso clásico y el cuántico.

## APENDICE

En este apéndice mostraremos el método de perturbaciones que se usa para obtener una solución aproximada al movimiento de un oscilador anarmónico clásico[7].

La ecuación de movimiento para una partícula en el potencial (2) es la ecuación diferencial no lineal

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega_0^2 x - \varepsilon\omega_0^2 x^2 = 0 \quad , \tag{34}$$

y requerimos las condiciones iniciales $x(0) = A$, $\dot{x}(0) = 0$. Suponemos que la componente anarmónica en (2) es pequeña a fin de tratarla como una perturbación, y hacemos el siguiente cambio de variable independiente:

$$t = s(1 + \alpha\varepsilon + \beta\varepsilon^2) \quad , \tag{35}$$

donde $\alpha$ y $\beta$ son parámetros por determinar. Se obtiene entonces la ecuación diferencial no lineal

$$\frac{d^2x}{ds^2} + (1 + \alpha\varepsilon + \beta\varepsilon^2)^2 \omega_0^2 (x - \varepsilon x^2) = 0 \quad . \tag{36}$$

Como para $\varepsilon = 0$ la solución de (36) es

$$x_0 = A \cos \omega_0 s \quad , \tag{37}$$

proponemos para (36) una solución de la forma

$$x = x_0 + \varepsilon x_1 + \varepsilon^2 x_2 + \dots \tag{38}$$

Sustituyendo (38) en (36), y exigiendo que la ecuación resultante se cumpla para todo orden en $\varepsilon$, se obtienen las ecuaciones siguientes para $x_1$ y $x_2$ :

$$x_1'' + \omega_0^2 x_1 = f_1 \quad , \tag{39a}$$

con $$f_1 = \frac{1}{2}\,\omega_0^2 A^2 - 2\,\omega_0^2 \alpha A \cos(\omega_0 s) + \frac{1}{2}\,\omega_0^2 A^2 \cos(2\omega_0 s) \quad , \tag{39b}$$

y $$x_2'' + \omega_0^2 x_2 = f_2 \quad , \tag{40a}$$

con $$f_2 = 2\omega_0^2 A \cos(\omega_0 s) x_1 - 2\omega_0^2\, \beta A \cos(\omega_0 s) \quad . \tag{40b}$$

Resolvemos las ecuaciones lineales e inhomogéneas (39) y (40) por el método de variación de parámetros[8]. En el caso de la Ec. (39), encontramos que hay una solución particular de la forma

$$\nu_1 \cos(\omega_0 s) + \nu_2 \operatorname{sen}(\omega_0 s) \quad , \tag{41a}$$

donde $$\nu_1 = -\frac{1}{\omega_0} \int^s f \operatorname{sen}(\omega_0 s) ds \quad , \tag{41b}$$

$$\nu_2 = \frac{1}{\omega_0} \int^s f \cos(\omega_0 s) ds \quad . \tag{41c}$$

Al integrar el término $-2\omega_0^2 \alpha A \cos(\omega_0 s)$ de $f_1$, aparece en $\nu_2$ una contribución $-\alpha A \omega_0 s$, por lo que en la solución $x_1$ habrá un término $-\alpha A \omega_0 s \cdot \operatorname{sen}(\omega_0 s)$. Este aumenta sin límite a medida que transcurre el tiempo, comportamiento impermisible en un sistema oscilatorio como el que estamos considerando, por lo que, para eliminarlo, debemos hacer $\alpha = 0$. Obtenemos finalmente que la solución de (39) que cumple con las condiciones $x_1(0) = x_1'(0) = 0$ es

$$x_1 = A^2 \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{3} \cos \omega_0 s - \frac{1}{6} \cos(2\omega_0 s)\right] \quad . \tag{42}$$

De (40b) y (42), obtenemos que $f_2$ es

$$f_2 = -\frac{1}{3}\omega_o^2 A^3 + \left[\frac{5}{6}\omega_o^2 A^3 - 2\omega_o^2\,\beta A\right]\cos(\omega_o s) - \frac{1}{3}\omega_o^2 A^3\cos(2\omega_o s)$$

$$-\frac{1}{6}\omega_o^2 A^3\cos(3\omega_o s) \quad . \qquad (43)$$

Por un razonamiento análogo al del caso anterior, de la Ec. (39), a fin de eliminar en la solución de (40) términos con crecimiento ilimitado, se requiere que:

$$\frac{5}{6}\omega_o^2 A^3 - 2\omega_o^2\,\beta A = 0 \quad ,$$

o sea,

$$\beta = \frac{5}{12}A^2 \quad . \qquad (44)$$

Por el método de variación de parámetros, encontramos que la solución de (40) que cumple con $x_2(0) = x_2'(0) = 0$ es

$$x_2 = A^3\left[-\frac{1}{3} + \frac{29}{144}\cos(\omega_o s) + \frac{1}{9}\cos(2\omega_o s) + \frac{1}{48}\cos(3\omega_o s)\right] \quad . \qquad (45)$$

Por último, de (35) vemos que a segundo orden en $\varepsilon$

$$\omega_o s = \omega_o(1 - \beta\varepsilon^2)t \quad , \qquad (46)$$

de modo que, haciendo $\omega_2 \equiv -\omega_o\beta\varepsilon^2$ , $\omega \equiv \omega_1 + \omega_2$, y usando (44), tenemos

$$\omega_o s = (\omega_o + \omega_2)t = \omega t = \omega_o\left(1 - \frac{5}{12}\varepsilon^2 A^2\right)t \quad , \qquad (47)$$

expresión que podemos sustituir en (37), (42) y (45).

## REFERENCIAS


1. L.D. Landau y E.M. Lifshitz. Quantum Mechanics (Addison Wesley, Reading, Mass., 2a. Ed., 1965).
2. D.I. Blokhintsev. Principles of Quantum Mechanics (Allyn and Bacon, Boston, 1964). Secc. 48.
3. J.D. Jackson. Classical Electrodynamics (J. Wiley, N.Y., 1962), Cap. 9.
4. G. Herzberg. Spectra of Diatomic Molecules (Van Nostrand, N.Y. 1950).
5. N. Bohr, Z. Phys., 13 (1923) 117.
6. L.I. Schiff. Quantum Mechanics (McGraw-Hill, N.Y., 2a. Ed., 1955). Secc. 28.
7. Algunas referencias en conexión con este tema son: a) L.D. Landau y E.M. Lifshitz, Mechanics (Addison-Wesley, Reading, Mass., 1960); b) R. Bellman, Perturbation Techniques in Mathematics, Physics and Engineering (Holt, Rinehart & Winston, N.Y., 1964); c) N. Kryloff y N. Bogoliuboff, Introduction to Nonlinear Mechanics (Princeton University, Princeton, N.J., 1947); d) N. Minorsky, Introduction to Nonlinear Mechanics (Edwards, Ann Arbor, Michigan, 1947).
8. Ver, p. ej., S.L. Ross, Differential Equations (Blaisdell, N.Y., 1964).