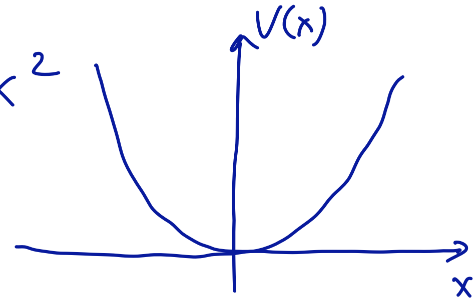
OSCILLATORE ARMONICO quantistico (1 dim)

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



Eq. Schrödinger indip. del tempo ($\hat{H}\psi = E\psi$)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi(x) = E\psi$$

Ridef. $\quad q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dx} = \frac{dq}{dx}\frac{d}{dq} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{d}{dq}$

$$\varphi(q) \equiv \psi\left(\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\, q\right) \quad \rightarrow \quad \psi(x) \equiv \varphi\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x\right)$$

$$\lambda = \frac{E}{\hbar\omega} \quad \rightarrow \quad E = \hbar\omega\lambda$$

$$-\frac{\cancel{\hbar^2}}{2\cancel{m}}\frac{\cancel{m}\omega}{\cancel{\hbar}}\frac{d^2}{dq^2}\varphi(q) + \frac{1}{2}\cancel{m}\omega^{\cancel{2}}\frac{\hbar}{\cancel{m\omega}} q^2 \varphi(q) = \hbar\omega\lambda\,\varphi(q)$$

$\cdot \frac{2}{\hbar\omega}$

$$\left(-\frac{d^2}{dq^2} + q^2 - 2\lambda\right)\varphi(q) = 0 \qquad (\star)$$

Cercheremo φ e λ che soddisfano l'eq. ($\star$).

$\rightarrow$ eq. diff. lineare ordinaria del 2° ordine $\rightarrow$

$\rightarrow$ due soluzioni indipendenti

(a queste vanno imposte le condizioni di accettabilità a $\pm\infty$)

$\rightarrow$ l'op. differenziale che agisce su φ è INVARIANTE per $q \mapsto -q$ $\quad$ ($\Leftarrow V(-x) = V(x)$) $\quad \Rightarrow$

$\Rightarrow$ se $\varphi(q)$ è soluzione, allora anche $\varphi(-q)$ è soluzione relativa allo stesso autovalore λ.

$\Rightarrow$ Sono soluzioni relative allo stesso autovalore λ anche

$$\varphi_\pm(q) \equiv \frac{\varphi(q) \pm \varphi(-q)}{2} \qquad \text{con } \varphi_\pm(-q) = \pm\varphi_\pm(q)$$

funz. a parità definita

$\rightarrow$ Le soluzioni possono essere cercate tra le funzioni a parità definita.

Condizioni di accettabilità (φ dovrebbe polinomialm. lim. per $x \to \pm\infty$).

$\downarrow$

Andamento asintotico a $q \to \pm\infty$

$$\left(-\frac{d^2}{dq^2} + q^2 - 2\lambda\right)\varphi(q) = \left(\pm\frac{d}{dq} + q\right)\left(\mp\frac{d}{dq} + q\right)\varphi(q) - 2\lambda\varphi(q)$$

$$\underbrace{\mp\frac{d}{dq}\left(q\,\varphi(q)\right) \pm q\,\frac{d\varphi(q)}{dq}}_{\mp\varphi(q) \mp \cancel{q\frac{d\varphi}{dq}} \pm \cancel{q\frac{d\varphi}{dq}}}$$

$$= \left[\left(\pm\frac{d}{dq} + q\right)\left(\mp\frac{d}{dq} + q\right) \mp 1 - 2\lambda\right]\varphi(q)$$

$$\underset{q\to\pm\infty}{\sim} \left(\pm\frac{d}{dq} + q\right)\left(\mp\frac{d}{dq} + q\right)\varphi(q)$$

$\Rightarrow$ eq. asintotica è $\left(\pm\frac{d}{dq} + q\right)\left(\mp\frac{d}{dq} + q\right)\varphi(q) = 0$

$\Rightarrow$ Le soluz. asintotiche si trovano cercando le soluzioni di $\left(\mp \frac{d}{dq} + q \right) \varphi^{\pm}_{as}(q) = 0 \quad \to \quad \frac{d}{dq}\varphi_{as}(q) = \pm q \, \varphi^{\pm}_{as}(q)$

$$\rightsquigarrow \quad \varphi^{\pm}_{as} = C_{\pm} \, e^{\pm q^2/2}$$

$\to$ noi sceglieremo le soluzioni con andam. asintotico $e^{-q^2/2}$ (le altre non sono accettabili).

Cerchiamo soluzioni nella forma

$$\varphi(q) = \Theta(q) \, e^{-q^2/2} \qquad (*)$$

Vediamo qual è l'eq. che Θ deve soddisfare: inseriamo $(*)$ in $(\star)$

$$\left(-\frac{d^2}{dq^2} + q^2 - 2\lambda \right) e^{-q^2/2} \Theta(q) =$$

$$= -\frac{d}{dq}\left[\frac{d}{dq}\left(e^{-q^2/2}\Theta \right) \right] + (q^2 - 2\lambda) e^{-q^2/2} \Theta =$$

$$= -\frac{d}{dq}\left[-q \, e^{-q^2/2} \Theta + e^{-q^2/2} \frac{d\Theta}{dq} \right] + (q^2 - 2\lambda) e^{-q^2/2} \Theta =$$

$$= \underline{e^{-q^2/2}} \Theta - \cancel{q^2 e^{-q^2/2}} \Theta + q \, \underline{e^{-q^2/2}} \frac{d\Theta}{dq} + q \, \underline{e^{-q^2/2}} \frac{d\Theta}{dq}$$
$$- \underline{e^{-q^2/2}} \frac{d^2\Theta}{dq^2} + \cancel{q^2 e^{-q^2/2}} \Theta - 2\lambda \underline{e^{-q^2/2}} \Theta$$

$$\Rightarrow \left[-\frac{d^2}{dq^2} + 2q \frac{d}{dq} + 1 - 2\lambda \right] \Theta(q) = 0 \qquad (\star')$$

- Ricordiamo che stiamo cercando soluzioni $\varphi(q) = \Theta(q) e^{-q^2/2}$ che siano a parità definita. $e^{-q^2/2}$ è pari $\Rightarrow$ Θ è parità definita

• Le soluz. di un'eq. diff. del tipo $(\star')$ ha una soluz. analitica : espandiamo Θ in serie

$$\Theta(q) = q^r \sum_{s=0}^{\infty} a_s q^{2s} = \sum_{s=0}^{\infty} a_s q^{2s+r} \qquad a_0 \neq 0$$

$r \in \mathbb{N}$
↳ Θ pari se r è pari
Θ dispari se r è dispari

Mettiamo $\Theta(q)$ in $(\star')$ e vediamo per quali valori di a_s (che determinano univocam. Θ) l'eq. è soddisfatta

$$\frac{d\Theta}{dq} = \sum_{s=0}^{\infty} a_s (2s+r) q^{2s+r-1}$$

$$\frac{d^2\Theta}{dq^2} = \sum_{s=0}^{\infty} a_s (2s+r)(2s+r-1) q^{2s+r-2}$$

$$\underbrace{-\sum_{s'=0}^{\infty} a_{s'}(2s'+r)(2s'+r-1) q^{2s'+r-2}}_{-a_0 r(r-1)q^{r-2} - \sum_{s'=1}^{\infty} a_{s'}(2s'+r)(2s'+r-1) q^{2s'+r-2}} + 2\sum_{s=0}^{\infty} a_s (2s+r) q^{2s+r} + (1-2\lambda)\sum_{s=0}^{\infty} a_s q^{2s+r} = 0$$

$s' = s+1$

$$-a_0 r(r-1) q^{r-2} - \sum_{s=0}^{\infty} a_{s+1} (2s+r+2)(2s+r+1) q^{2s+r} + \sum_{s=0}^{\infty} 2a_s (2s+r) q^{2s+r} + \sum_{s=0}^{\infty} (1-2\lambda) a_s q^{2s+r} = 0$$

$$-\underset{\neq 0}{a_0}\, r(r-1) q^{r-2} - \sum_{s=0}^{\infty} \left[-(2s+r+2)(2s+r+1) a_{s+1} + \left(2(2s+r) + 1 - 2\lambda \right) a_s \right] q^{2s+r} = 0$$

Una serie si annulla se sono zero tutti i coeff. $\Rightarrow$

$$\Rightarrow \begin{cases} r(r-1)=0 \quad \rightarrow \quad r = 0,\ 1 \\[2em] a_{s+1} = \dfrac{4s+2r+1-2\lambda}{(2s+r+2)(2s+r+1)}\, a_s \end{cases}$$

↳ condizione iterativa che permette di calcolare tutti gli a_s una volta fissato a_0

Es: $r=0$:

$$a_1 = \frac{1-2\lambda}{2} a_0$$

$$a_2 = \frac{5-2\lambda}{12} a_1 = \frac{(5-2\lambda)(1-2\lambda)}{24} a_0$$

$$\dots$$

$$a_i = (\dots)\, a_0$$

$$\dots$$

→ tutti gli a_s sono proporzionali ad a_0 (coeff. di normalizzaz.)

$$\Theta(q) = q^r \sum_{s=0}^{\infty} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{noti}}}{a_s}\, q^{2s}$$

⇒ la serie risolve eq. diff. (*')

Verifichiamo se la serie converge:

Per grandi s $\quad \dfrac{a_{s+1}}{a_s} \underset{s\to\infty}{\sim} \dfrac{1}{s}$ $\quad$ → serie converge

Infatti la serie ha lo stesso comportamento asintotico di

$$\sum_{s=0}^{\infty} \frac{q^{2s}}{s!} = e^{q^2}$$

↳ $a_s = 1/s!$ $\qquad \dfrac{a_{s+1}}{a_s} = \dfrac{1}{(s+1)!} \cdot s! = \dfrac{1}{s}$

$$\Rightarrow \Theta(q) \text{ ha andam. asintotico } \sim e^{q^2}$$

$$\Rightarrow \varphi(q) = e^{-q^2/2}\,\Theta(q) \sim e^{q^2/2}$$

ha andam. esponenziale per $q \to \pm\infty$ e non è accettabile

→ Sommare tutti gli infiniti termini (non-nulli) produce un andam. asintotico non accettabile

$\Rightarrow$ L'unico modo per avere un andamento asintotico polinomiale (che non rovini $e^{-\rho^2/2}$ in $\varphi(\rho)$) è che la serie sia troncata (allora θ sarà una somma finita di potenze, cioè un POLINOMIO)

$$a_{s+1} = \frac{4s+2r+1-2\lambda}{(2s+r+2)(2s+r+1)} \, a_s$$

$\hookrightarrow$ se per un qualche valore di s, diciamo $s=N+1$, il corrisp. coeff. è nullo, cioè $a_{N+1}=0$, allora $a_s=0 \quad s>N$.

$\Rightarrow$ Soluz. è accettabile solo per i valori di λ per cui $\exists N$ t.c. $a_{N+1}=0$ (allora la serie diventa un polinomio).

$$a_{N+1}=0 \quad (a_N \neq 0) \Rightarrow 4N+2r+1-2\lambda_{N,r}=0$$

$$\to \quad \lambda_{N,r} = \underbrace{r+2N}_{m \in \mathbb{N}} + \frac{1}{2} \qquad \begin{array}{l} r=0,1 \\ N \in \mathbb{N} \end{array}$$

$$E = \hbar\omega\lambda$$

$$\Rightarrow \quad E_m = \left(m+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad (\#)$$

Livelli energetici (autovalori di $\hat{H}$) dell'oscillatore armonico.)

Per ogni valore possibile (vedi (#)) di E (λ) c'è un'autofunzione associata (che sarà accettabile)

$\lambda = r + 2N + \frac{1}{2}$

$$a_{s+1} = \frac{4s+2r+1-2\lambda}{(2s+r+2)(2s+r+1)} a_s = \frac{4s+\cancel{2r}+\cancel{1}-\cancel{2r}-4N-\cancel{1}}{(2s+r+2)(2s+r+1)} a_s =$$

$$= \frac{-4(N-s)}{(2s+r+2)(2s+r+1)} a_s$$

$$\hookrightarrow a_s = \frac{-4(N-s+1)}{(2s+r)(2s+r-1)} a_{s-1} = \frac{(-4)^2(N-s+1)(N-s+2)}{(2s+r)(2s+r-1)(2s+r-2)(2s+r-3)} a_{s-2} =$$

$$= \dots = (-4)^s \frac{N!}{(N-s)!} \frac{r!}{(2s+r)!} a_0$$

$$\Theta_{N,r}(q) = \sum_{s=0}^{N} a_s q^{2s+r}$$ vengono chiamati POLINOMI di HERMITE

Possiamo così calcolare tutte le autofunzioni di $\hat{H}$

→ sono parametrizzate da $n \in \mathbb{N}$

Per ogni n → $E_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$, $\psi_n(x)$ $\quad \left(\varphi_n(q) = e^{-q^2/2}\Theta_n(q)\right)$

$n=0 \rightarrow N=0 \quad r=0 \qquad n = r+2N$

$$\varphi_0 = e^{-q^2/2} \cdot a_0 \rightarrow \psi_0(x) = a_0 \, e^{-\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)x^2}$$

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

STATO FONDAMENTALE (en. min.) dell' OSCILLATORE ARMONICO

(autofunz. PARI)

$$\left[\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \qquad \Delta p = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \rightarrow \Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2} \right]$$

$n=1 \rightarrow N=0 \quad r=1$

$$\varphi_1 = e^{-q^2/2}\, a_0\, q \quad \rightarrow \quad \psi_1(x) = a_0 \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x\, e^{-\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)x^2}$$

(autof. DISPARI)

$E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$ PRIMO LIVELLO ECCITATO

Le autofunzioni relative a n pari sono pari in $x \to -x$
" " " " dispari " dispari " " .

↳ risultato che vale per ogni potenziale 1d con
$V(-x) = V(x)$.