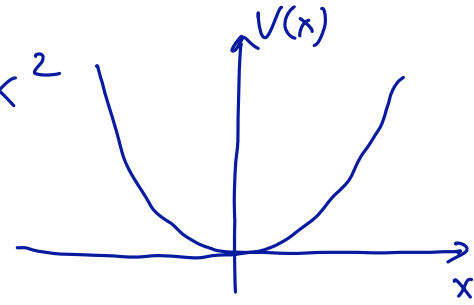


OSCILLATORE ARMONICO quantistico (1 dim)

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



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

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

Ridefiniamo $q \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \Rightarrow \frac{d}{dx} = \frac{dq}{dx} \frac{d}{dq} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{d}{dq}$

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

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

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

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

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

Cerchiamo 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 $q \mapsto -q$ ($\Leftarrow V(-x) = V(x)$) \Rightarrow

\Rightarrow se $\varphi(q)$ è soluzione, allora anche $\varphi(-q)$ è soluzione
 relativa allo stesso autovalore $\lambda \Rightarrow$ anche $\varphi_{\pm}(q) = \varphi(q) \pm \varphi(-q)$
 sono soluz. relative allo stesso λ . $\varphi_{\pm}(-q) = \varphi_{\pm}(q) \rightarrow$

$\rightarrow \varphi_{\pm}(q)$ sono due soluzioni a parità definite.

\Rightarrow se troviamo le SOLUZIONI A PARITÀ DEFINITA, poi possiamo
 esprimere le altre soluzioni come combinaz. lin. di pte.

\Rightarrow Cerchiamo le soluzioni a PARITÀ DEFINITA.

• Tra le soluz. dell'eq. diff. consideriamo ACCETTABILI quelle
 che son POLINOMIALMENTE LIMITATE a $q \rightarrow \pm \infty$

\hookrightarrow Vediamo l'andam. asintotico delle soluz. di (*).

Riscriviamo (*) in modo che sia evidente qual'è il termine
 dominante a $q \rightarrow \pm \infty$:

$$\begin{aligned}
 \left(-\frac{d^2}{dq^2} + q^2 - 2\lambda\right)\varphi(q) &= \left(+\frac{d}{dq} + q\right)\left(-\frac{d}{dq} + q\right)\varphi(q) - 2\lambda\varphi(q) \\
 &= \underbrace{+\frac{d}{dq}(q\varphi(q))}_{+\varphi(q)} \pm q \frac{d\varphi(q)}{dq} = \\
 &\quad \underbrace{-\cancel{q\frac{d\varphi}{dq}} + q\frac{d\varphi}{dq}}_{-\cancel{q\frac{d\varphi}{dq}} + q\frac{d\varphi}{dq}} =
 \end{aligned}$$

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

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

\Rightarrow Asintoticamente a $q \rightarrow \pm \infty$ l'equazione diventa

$$\left(+\frac{d}{dq} + q\right)\left(-\frac{d}{dq} + q\right)\varphi(q) = 0$$

Abbiamo scartato
 termini trascurabili
 a $q \rightarrow \pm \infty$

\rightarrow L'andam. asintotico delle soluz. di (*) si trova
 risolvendo

$$\left(\mp \frac{d}{dq} + q \right) \psi_{as}^{\pm}(q) = 0 \rightarrow \frac{d}{dq} \psi_{as}^{\pm}(q) = \pm q \psi_{as}^{\pm}(q)$$

$$\rightsquigarrow \psi_{as}^{\pm}(q) = C_{\pm} e^{\pm q^2/2}$$

→ noi ACCETTEREMO solo le soluz. con andamento asintotico $e^{-q^2/2}$

Esplacitiamo qto andamento, cercando soluzioni della forme

$$\psi(q) = \Theta(q) e^{-q^2/2} \quad (*)$$

Vediamo quale eq. $\Theta(q)$ deve soddisfare affinché $\psi(q)$ soddisfi (*):

inseriamo (*) in (*):

$$\begin{aligned} \left(-\frac{d^2}{dq^2} + q^2 - 2\lambda \right) e^{-q^2/2} \Theta(q) &= \\ &= -\frac{d}{dq} \left[\frac{d}{dq} (e^{-q^2/2} \Theta) \right] + (q^2 - 2\lambda) e^{-q^2/2} \Theta = \\ &= -\frac{d}{dq} \left[-q e^{-q^2/2} \Theta + e^{-q^2/2} \frac{d\Theta}{dq} \right] + (q^2 - 2\lambda) e^{-q^2/2} \Theta = \\ &= \underline{e^{-q^2/2}} \Theta - \cancel{q^2 e^{-q^2/2}} \Theta + q \underline{e^{-q^2/2}} \frac{d\Theta}{dq} + q \underline{e^{-q^2/2}} \frac{d\Theta}{dq} \\ &\quad - \underline{e^{-q^2/2}} \frac{d^2\Theta}{dq^2} + \cancel{q^2 e^{-q^2/2}} \Theta - 2\lambda \underline{e^{-q^2/2}} \Theta \end{aligned}$$

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

• Affinchi $\psi(q) = e^{-q^2/2} \Theta(q)$ sia ω parita definita, anche $\Theta(q)$ lo deve essere.

- Le soluzioni di un'eq. diff. del tipo $(*)'$ ha una soluz. ANALITICA: espandiamo quindi $\Theta(q)$ in serie:

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

$r \in \mathbb{N}$ Se $r \in \begin{cases} \text{PARI} \\ \text{DISPARI} \end{cases} \Rightarrow \Theta(q) \in \begin{cases} \text{PARI} \\ \text{DISPARI} \end{cases}$

Mettendo $\Theta(q)$ in $(*)'$, troviamo quali a_s permettono alle serie di risolvere l'equazione. Calcoliamo:

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

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

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

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

$s' = s+1$

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

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

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

Una serie si annulla se sono zero tutti i suoi coefficienti:

$$\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} r(r-1) = 0 \quad \rightarrow \quad r = 0, 1 \\ a_{s+1} = \frac{4s + 2r + 1 - 2\lambda}{(2s+r+2)(2s+r+1)} a_s \end{array} \right.$$

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

$$\begin{aligned} \text{Es: } r=0 : \quad a_1 &= \frac{1-2\lambda}{2} a_0 \\ a_2 &= \frac{5-2\lambda}{12} a_1 = \frac{(5-2\lambda)(1-2\lambda)}{24} a_0 \\ &\dots \\ a_i &= (\dots) a_0 \\ &\dots \end{aligned}$$

→ tutti gli a_s sono proporzionali ad a_0 (overall normalization)

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

↑ noti ⇒ la serie risolve eq. diff. (*)

Verifichiamo se la serie CONVERGE: per grandi s

$$\frac{a_{s+1}}{a_s} \underset{s \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{1}{s} \Rightarrow \text{serie } \underline{\text{converge}}$$

Infatti la serie ha lo stesso comportamento asintotico di

$$\sum_{s=0}^{\infty} \frac{q^{2s}}{s!} = e^{q^2} \quad \begin{array}{l} \downarrow a_s = 1/s! \\ \frac{a_{s+1}}{a_s} = \frac{1}{(s+1)!} \cdot s! = \frac{1}{s+1} \end{array}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \Theta(q) \text{ ha andam. asintotico } &\sim e^{q^2} \\ \Rightarrow \Theta(q) = e^{-q^2/2} \Theta(q) &\sim e^{q^2/2} \end{aligned}$$

ha andam. esponenziale in $q \rightarrow \pm\infty$ e non è accettabile

Sommare tutti gli INFINITI termini (non-nulli) produce un andamento asintotico NON-ACCETTABILE.

⇒ L'unico modo per avere un andamento asintotico polinomiale di $\Theta(q)$ (che non rovini $\Psi \sim e^{-q^2/2}$) è che la serie sia TRONCATA (in qto modo $\Theta(q)$ diventa una somma finita di potenze, cioè un POLINOMIO).

Ricordiamo.

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

Se \exists un valore di s , diciamo $s=N+1$, t.c. il corrispondente coefficiente è NULLO, cioè $a_{N+1}=0$, allora $a_s=0$ in $s>N$.

Se λ è un generico numero reale, qto non è possibile. Quindi esiste una soluzione ACCETTABILE di (*) solo per i λ t.c. $\exists N$ in cui $a_{N+1}=0$:

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

$$\Rightarrow \lambda_{N,r} = \underbrace{r + 2N + \frac{1}{2}}_{m \in \mathbb{N}} \quad \begin{array}{l} r=0,1 \\ N \in \mathbb{N} \end{array} \quad E = \hbar\omega\lambda$$

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

↙ AUTOVALORI dell' Energia dell' OSCILLATORE ARMONICO.

Per ogni valore possibile di $E(\lambda)$, vedi (#), c'è UNA autofunz. associata (accettabile) della forma

$$\psi_m(q) = a_0 e^{-q^2/2} \sum_{s=0}^N a_s q^{2s+r} \quad \begin{array}{l} \leftarrow \text{FUNZIONE} \in L^2(\mathbb{R}) \\ \rightarrow \text{SONO STATI FISICI} \end{array}$$

\uparrow
 $m=r+2N$

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

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

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

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

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

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

Posiamo così calcolare tutte le autofunzioni di \hat{H}^1
 \rightarrow sono parametrizzate da $n \in \mathbb{N}$

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

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

$$\varphi_0 = e^{-q^2/2} \cdot a_0$$

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

$$n = r + 2N$$

$$\psi_0(x) = a_0 e^{-\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)x^2}$$

STATO FONDAMENTALE (m. m' n.)
 dell' OSCILLATORE ARMONICO

(autofunz. PARI)

Qto pacchetto d'onda Gaussiano

non evolve in
 un oscillatore armonico
 a diff. della particella libera.

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

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

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

(enf. DISPARI)

$$E_1 = \frac{3}{2} \hbar \omega$$

PRIMO LIVELLO ECITATO

Le autofunzioni con n PARI (DISPARI) sono funzioni
PARI (DISPARI) $\mu \quad x \rightarrow -x$.

Extr: OSCILLATORE ARMONICO 2 dimensionale

Prendiamo un oscillatore armonico 2 d.m. Esso ha Hamiltoniana

$$H = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{P_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2) = H_x + H_y$$

↑
osc. arm. unidim.

Eq. Sch. indep. dal tempo (cioè eq. agli autovalori per \hat{H}):

$$(\hat{H}_x + \hat{H}_y) \psi_E(x, y) = E \psi_E(x, y)$$

Cerco soluzioni del tipo $\psi_E(x, y) = \varphi(x) \phi(y)$

$$\rightarrow (\hat{H}_x \varphi) \phi + \varphi (\hat{H}_y \phi) = E \varphi \phi$$

Se φ_n è autofun. di \hat{H}_x con autovalore E_n

e ϕ_m " " " \hat{H}_y " " E_m

allora $\varphi_n \phi_m$ è autof. di \hat{H} con autovalore $E = E_n + E_m$

$$\Rightarrow E_{n,m} = \hbar \omega (n + m + 1) \quad \rightarrow \text{Spettro } E_k = \hbar \omega (k + 1)$$

\leadsto ci sono autovalori degeneri

$$k \in \mathbb{N}$$

$$E_{0,0} = \hbar \omega$$

$$E_{0,1} = E_{1,0} = 2\hbar \omega$$

$$E_{0,2} = E_{1,1} = E_{2,0} = 3\hbar \omega$$

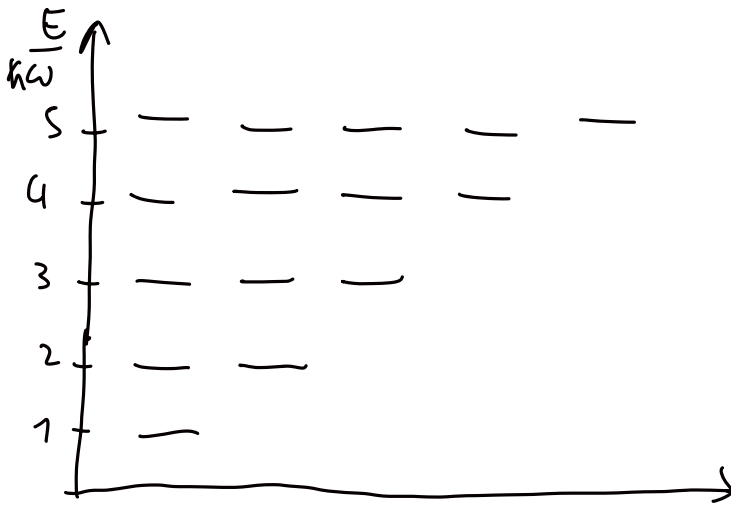
...

$$\left. \begin{array}{l} \text{degenerazione di } E_k = \\ = \# \text{ coppie di interi positivi la} \\ \text{cui somma è } k \\ = k + 1 \end{array} \right\}$$

Questo è un esempio in cui NON c'è una corrispondenza 1 a 1 tra livelli energetici e autostati dell'energia



↓
Rappresentato così



Nell'atomo di Idrogeno:

- livelli en. sono i possibili valori dell'energia (degeneri)
- autostati sono gli ORBITALI ATOMICI

$$E_m = \frac{E_1}{n^2} \quad E_1 = -13,6 \text{ eV}$$

