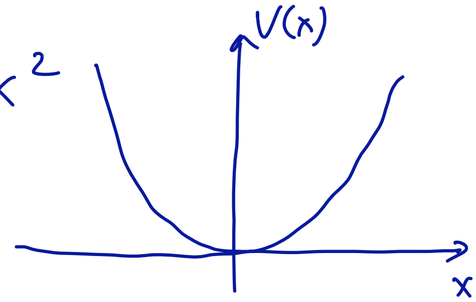
OSCILLATORE ARMONICO quantistico (1 dim)

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



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

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

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

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

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

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

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

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

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

→ eq. diff. lineare ordinaria del 2° ordine →

→ due soluzioni indipendenti

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

→ 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 definita.

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

$\Rightarrow$ Cerchiamo le soluzioni a PARITÀ DEFINITA.

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

↳ Vediamo l'andam. asintotico delle soluz. di $(\star)$.

Riscriviamo $(\star)$ in modo che sia evidente quali siano termini dominanti a $q \rightarrow \pm\infty$:

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\left(\mp \frac{d}{dq} + q\right)\varphi^{\pm}_{as}(q) = 0 \;\longrightarrow\; \frac{d}{dq}\varphi_{as}(q) = \pm q\, \varphi^{\pm}_{as}(q)$$

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

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

Esplicitiamo qto andamento, cercando soluzioni della forma

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

Vediamo quale eq. $\theta(q)$ deve soddisfare affinché $\varphi(q)$ soddisf. ($\star$):
inseriamo ($*$) in ($\star$):

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

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

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

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

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

- Affinché $\varphi(q) = e^{-q^2/2}\theta(q)$ sia a parità 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:

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

$r \in \mathbb{N}$ se r è $\left\langle\begin{array}{l}\text{PARI}\\\text{DISPARI}\end{array}\right. \Rightarrow \Theta(q)$ è $\left\langle\begin{array}{l}\text{PARI}\\\text{DISPARI}\end{array}\right.$

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

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

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

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

$s' = s+1$

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

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

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

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

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

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

Es: $r=0$:
$$a_1 = \frac{1-2\lambda}{2} a_0$$
$$a_2 = \frac{5-2\lambda}{12} a_1 = \frac{(5-2\lambda)(1-2\lambda)}{24} a_0$$
$$\cdots$$
$$a_i = (\ldots)\, a_0$$
$$\cdots$$

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

$$\Theta(q) = q^r \sum_{s=0}^{\infty} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{noti}}}{a_s} q^{2s} \quad \Rightarrow \text{la serie risolve eq. diff. } (*')\,.$$

Verifichiamo se la serie CONVERGE: per grandi s

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

Infatti la serie ha lo stesso comportamento asintotico di

$$\sum_{s=0}^{\infty} \frac{q^{2s}}{s!} = e^{q^2} \qquad \frac{a_{s+1}}{a_s} = \frac{1}{(s+1)!} \cdot s! = \frac{1}{s}$$
$$\hookrightarrow a_s = 1/s!$$

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

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

ha andam esponenziale $\forall\ q \to \pm\infty$ e $\underline{\text{non}}$ è accettabile

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

$\Rightarrow$ L'unico modo per avere un andamento asintotico polinomiale di $\Theta(q)$ (che non rovini $\varphi \sim e^{-q^2/2}$) 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 $a_s = 0$ per $s > N$.

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

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

$$\rightarrow \quad \lambda_{N,r} = \underbrace{r + 2N}_{n \in \mathbb{N}} + \frac{1}{2} \qquad \begin{matrix} r = 0, 1 \\ N \in \mathbb{N} \end{matrix}$$

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

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

AUTOVALORI dell'Energia dell'OSCILLATORE ARMONICO.

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

$$\varphi_n(q) = a_0 \, e^{-q^2/2} \sum_{s=0}^{N} a_s q^{2s+r}$$

$n = r + 2N$

FUNZIONE $\in L^2(\mathbb{R})$

$\rightarrow$ SONO STATI FISICI

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

(autofunz. PARI)

Qto pacchetto d'onda Gaussiano non evolve in un'oscillatore armonico a diff. dalla particelle libere.

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

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

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

(autof. DISPARI)

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

PRIMO LIVELLO ECCITATO

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

Extra: OSCILLATORE ARMONICO 2 dimensionale

Prendiamo un oscillatore armonico 2 dim. Esso ha Hamiltoniana

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 (x^2+y^2) = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{osc. arm. unidim.}}}{H_x} + H_y$$

Eq. Sch. indip. 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 $\psi_E(x,y) = \varphi(x)\,\phi(y)$

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

Se φ_n è autofunz. 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 $E = E_n + E_m$

$\Rightarrow E_{n,m} = \hbar\omega(n+m+1) \longrightarrow$ Spettro $E_K = \hbar\omega(K+1)$, $K \in \mathbb{N}$

$\rightsquigarrow$ ci sono autovalori degeneri

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

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

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

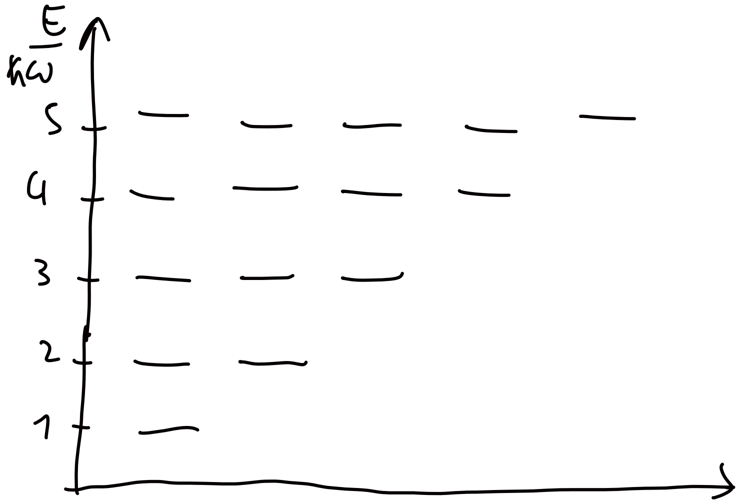
...

degenerazione di E_K = # coppie di interi positivi la cui somma è K $= K+1$

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

$\downarrow$

Rappresentato così



Nell'atomo di Idrogeno:

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

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