

Capitolo 11

Oscillatore Armonico¹

Consideriamo una particella che compie piccole oscillazioni unidimensionale (il cosiddetto **oscillatore armonico**). L'energia potenziale di tale particella è uguale a $\frac{1}{2}mw^2x^2$, dove w rappresenta nella meccanica classica la frequenza propria delle oscillazioni. L'hamiltoniana dell'oscillatore è quindi:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}mw^2x^2. \quad (11.1)$$

Poiché l'energia potenziale diventa infinita per $x = \pm\infty$, la particella può compiere soltanto un moto finito e, di conseguenza, **tutto lo spettro** energetico dell'oscillatore **sarà discreto**.

I livelli energetici dell'oscillatore armonico si possono determinare risolvendo **l'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo**:

$$H\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}mw^2x^2\psi = E\psi, \quad (11.2)$$

con le condizioni al contorno:

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi(x) = 0. \quad (11.3)$$

Noi invece risolviamo il problema della determinazione dei livelli energetici, e dei relativi autostati, seguendo un elegante **metodo operatoria sviluppato da Dirac**. A tale scopo è conveniente in primo luogo introdurre degli operatori adimensionali, dividendo entrambe i membri dell'equazione (11.1) per $\hbar w$:

$$\frac{H}{\hbar w} = \frac{p^2}{2m\hbar w} + \frac{mw^2x^2}{2\hbar w}. \quad (11.4)$$

¹(S23,L23,G5)

Definendo allora:

$$\hat{H} = \frac{H}{\hbar\omega},$$

$$\hat{p} = \frac{p}{\sqrt{\hbar m \omega}}, \quad (11.5)$$

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x,$$

possiamo scrivere la precedente equazione nella forma:

$$\hat{H} = \frac{1}{2}(\hat{p}^2 + \hat{x}^2). \quad (11.6)$$

Calcoliamo il commutatore tra \hat{p} e \hat{x} :

$$[\hat{p}, \hat{x}] = \frac{1}{\sqrt{\hbar m \omega}} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} [p, x] = \frac{1}{\hbar} (-i\hbar), \quad (11.7)$$

ossia:

$$[\hat{p}, \hat{x}] = -i. \quad (11.8)$$

In termini degli operatori \hat{p} ed \hat{x} risulta poi conveniente definire due operatori non hermitiani:

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} + i\hat{p}), \\ a^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} - i\hat{p}), \end{aligned} \quad (11.9)$$

o, più semplicemente:

$$\begin{aligned} a &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + i \frac{p}{m\omega} \right), \\ a^+ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - i \frac{p}{m\omega} \right). \end{aligned} \quad (11.10)$$

Facendo uso della regola di commutazione canonica (11.8) possiamo calcolare il commutatore tra a e a^+ :

$$[a, a^+] = \frac{1}{2}[\hat{x} + i\hat{p}, \hat{x} - i\hat{p}] = \frac{1}{2} (+i[\hat{p}, \hat{x}] - i[\hat{x}, \hat{p}]) = i[\hat{p}, \hat{x}], \quad (11.11)$$

e dunque:

$$[\mathbf{a}, \mathbf{a}^+] = \mathbf{1}. \quad (11.12)$$

Esprimiamo l'operatore \hat{H} in termini degli operatori a e a^+ . A tale scopo invertiamo le equazioni (11.9) per ottenere:

$$\begin{aligned}\hat{x} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^+), \\ \hat{p} &= \frac{1}{\sqrt{2}i}(a - a^+).\end{aligned}\tag{11.13}$$

Si trova allora:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2}(\hat{p}^2 + \hat{x}^2) = \frac{1}{4} [-(a - a^+)^2 + (a + a^+)^2] = \\ &= \frac{1}{4}(aa^+ + a^+a) \cdot 2 = \frac{1}{2}(aa^+ + a^+a) = \\ &= \frac{1}{2}([a, a^+] + 2a^+a) = \frac{1}{2}(1 + 2a^+a),\end{aligned}\tag{11.14}$$

ossia:

$$\hat{H} = a^+a + \frac{1}{2}.\tag{11.15}$$

Equivalentemente:

$$H = (a^+a + \frac{1}{2})\hbar\omega.\tag{11.16}$$

Per comprendere il significato degli operatori a e a^+ supponiamo di conoscere un autovalore E_n dell'energia ed il corrispondente autostato $|n\rangle$:

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle.\tag{11.17}$$

Consideriamo quindi l'applicazione di H allo stato ottenuto applicando l'operatore a ad $|n\rangle$:

$$Ha|n\rangle = [H, a]|n\rangle + aH|n\rangle = ([H, a] + E_na)|n\rangle.\tag{11.18}$$

Calcoliamo il commutatore $[H, a]$:

$$\begin{aligned}[H, a] &= \hbar\omega[a^+a + \frac{1}{2}, a] = \hbar\omega[a^+a, a] = \\ &\hbar\omega(a^+aa - aa^+a) = \hbar\omega[a^+, a]a = -\hbar\omega a.\end{aligned}\tag{11.19}$$

Allora:

$$Ha|n\rangle = (E_n - \hbar\omega)a|n\rangle.\tag{11.20}$$

Pertanto, se $|n\rangle$ è un autostato dell'hamiltoniana con autovalore E_n allora anche $a|n\rangle$ è un autostato dell'hamiltoniana con autovalore $E_n - \hbar\omega$. Per questa ragione l'operatore a è anche detto *operatore di distruzione*.

Similmente possiamo considerare l'applicazione di H sullo stato $a^+|n\rangle$:

$$Ha^+|n\rangle = [H, a^+]|n\rangle + a^+H|n\rangle = ([H, a^+] + E_na^+)|n\rangle. \quad (11.21)$$

Il commutatore di H con a^+ risulta:

$$\begin{aligned} [H, a^+] &= \hbar\omega[a^+a + \frac{1}{2}, a^+] = \hbar\omega[a^+a, a^+] = \\ &= \hbar\omega(a^+aa^+ - a^+a^+a) = \hbar\omega a^+[a, a^+] = \hbar\omega a^+, \end{aligned} \quad (11.22)$$

o anche:

$$[H, a^+] = -[H, a]^+ = \hbar\omega a^+. \quad (11.23)$$

Allora:

$$Ha^+|n\rangle = (E_n + \hbar\omega)a^+|n\rangle, \quad (11.24)$$

ossia se $|n\rangle$ è un autostato dell'hamiltoniana con autovalore E_n allora anche $a^+|n\rangle$ è un autostato dell'hamiltoniana con autovalore $E_n + \hbar\omega$. Per questa ragione l'operatore a^+ è anche detto *operatore di creazione*.

Questi risultati indicano che i livelli di energia sono discreti e differiscono tra loro per un numero intero di unità $\hbar\omega$.

Un'altra importante osservazione è che gli autovalori dell'energia devono essere sempre positivi, ed anzi, più precisamente, maggiori od uguali di $\hbar\omega/2$. Si ha infatti:

$$\begin{aligned} E_n &= \langle n|H|n\rangle = \hbar\omega\langle n|(a^+a + \frac{1}{2})|n\rangle = \\ &= \hbar\omega(\langle n|(a^+a)|n\rangle + \frac{1}{2}) = \hbar\omega(\langle n'|n'\rangle + \frac{1}{2}) \geq \frac{1}{2}\hbar\omega, \end{aligned} \quad (11.25)$$

giacché per qualunque ket $|n'\rangle$ si ha $\langle n'|n'\rangle \geq 0$ (e con $|n'\rangle = a|n\rangle$). Deve dunque esistere uno **stato fondamentale**, il cui vettore di stato indicheremo con $|0\rangle$, la cui energia E_0 è maggiore o uguale di $\hbar\omega/2$. Poiché poi l'operatore a , se applicato ad un autostato, produce l'autostato di energia inferiore, deve valere la relazione:

$$a|0\rangle = 0. \quad (11.26)$$

L'energia del livello fondamentale può essere ora facilmente calcolata:

$$H|0\rangle = \hbar\omega(a^+a + \frac{1}{2})|0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega|0\rangle, \quad (11.27)$$

ossia:

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \quad (11.28)$$

I livelli di energia dell'oscillatore armonico risultano dunque dati da:

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega, \quad (11.29)$$

con $n=0,1,2,\dots$

L'equazione (11.16) implica che gli autostati $|n\rangle$ dell'hamiltoniana sono autostati simultanei dell'operatore a^+a . L'espressione (11.29) per gli autovalori dell'energia E_n indica inoltre che i corrispondenti autovalori dell'operatore a^+a sono i numeri interi n . Per tale ragione l'operatore hermitiano a^+a è anche detto **operatore numero**:

$$\mathbf{N} = \mathbf{a}^+ \mathbf{a}, \quad (11.30)$$

e si ha:

$$\mathbf{N}|n\rangle = n|n\rangle. \quad (11.31)$$

Discutiamo ora come gli autostati $|n\rangle$ dell'hamiltoniana possono essere costruiti a partire dall'autostato $|0\rangle$ corrispondente allo stato fondamentale dell'oscillatore. Il ruolo degli operatori a e a^+ come operatori di distruzione e costruzione rispettivamente implica che gli stati $a|n\rangle$ ed $a^+|n\rangle$ coincidono, a meno di una costante di normalizzazione, con gli autostati $|n-1\rangle$ ed $|n+1\rangle$. Possiamo pertanto scrivere:

$$\begin{cases} a|n\rangle = c_n|n-1\rangle, \\ a^+|n-1\rangle = d_n|n\rangle. \end{cases} \quad (11.32)$$

Per ricavare le costanti c_n e d_n osserviamo innanzitutto che:

$$c_n = \langle n-1|a|n\rangle = \langle n|a^+|n-1\rangle^* = d_n^*. \quad (11.33)$$

Inoltre, applicando l'operatore numero allo stato $|n\rangle$ troviamo:

$$N|n\rangle = n|n\rangle = a^+a|n\rangle = c_na^+|n-1\rangle = c_nd_n|n\rangle = |c_n|^2|n\rangle, \quad (11.34)$$

ossia:

$$|c_n|^2 = n. \quad (11.35)$$

Scegliendo per convenzione c_n reale e positivo (tale scelta essendo sempre possibile giacché i vettori di stato sono definiti a meno di un fattore di fase arbitrario) vediamo allora che $c_n = \sqrt{n}$. In definitiva abbiamo dimostrato le relazioni:

$$\begin{cases} a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \\ a^+|n-1\rangle = \sqrt{n}|n\rangle. \end{cases} \quad (11.36)$$

Queste relazioni consentono in particolare di costruire tutti gli autostati dell'hamiltoniana applicando in successione l'operatore a^+ allo stato fondamentale $|0\rangle$. Otteniamo:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= a^+|0\rangle \\ |2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}a^+|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^+)^2|0\rangle \\ |3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}a^+|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3!}}(a^+)^3|0\rangle \\ &\dots \\ |n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n|0\rangle \end{aligned} \quad (11.37)$$

Il metodo operatoriale di Dirac consente anche di ricavare le **f.d.o nello spazio delle coordinate corrispondenti agli autostati dell'energia**.

Consideriamo in primo luogo lo stato fondamentale definito dall'equazione (11.26). Moltiplicando a sinistra questa equazione per il $\langle x'|$ troviamo:

$$\langle x'|a|0\rangle = \sqrt{\frac{mw}{2\hbar}}\langle x'|(x + \frac{ip}{mw})|0\rangle = 0. \quad (11.38)$$

Ricordando le espressioni degli operatori x e p nella rappresentazione delle coordinate, otteniamo l'equazione:

$$\sqrt{\frac{mw}{2\hbar}}(x' + \frac{\hbar}{mw}\frac{d}{dx'})\psi_0(x') = 0, \quad (11.39)$$

dove si è indicata con:

$$\psi_0(x') = \langle x'|0\rangle. \quad (11.40)$$

l'autofunzione corrispondente allo stato fondamentale dell'oscillatore.

Ponendo:

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{mw}} \quad \text{e} \quad \xi = \frac{x'}{x_0}, \quad (11.41)$$

si può riscrivere l'equazione (11.39) nella forma:

$$a\psi_0(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right)\psi_0(\xi) = 0. \quad (11.42)$$

Per inciso vediamo che **nella rappresentazione delle coordinate, in termini della variabile adimensionale $\xi = x/x_0$, gli operatori di creazione e distruzione si esprimono come:**

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right) \\ a^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right) \end{aligned} \quad (11.43)$$

L'equazione (11.42) si integra facilmente per separazione di variabili:

$$\frac{d\psi_0}{d\xi} = -\xi\psi_0 \rightarrow \frac{d\psi}{\psi_0} = -\xi d\xi \rightarrow \ln\psi_0 = -\frac{\xi^2}{2} + \text{cost}, \quad (11.44)$$

ossia:

$$\psi_0(\xi) = Ce^{-\xi^2/2}. \quad (11.45)$$

La costante C è determinata dalla **condizione di normalizzazione**:

$$\langle 0|0\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \langle 0|x'\rangle \langle x'|0\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' |\psi_0(x')|^2 = 1. \quad (11.46)$$

Troviamo in tal modo:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx' |\psi_0(x')|^2 = |C|^2 x_0 \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi e^{-\xi^2} = |C|^2 x_0 \sqrt{\pi} = 1, \quad (11.47)$$

da cui, scegliendo C reale e positivo:

$$C = \frac{1}{\pi^{1/4}} \sqrt{x_0}. \quad (11.48)$$

Pertanto l'autofunzione normalizzata corrispondente allo stato fondamentale dell'oscillatore armonico è:

$$\psi_0 = \left(\frac{1}{\pi^{1/4}}\right) e^{-\xi^2/2}, \quad \xi = \frac{x}{x_0}. \quad (11.49)$$

Le equazioni (11.37) consentono poi di valutare le **autofunzioni dell'energia per gli stati eccitati**. Per la generica f.d.o dell'autostato $|n\rangle$ possiamo scrivere:

$$\psi_n(x') = \langle x'|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle x'| (a^+)^n |0\rangle, \quad (11.50)$$

da cui, utilizzando la rappresentazione espressa nell'equazione (11.43) per l'operatore a^+ ricaviamo:

$$\begin{aligned} \psi_n(\xi) &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n \psi_0(\xi) = \\ &= \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{2^n x_0 n!}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\xi^2/2}. \end{aligned} \quad (11.51)$$

Le funzioni $H_n(\xi)$ definite dall'equazione:

$$\left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\xi^2/2} = H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad (11.52)$$

sono dei polinomi di grado n in ξ contenenti potenze della stessa parità del numero n . Queste funzioni sono dette **polinomi di Hermite**. L'equazione (11.51) si scrive allora, in termini di questi polinomi:

$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{2^n x_0 n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}. \quad (11.53)$$

Oscillatore Armonico

■ Polinomi di Hermite

```
Do[Print["H[" , n , ", x] = ", HermiteH[n, x]], {n, 0, 5}]

H[0, x] = 1
H[1, x] = 2 x
H[2, x] = -2 + 4 x^2
H[3, x] = -12 x + 8 x^3
H[4, x] = 12 - 48 x^2 + 16 x^4
H[5, x] = 120 x - 160 x^3 + 32 x^5
```

■ Funzioni d' onda

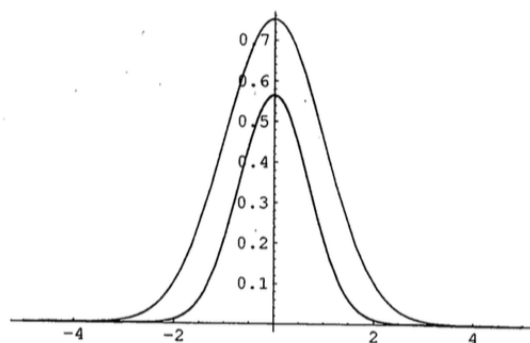
```
psi[n_, x_] := 1/Sqrt[Pi^(1/2) 2^n n!] HermiteH[n, x] Exp[-x^2/2]
```

■ Normalizzazione

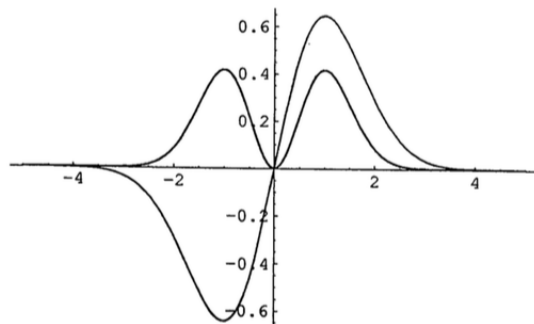
```
n = 0;
Integrate[Expand[psi[n, x]^2], {x, -Infinity, Infinity}]
1
```

■ Grafici

```
n=0;
Plot[{psi[n, x], psi[n, x]^2}, {x, -5, 5}, PlotStyle -> {RGBColor[1, 0, 0], RGBColor[0, 0, 1]}]
```



```
n=1;
Plot[{psi[n,x],psi[n,x]^2}, {x,-5,5},PlotStyle -> {RGBColor[1,0,0], RGBColor[0,0,1]}]
```



```
n=2;
Plot[{psi[n,x],psi[n,x]^2}, {x,-5,5},PlotStyle -> {RGBColor[1,0,0], RGBColor[0,0,1]}]
```

