Lezione 9

Oscillatore armonico quantistico

9.1 Formule

Hamiltoniana

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{U} \tag{9.1}$$

con

$$\hat{K} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \qquad \hat{U} = \frac{1}{2}kx^2 \tag{9.2}$$

Autovalori

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad n = 0, 1, 2, \ldots \qquad \text{con} \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \tag{9.3}$$

Autofunzioni

$$\psi_n(x) = N_n H_n(\alpha x) e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} \tag{9.4}$$

con

$$\alpha = \sqrt[4]{\frac{mk}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \qquad N_n = \sqrt{\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}}} \tag{9.5}$$

$H_n(z)$ sono i polinomi di Hermite.

$$\begin{aligned}
H_0(x) &= 1 && (9.6)\\
H_1(x) &= 2x && (9.7)\\
H_2(x) &= 4x^2 - 2 && (9.8)\\
H_3(x) &= 8x^3 - 12x && (9.9)\\
H_4(x) &= 16x^4 - 48x^2 + 12 && (9.10)\\
H_5(x) &= 32x^5 - 160x^3 + 120x && (9.11)\\
&\dots
\end{aligned}$$

Operatori di scala

Detto $|n\rangle$ un autostato dell'oscillatore armonico quantistico, gli operatori di scala connettono stati a diverso numero quantico n

$$\hat{a}\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \qquad \hat{a}^\dagger\,|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \tag{9.12}$$

con

$$\left[\hat{a}, \hat{a}^\dagger\right] = \hat{1} \tag{9.13}$$

ed avendo definito

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right) = \frac{\alpha}{\sqrt{2}}\left(x + \frac{1}{\alpha^2}\frac{d}{dx}\right) \tag{9.14}$$

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right) = \frac{\alpha}{\sqrt{2}}\left(x - \frac{1}{\alpha^2}\frac{d}{dx}\right) \tag{9.15}$$

Inoltre si ha che

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a}^\dagger + \hat{a}\right) = \frac{1}{\alpha\sqrt{2}}\left(\hat{a}^\dagger + \hat{a}\right) \tag{9.16}$$

$$\hat{p} = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\left(\hat{a}^\dagger - \hat{a}\right) = \frac{i\hbar\alpha}{\sqrt{2}}\left(\hat{a}^\dagger - \hat{a}\right) \tag{9.17}$$

9.2 Esercizio # 1: Autofunzioni.

Dato l'oscillatore armonico quantistico, detti ψ_n gli autostati:
i) costruire $\psi_1(x)$ a partire da $\psi_0(x)$ mediante l'uso degli operatori di scala, ii) verificare l'ortogonalità $\langle\psi_0|\psi_1\rangle$, $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$, $\langle\psi_2|\psi_0\rangle$

9.3 Esercizio # 2: Oscillatore.

Una particella è soggetta a un potenziale armonico. Se al tempo $t = 0$ si trova nello stato:

$$\psi(x,0) = A\left[3\psi_0(x) + 4\psi_1(x)\right] \tag{9.18}$$

i) trovare A,
ii) trovare $\psi(x,t)$,
iii) trovare $|\psi(x,t)|^2$,
iv) trovare $\langle \hat{x}(t)\rangle$ e verificare il teorema di Ehrenfest per la derivata temporale di $\langle \hat{p}\rangle$,
v) se misuriamo l'energia della particella al tempo t, che valori troviamo? Con che probabilità?

SOLUZIONE:

$$A = \frac{1}{5} \tag{9.19}$$

$$\psi(x,t) = \frac{1}{5}\left[3e^{-i\frac{\omega}{2}t}\psi_0(x) + 4e^{-i\frac{3}{2}\omega t}\psi_1(x)\right] \tag{9.20}$$

$$\langle \hat{x}(t)\rangle = \frac{24}{25}\cos(\omega t)\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \tag{9.21}$$

$\frac{\hbar\omega}{2}$ con prob. $\frac{9}{25}$, $\frac{3\hbar\omega}{2}$ con prob. $\frac{16}{25}$

9.4 Esercizio # 3: Oscillatore: stato fondamentale

Nello stato fondamentale dell'oscillatore armonico, determinare la probabilità di trovare la particella fuori dalla regione classicamente permessa.

SOLUZIONE: 15.86%

9.5 Esercizio # 4: Molecola di HI

La molecola di HI è formata da un atomo di Idrogeno ed uno di Iodio. La differenza fra le masse dei due nuclei è tale per cui è possibile pensare che sia il solo Idrogeno a muoversi. L'atomo di Idrogeno compie intorno alla posizione di equilibrio un moto armonico. La forza di richiamo armonica ha una costante di $k = 313.8\,\mathbf{Nm^{-1}}$**.**
i) Trovare le possibili energie di vibrazione della molecola.
ii) Verificare che lo spettro sia equispaziato in energia e trovare la lunghezza d'onda che corrisponde alla differenza delle energie di due livelli successivi.
iii) Calcolare la probabilità di trovare la molecola HI con una lunghezza di legame di 10% **superiore al valore di riposo che è** $160\,$**pm quando il sistema si trova nello stato di più bassa energia dello spettro vibrazionale.**

SOLUZIONE: $0.285\,\mathrm{eV}$, $\lambda = 4.35\,\mu\mathrm{m}$, $3\,\%$

9.6 Esercizio # 5: Uso degli operatori di scala

Utilizzando gli operatori di scala, trovare il valor medio di x^2 sul terzo stato eccitato dell'oscillatore armonico quantistico $|3\rangle$.

SOLUZIONE: $\frac{7}{2}\frac{\hbar}{m\omega}$