Capitolo 8

OSCILLATORE ARMONICO

8.1 Potenziale di oscillatore armonico

L'oscillatore armonico riveste un ruolo di grande importanza, in quanto sistemi stabili nei più svariati campi della fisica possono effettuare oscillazioni armoniche. Infatti un sistema che si trovi in uno stato di equilibrio stabile effettua oscillazioni di tipo armonico se viene sollecitato da una debole perturbazione. Consideriamo per semplicità un sistema unidimensionale sottoposto ad un generico potenziale V(q), dotato di minimo nel punto q_0 . Il sistema, inizialmente in equilibrio in q_0 , viene perturbato debolmente in modo che si sposta poco dalla posizione di equilibrio. Il moto del sistema si determina sviluppando V(q) in serie di Taylor intorno al punto q_0 . Poichè $V'(q_0) = 0$ lo sviluppo si può arrestare al primo ordine non nullo,

$$V(q) = V(q_0) + \frac{1}{2}V''(q)|_{q=q_0}(q-q_0)^2.$$

Ponendo q_0 nell'origine, $V(q_0)=0$ e $V''(q_0)=m\omega^2$ il potenziale si scrive nella forma

$$V(q) = \frac{1}{2}m\omega^2 q^2,$$

che genera piccole oscillazioni di un corpo di massa m
 con frequenza angolare ω .

Fenomeni in cui si presentano oscillazioni armoniche sono: oscillazioni di elettroni nel campo coulombiano dell'atomo, vibrazioni di atomi in una molecola, vibrazioni di ioni in un reticolo cristallino, oscillazioni del campo elettromagnetico in una cavità, ecc.

8.2 Oscillatore armonico classico

L'Hamiltoniana di un oscillatore armonico classico è:

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

Dalle equazioni del moto di Hamilton si trova la soluzione generale: $q(t) = q_i cos(\omega t + \phi)$ dove q_i e ϕ sono determinate dalle condizioni iniziali. Quindi si calcola l'energia

$$E = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 \tag{8.1}$$

$$= \frac{1}{2}m\omega^2 q_i^2 \sin^2(\omega t + \phi) + \frac{1}{2}m\omega^2 q_i^2 \cos^2(\omega t + \phi)$$
 (8.2)

$$= \frac{1}{2}m\omega^2 q_i^2. \tag{8.3}$$

Al variare delle condizioni iniziali l'energia varia con continuità ed assume sempre valori positivi.

8.3 Oscillatore armonico quantistico

Dal punto di vista quantistico dobbiamo sostituire le variabili numeriche classiche q e p con gli operatori \mathbf{q} e \mathbf{p} , che soddisfano le regole di commutazione $[\mathbf{q}, \mathbf{p}] = \mathbf{i}\hbar$. L'operatore Hamiltoniano

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\mathbf{q}^2 \tag{8.4}$$

determina con i suoi autovalori ed autovettori le proprietà dell'oscillatore quantistico. L'equazione di Schrödinger

$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\mathbf{q}^2\right)|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \tag{8.5}$$

si può risolvere con un metodo algebrico (proposto da P.A.M. Dirac). Introduciamo i tre operatori

$$\mathbf{a} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\mathbf{q} + \frac{i\mathbf{p}}{m\omega} \right) \tag{8.6}$$

$$\mathbf{a}^{\dagger} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\mathbf{q} - \frac{i\mathbf{p}}{m\omega} \right) \tag{8.7}$$

$$\mathbf{N} \equiv \mathbf{a}^{\dagger} \mathbf{a}, \tag{8.8}$$

che soddisfano le regole di commutazione

$$[\mathbf{a}, \mathbf{a}^{\dagger}] = \mathbf{1} \qquad [\mathbf{N}, \mathbf{a}] = -\mathbf{a} \qquad [\mathbf{N}, \mathbf{a}^{\dagger}] = \mathbf{a}^{\dagger}.$$
 (8.9)

L'equazione di Schrödinger si riscrive nella forma

$$\hbar\omega(\mathbf{N} + \frac{1}{2})|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \tag{8.10}$$

 ${\bf H}$ ed ${\bf N}$ hanno gli stessi autostati $|\psi_n>\equiv |n>$. Se indichiamo con n gli autovalori di ${\bf N}$ allora gli autovalori di ${\bf H}$ sono $E_n=\hbar\omega(n+\frac{1}{2})$.

L'operatore N ha semplici proprietà:

- $\mathbf{a}^+|n>$ è autostato di **N** appartenente all'autovalore n+1
- \bullet $\mathbf{a}|n>$ è autostato di $\mathbf N$ appartenente all'autovalore n-1
- gli autovalori n sono tutti i numeri interi positivi compreso lo zero.

Le prime due proprietà sono semplici conseguenze delle regole di commutazione Eq.(8.9); la terza proprietà si dimostra come segue. Intanto $n \geq 0$ poichè $< n|\mathbf{N}|n> = < n|\mathbf{a}^+\mathbf{a}|n> = ||\mathbf{a}|n>||^2 \geq 0$. Inoltre, dato un autostato n, applicando ripetutamente l'operatore \mathbf{a} si arriva necessariamente ad uno stato $\mathbf{a}^m|n> \sim |n-m> = 0$ che implica n=m ed essendo m intero anche n intero. Chiamiamo |0> lo stato con autovalore nullo. Applicando ripetutamente l'operatore \mathbf{a}^\dagger si possono costruire tutti gli autostati di \mathbf{N} :

$$\begin{aligned} |1> &= \mathbf{a}^{\dagger}|0> \\ |2> &= \frac{\mathbf{a}^{\dagger}}{\sqrt{2}}|1> = \frac{(\mathbf{a}^{\dagger})^2}{\sqrt{2}}|0> \\ |3> &= \frac{\mathbf{a}^{\dagger}}{\sqrt{3}}|2> = \frac{(\mathbf{a}^{\dagger})^3}{\sqrt{3!}}|0> \\ &\dots \\ |n> &= \frac{(\mathbf{a}^{\dagger})^n}{\sqrt{n!}}|0> \end{aligned}$$

Questi sono anche autostati di H ed i rispettivi autovalori sono

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$$
 $(n = 0, 1, 2, 3, ...)$ (8.11)

La principale caratteristica dello spettro di energia è che i livelli sono equidistanti l'uno dall'altro con una distanza pari a $\hbar\omega$ e ciò rende facilmente identificabili le oscillazioni collettive negli spettri nucleari, atomici e molecolari. L'energia $\hbar\omega$ prende il nome di quanto di eccitazione perchè è l'unità di energia (più piccola) con cui si costruisce l'intero spettro dell'oscillatore armonico. L'applicazione di ${\bf a}^+$ (a) aggiunge (sottrae) un quanto allo stato |n>, da cui il nome di operatore di creazione (annichilazione). L'operatore ${\bf N}$ conta il numero di quanti nello stato |n> e prende il nome di operatore numero. Lo stato fondamentale |0>, che è il vuoto di quanti, ha energia non nulla, pari a $\frac{1}{2}\hbar\omega$, chiamata energia di punto zero. Questa è una conseguenza del principio di indeterminazione $\Delta q \Delta p \geq \hbar/2$, che per lo stato fondamentale dell'oscillatore armonico vale con il segno uguale (minima indeterminazione). Infatti consideriamo il valor medio della hamiltoniana in uno stato generico

$$<\mathbf{H}> = \frac{<\mathbf{p^2}>}{2\mathbf{m}} + \frac{1}{2}\mathbf{m}\omega^2 < \mathbf{q^2}>.$$
 (8.12)

Sostituiamo $<\mathbf{p^2}>$ con $(\hbar^2/4<\mathbf{q^2}>)$ e quindi cerchiamo il minimo (il che equivale a determinare lo stato fondamentale) che si ottiene per $<\mathbf{q^2}>=\hbar^2/4\mathbf{m^2}\omega^2$. Questo valore, sostituito a sua volta in $<\mathbf{H}>$ da giusto l'energia di punto zero, $\frac{1}{2}\hbar\omega$.

8.3.1 Autofunzioni dell'oscillatore armonico

Per calcolare le autofunzioni dell'oscillatore armonico $\psi_n(q) \equiv \langle q|n \rangle$ seguiamo un metodo iterativo che parte dalla determinazione di $\psi_0(q) \equiv \langle q|0 \rangle$. Consideriamo la relazione che definisce lo stato fondamentale come vuoto dei quanti d'azione

$$\mathbf{a}|0>=0. \tag{8.13}$$

Moltiplicando a sinistra per < q | e riesprimendo ${\bf a}$ in funzione di ${\bf p}$ e ${\bf q}$ otteniamo:

$$\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} < q|\mathbf{q} + \frac{i\mathbf{p}}{m\omega}|0> = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} (q + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dq})\psi_0(q) = 0.$$

Questa \grave{e} un'equazione differenziale del primo ordine che si integra facilmente. La soluzione con il corretto fattore di normalizzazione \grave{e}

$$\psi_0(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}q^2}$$

Una volta determinata la funzione d'onda dello stato fondamentale, le altre funzioni d'onda possono essere ricavate in maniera iterativa applicando ripetutamente a $\psi_0(q)$ l'operatore \mathbf{a}^+ espresso in termini

 di \mathbf{p} e $\mathbf{q},$ con delle semplici operazioni di derivazione. Come illustrazione vediamo come si genera il primo stato eccitato. Applicando l'eq. (8.7) si ottiene:

$$\psi_1(q) = \langle q|1\rangle = \langle q|\mathbf{a}^{\dagger}|0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(q - \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dq}\right) \psi_0(q)$$

$$= \left[\frac{4}{\pi} \left(\frac{m\omega}{\hbar^3}\right)^3\right]^{1/4} q e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}q^2}$$
(8.14)

$$= \left[\frac{4}{\pi} \left(\frac{m\omega}{\hbar^3}\right)^3\right]^{1/4} q \ e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}q^2} \tag{8.15}$$

Iterativamente si generano tutte le altre autofunzioni dell'oscillatore armonico. Queste formano un insieme completo ortonormale.