UN ESEMPIO DI CALCOLO: L'OSCILLATORE ARMONICO

Formalismo di Schrödinger

L'Hamiltoniana classica per l'oscillatore armonico è data da:

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

Quantisticamente $p \to -i\hbar \frac{d}{dx}$ da cui

$$H = -\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

L'equazione di Schrödinger

$$H\psi = E\psi$$

diventa quindi:

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

ossia

$$\psi'' + \frac{2mE}{h^2}\psi - \frac{m^2\omega^2 x^2}{h^2}\psi = 0$$

e posto $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ e $\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$ si ha un'equazione differenziale del secondo ordine, omogenea, a coefficienti non costanti:

(*) $$\psi'' + k^2\psi - \alpha^2 x^2\psi = 0\,.$$

Per la soluzione dell'equazione (*) cerchiamo prima la soluzione asintotica, cioè la soluzione per $|x| \to \infty$. In questo caso l'equazione diventa:

(**) $$\psi'' - \alpha^2 x^2\psi = 0$$

e la soluzione deve essere del tipo $\psi(x) = e^{-\gamma x^2}$. Inoltre, poiché le soluzioni dell'equazione di Schrödinger sono funzioni che devono soddisfare la condizione di normalizzazione

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1\,,$$

deve essere $\gamma > 0$ in quanto deve essere $\lim_{|x|\to\infty} \psi(x) = 0$. Si ha:

$$\psi'(x) = -2\gamma x e^{-\gamma x^2}$$

$$\psi''(x) = -2\gamma\left(e^{-\gamma x^2} - 2\gamma x^2 2 e^{-\gamma x^2}\right) = 4\gamma^2 x^2 e^{-\gamma x^2} - 2\gamma e^{-\gamma x^2}$$

Per $|x| \to \infty$ in $\psi''(x)$ prevale il termine $4\gamma^2 x^2 e^{-\gamma x^2}$ quindi, sostituendo in (**) deve essere:

$$4\gamma^2 x^2 e^{-\gamma x^2} - \alpha^2 x^2 e^{-\gamma x^2} = 0 \quad \text{da cui segue} \quad \gamma = \frac{\alpha}{2}.$$

La soluzione di (*) deve quindi scriversi nella forma:

$$\psi(x) = \chi(x) e^{-\frac{\alpha}{2}x^2}.$$

Per quanto detto sopra sull'andamento all'infinito della soluzione, $\chi(x)$ può anche divergere, ma meno rapidamente di $e^{\frac{\alpha}{2}x^2}$. Derivando si ha:

$$\psi'(x) = \chi'(x) e^{-\frac{\alpha}{2}x^2} - \alpha x \chi(x) e^{-\frac{\alpha}{2}x^2}$$

$$\psi''(x) = \chi''(x)e^{-\frac{\alpha}{2}x^2} - \alpha x\chi'(x)e^{-\frac{\alpha}{2}x^2} - \alpha\chi(x)e^{-\frac{\alpha}{2}x^2} - \alpha x\chi'(x)e^{-\frac{\alpha}{2}x^2} + \alpha^2x^2\chi(x)e^{-\frac{\alpha}{2}x^2} =$$

$$= \left[\chi''(x) - 2\alpha x\chi'(x) + (\alpha^2x^2 - \alpha)\right]e^{-\frac{\alpha}{2}x^2}$$

Sostituendo nella (*) si ha

$$\left[\chi''(x) - 2\alpha x\chi'(x) + (\alpha^2x^2 - \alpha)\chi(x)\right]e^{-\frac{\alpha}{2}x^2} + (k^2 - \alpha^2x^2)\chi(x)e^{-\frac{\alpha}{2}x^2} = 0$$

da cui segue

(***) $$\chi'' - 2\alpha x\chi' + (k^2 - \alpha)\chi = 0$$

(per snellire le scritture si è omessa la dipendenza da x). Dell'equazione (***) cerchiamo una soluzione per serie, cioè una soluzione della forma:

$$\chi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n .$$

Derivando si ha:

$$\chi'(x) = \sum_{n=1}^{\infty} nc_n x^{n-1} \qquad e \qquad \chi''(x) = \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1)c_n x^{n-2}$$

e sostituendo nella (***) si ottiene:

$$\sum_{n=2}^{\infty} n(n-1)c_n x^{n-2} - 2\alpha\sum_{n=1}^{\infty} nc_n x^n + (k^2 - \alpha)\sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n = 0 .$$

Riaggiustando gli indici si ottiene:

$$\sum_{n=0}^{\infty} (n+2)(n+1)c_{n+2} x^n - 2\alpha\sum_{n=0}^{\infty} nc_n x^n + (k^2 - \alpha)\sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n = 0$$

da cui

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left[(n+2)(n+1)c_{n+2} - 2\alpha nc_n + (k^2 - \alpha)c_n\right]x^n = 0 .$$

Affinché la somma sia identicamente nulla per ogni valore di x deve essere

$$(n+2)(n+1)c_{n+2} - 2\alpha nc_n + (k^2 - \alpha)c_n = 0$$

ovvero:

(****) $$c_{n+2} = \frac{\alpha(2n+1) - k^2}{(n+2)(n+1)}c_n .$$

Una volta che siano assegnati i valori di c_0 e c_1 la serie risulta completamente determinata.

Per la simmetria di H la funzione ψ o è pari o è dispari, per cui deve essere:

o $c_0 = 0$ e $c_1 \neq 0$ se la funzione è dispari

o $c_0 \neq 0$ e $c_1 = 0$ se la funzione è pari.

Ricordiamo inoltre che la serie deve potersi risommare in modo che la funzione diverga meno rapidamente di $e^{\frac{\alpha}{2}x^2}$. Per valutare ciò analizziamo il rapporto $\frac{c_{n+2}}{c_n}$ per n grande. Si ha $\frac{c_{n+2}}{c_n} \approx \frac{2\alpha}{n}$.

Sviluppando in serie $e^{\alpha x^2}$ si ha:

$$e^{\alpha x^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(\alpha x^2\right)^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n x^{2n}}{n!} = \sum_{n=0,2}^{\infty} \frac{\alpha^{n/2} x^n}{(n/2)!}$$

L'ultima somma è stata ottenuta riaggiustando gli indici dopo aver osservato che le potenze di x sono tutte pari (la funzione è pari). La scrittura n = 0,2 significa che n è un numero pari. Per questa serie si ha:

$$\frac{c_{n+2}}{c_n} = \frac{\alpha^{\frac{n+2}{2}}}{\left(\frac{n+2}{2}\right)!} \cdot \frac{\left(\frac{n}{2}\right)!}{\alpha^{\frac{n}{2}}} = \frac{\alpha}{\left(\frac{n}{2}+1\right)} = \frac{2\alpha}{(n+2)}$$

e per n grande $\frac{c_{n+2}}{c_n} \approx \frac{2\alpha}{n}$. Quindi la serie, all'infinito, si comporta come $e^{\alpha x^2}$ e ciò contraddice l'ipotesi che non potesse divergere più rapidamente di $e^{\frac{\alpha}{2}x^2}$. La funzione $\chi(x)$ non può quindi essere ottenuta come somma della serie, può però essere espressa mediante un polinomio in quanto nei coefficienti è ancora presente un parametro libero, k. Deve quindi esistere un indice s per il quale $c_{s+2} = 0$ con $c_s \neq 0$. Per la (****) si ha: $\alpha(2s+1) - k^2 = 0$ da cui segue:

$$k^2 = k_s^2 = \alpha(2s+1)$$

ma $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ e $\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$ e quindi $\frac{2mE_s}{\hbar^2} = \frac{m\omega}{\hbar^2}(2s+1)$ e quindi

$$E_s = \hbar\omega\left(s + \frac{1}{2}\right) \quad \text{con} \quad s \in \mathrm{N}.$$

Questo risultato indica chiaramente che l'energia dell'oscillatore armonico è quantizzata e che il valore minimo possibile è dato da $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$. Questo valore minimo è conforme al principio di indeterminazione.

Esplicitando k, i polinomi in questione sono polinomi di grado s i cui coefficienti sono dati da:

$$c_{n+2} = \frac{\alpha(2n+1) - \alpha(2s+1)}{(n+2)(n+1)} c_n = \frac{2(n-s)}{(n+2)(n+1)} \alpha c_n$$

Costruiamo alcuni di questi polinomi:

$\chi_0(x) = c_0$

$\chi_1(x) = c_0 + c_1 x$

$\chi_2(x) = c_0 + c_1 x + c_2 x^2$

$\chi_3(x) = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + c_3 x^3$

$\chi_4(x) = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + c_3 x^3 + c_4 x^4$

Determiniamo alcuni polinomi di grado pari, dovendo essere $c_0 \neq 0$ e $c_1 = 0$ si ha:

$$\chi_0(x) = c_0$$

$\chi_2(x) = c_0 + c_2 x^2$ ma $s = 2 \Rightarrow n = 0 \Rightarrow c_2 = \frac{2(0-2)}{2}\alpha c_0 = -2\alpha c_0$ e quindi

$$\chi_2(x) = c_0\left(1 - 2\alpha x^2\right)$$

$\chi_4(x) = c_0 + c_2 x^2 + c_4 x^4$ ma $s = 4 \Rightarrow \begin{cases} n = 0 \Rightarrow c_2 = \frac{2(0-4)}{2}\alpha c_0 = -4\alpha c_0 \\ n = 2 \Rightarrow c_4 = \frac{2(2-4)}{3 \cdot 4}\alpha c_2 = -\frac{1}{3}\alpha(-4\alpha)c_0 = \frac{4}{3}\alpha^2 c_0 \end{cases}$ e quindi

$$\chi_4(x) = c_0\left(1 - 4\alpha x^2 + \frac{4}{3}\alpha^2 x^4\right)$$

Determiniamo ora alcuni di quelli di grado dispari, essendo $c_0 = 0$ e $c_1 \neq 0$, si ha:

$$\chi_1(x) = c_1 x$$

$\chi_3(x) = c_1 x + c_3 x^3$ ma $s = 3 \Rightarrow n = 1 \Rightarrow c_3 = \frac{2(1-3)}{2 \cdot 3}\alpha c_1 = -\frac{2}{3}\alpha c_1$ e quindi

$$\chi_3(x) = c_1 x\left(1 - \frac{2}{3}\alpha x^2\right).$$

Questi polinomi erano noti ai matematici in quanto sono un caso dei polinomi di Hermite (1822-1901) che in generale si scrivono:

$$H_n(t) = (-1)^n e^{t^2} \frac{d^n}{dt^n} e^{-t^2}$$

che nel nostro caso sono (posto $t = \sqrt{\alpha}x$):

$$H_n(x) = \left(-\frac{1}{\sqrt{\alpha}}\right)^n e^{\alpha x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-\alpha x^2}$$

e quindi:

$$H_0(x) = e^{\alpha x^2} e^{-\alpha x^2} = 1$$

$$H_1(x) = \left(-\frac{1}{\sqrt{\alpha}}\right) e^{\alpha x^2} \frac{d}{dx} e^{-\alpha x^2} = -\frac{1}{\sqrt{\alpha}} e^{\alpha x^2} (-2\alpha x) e^{-\alpha x^2} = 2\sqrt{\alpha}x$$

$$H_2(x) = \left(-\frac{1}{\sqrt{\alpha}}\right)^2 e^{\alpha x^2} \frac{d}{dx}\left(\frac{d}{dx} e^{-\alpha x^2}\right) = \frac{1}{\alpha} e^{\alpha x^2} \frac{d}{dx}\left(-2\alpha x e^{-\alpha x^2}\right) = \frac{1}{\alpha} e^{\alpha x^2} (-2\alpha)\left(e^{-\alpha x^2} - 2\alpha x^2 e^{-\alpha x^2}\right) =$$

$$= 2(2\alpha x^2 - 1)$$

$$H_3(x) = -12x\left(1 - \frac{2}{3}\alpha x^2\right)$$

Si nota quindi che sono gli stessi a meno di costanti moltiplicative, la soluzione di (***) può quindi essere scritta nella forma

$$\chi_n(x) = N_n H_n(x)$$

dove N_n sono delle opportune costanti. Le funzioni d'onda sono quindi date:

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

Le costanti N_n si determinano dalla relazione

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \, ,$$

si ottiene:

$$N_n = (-1)^n \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}$$

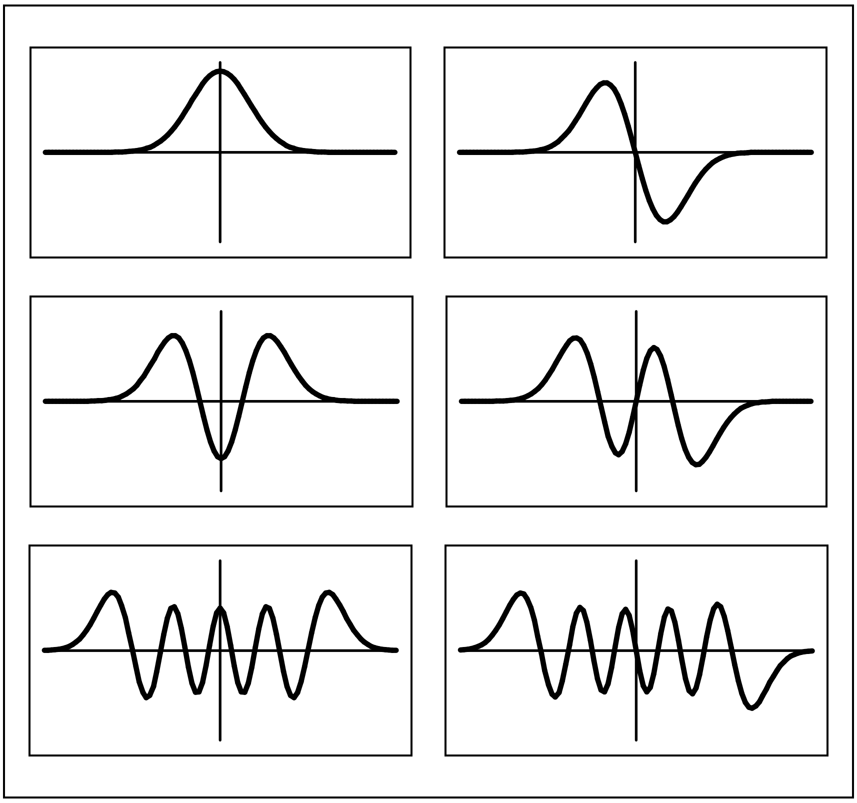

Fig.1 - I grafici rappresentano, nell'ordine da sinistra a destra e dall'alto in basso, le funzioni d'onda dell'oscillatore armonico $\psi_0(x)$, $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$, $\psi_3(x)$, $\psi_8(x)$, $\psi_9(x)$ corrispondenti agli autovalori dell'energia: E_0, E_1, E_2, E_3, E_8, E_9.