Università degli Studi di Perugia - Corso di Laurea Triennale in Fisica

Corso di

MECCANICA QUANTISTICA

Oscillatore armonico isotropo in coordinate sferiche

La Hamiltoniana dell'oscillatore armonico isotropo

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 \ ,$$

in coordinate sferiche, dove

$$p^2 = p_r^2 + \frac{L^2}{r^2} \ ,$$

si può scrivere scrivere così

$$H = \frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{L^2}{2\mu r^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 \tag{1}$$

ed ha equazione agli autovalori

$$H u_{E\ell m}(r,\theta,\varphi) = E u_{E\ell m}(r,\theta,\varphi) \ .$$

L' autofunzione $u_{E\ell m}(r,\theta,\varphi)$ allora si fattorizza secondo la

$$u_{E\ell m}(r,\theta,\varphi) = \phi_{E\ell}(r) Y_\ell^m(\theta,\varphi) = \frac{\chi_{E\ell}(r)}{r} Y_\ell^m(\theta,\varphi) \ , \tag{2}$$

dove $Y_\ell^m(\theta,\varphi)$ sono le armoniche sferiche e la funzione della sola r, $\chi_{E\ell m}(r)$, soddisfa all' equazione radiale

$$\frac{d^2\chi_{E\ell}}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E - \frac{\mu\omega^2 r^2}{2} - \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2\mu r^2}\right]\chi_{E\ell} = 0 \ , \tag{3}$$

dove $\ell \in \mathbb{N}$ ed $-\ell \le m \le \ell$ ($\hbar m$ è l'autovalore di L_z).

1 Andamenti asintotici

L'Hamiltoniana (1) ammette solo stati legati e quindi le autofunzioni (2) sono normalizzabili

$$1 = (u,u) = \int d\Omega Y_\ell^{m*} Y_\ell^m \int_0^\infty dr r^2 |\phi|^2 \ .$$

Dalla ortonormalità delle armoniche sferiche segue poi che

$$\int_0^\infty dr |\chi|^2 = 1 \ . \tag{4}$$

Affinchè l'integrale in (4) esista, la funzione χ deve tendere a zero per $r \to \infty$. Inoltre, dato che l' autofunzione u deve essere finita ovunque, e quindi anche in $r = 0$, χ deve tendere a zero anche per $r \to 0$, almeno come r.

Introducendo le variabili adimensionate ρ ed ϵ secondo le

$$\rho = \alpha r \ , \quad \alpha = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}} \ , \quad \epsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

la (3) diventa

$$\frac{d^2\chi_{E\ell}}{d\rho^2} + \left[\epsilon - \rho^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right]\chi_{E\ell} = 0 \ . \tag{5}$$

Per $\rho \to 0$, si ha l' equazione asintotica

$$\frac{d^2\chi_{E\ell}}{d\rho^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\chi_{E\ell} = 0 \ ,$$

le cui soluzioni sono potenze

$$\chi_{E\ell} \sim \rho^{-\ell} \ , \qquad \chi_{E\ell} \sim \rho^{\ell+1} \ ,$$

la prima delle quali deve essere scartata perchè diverge per $\rho \to 0$.

Per $\rho \to \infty$ l'equazione asintotica è

$$\frac{d^2\chi_{E\ell}}{d\rho^2} - \rho^2\chi_{E\ell} = 0 \ ,$$

la cui soluzione normalizzabile è della forma

$$\chi_{E\ell} \sim e^{-\frac{\rho^2}{2}} \ .$$

2 Soluzione

Mettendo in evidenza gli andamenti asintotici per $\rho \to 0$ e per $\rho \to \infty$, la soluzione di (3) può essere scritta nella forma

$$\chi_{E\ell}(\rho) = \rho^{\ell+1} e^{-\frac{\rho^2}{2}} G_{E\ell}(\rho) \ . \tag{6}$$

dove $G(\rho)$ può essere espansa in serie di Maclaurin essendo $\rho = 0$ un punto di singolarità Fuchsiano della (3). Inserendo (6) in (5) si ottiene l'equazione soddisfatta da $G_{E\ell}(\rho)$

$$\rho G'' + 2(\ell + 1 - \rho^2)G' + (\epsilon - 2\ell - 3)\rho G = 0 \ . \tag{7}$$

Posto

$$G(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \ ,$$

dalla (7) si ottiene

$$\sum_{k=2}^{\infty} k(k-1)a_k\rho^{k-1} + 2(\ell+1)\sum_{k=1}^{\infty} k a_k \rho^{k-1} - 2\sum_{k=1}^{\infty} k a_k\rho^{k+1} + (\epsilon - 2\ell - 3)\sum_{k=0}^{\infty} a_k\rho^{k+1} = 0 \ . \tag{8}$$

Prendendo il limite $\rho \to 0$ in (8) sopravvive solo il temine

$$2(\ell+1)a_1 = 0 \ ,$$

da cui $a_1 = 0$.

Riportando tutto a somme da 0 a ∞, con la potenza ρ^{k+1} si ha

$$\begin{aligned}
\rho G'' &= \sum_{k=2}^{\infty} k(k-1)a_k\rho^{k-1} = \sum_{k=0}^{\infty}(k+1)(k+2)a_{k+2}\rho^{k+1} \\
G' &= \sum_{k=1}^{\infty} k a_k\rho^{k-1} \quad \text{dato che } a_1 = 0 \quad = \sum_{k=2}^{\infty} k a_k \rho^{k-1} = \sum_{k=0}^{\infty}(k+2)a_{k+2}\rho^{k+1} \\
\rho^2 G' &= \sum_{k=0}^{\infty} k a_k \rho^{k+1} \ , \qquad \rho G = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^{k+1}
\end{aligned}$$

Quindi la (8) diviene

$$\sum_{k=0}^{\infty} \rho^{k+1} \left[(k+2)(k+2\ell+3)a_{k+2} - (2k+2\ell+3-\epsilon)a_k\right] = 0 \ .$$

e la formula di ricorrenza è

$$\frac{a_{k+2}}{a_k} = \frac{(2k+2\ell+3-\epsilon)}{(k+2)(2\ell+k+3)} \ , \qquad k = 0, 1, 2, \ldots \ .$$

Per grandi k, va come

$$\frac{a_{k+2}}{a_k} \xrightarrow[k\to\infty]{} \frac{2}{k} \ .$$

Poiché $a_1 = 0$, la serie ha solo le potenze pari e per $\rho \to \infty$ ha lo stesso andamento di e^{ρ^2}. Infatti

$$e^{\rho^2} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\rho^2)^k}{k!} = \sum_{k \text{ pari}}^{\infty} \frac{\rho^k}{(k/2)!} \equiv \sum_{k \text{ pari}}^{\infty} b_k \rho^k \quad \Longrightarrow \quad \frac{b_{k+2}}{b_k} = \frac{(k/2)!}{(k/2+1)!} = \frac{2}{k+2} \xrightarrow[k\to\infty]{} \frac{2}{k} \ .$$

Si deve quindi troncare la serie per $k = 2n_r$, ($n_r = 0, 1, 2, \ldots$). Ciò avviene se si sceglie il parametro ϵ secondo la

$$\epsilon = \epsilon_r = 4n_r + 2\ell + 3 \ , \tag{9}$$

da cui seguono gli autovalori

$$E_N = \left(N + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega \ , \qquad N = 2n_r + \ell = 0, 1, 2, \ldots$$

Sostituendo la (9) nell'equazione per G, (7), si ha

$$\rho G'' + 2(\ell + 1 - \rho^2)G' + 4n_r \rho G = 0 \ .$$

Passando alla variabile $x = \rho^2$

$$\frac{dG}{d\rho} = \frac{dx}{d\rho}\frac{dG}{dx} = 2\sqrt{x}\frac{dG}{dx} \ , \qquad \frac{d^2G}{d\rho^2} = \left(\frac{dx}{d\rho}\right)^2 \frac{d^2G}{dx^2} + \frac{d^2x}{d\rho^2}\frac{dG}{dx} = 4x\frac{d^2G}{dx^2} + 2\frac{dG}{dx}$$

si ottiene per $G(x)$ l'equazione

$$x\frac{d^2G}{dx^2} + (\ell + \frac{3}{2} - x)\frac{dG}{dx} + n_r G = 0 \ .$$

I polinomi di Laguerre di grado m sono le soluzioni polinomiali dell' equazione differenziale

$$x\frac{d^2L_m^\beta}{dx^2} + (\beta + 1 - x)\frac{dL_m^\beta}{dx} + mL_m^\beta = 0 \ .$$

Inoltre valgono le seguenti espressioni

$$L_m^\beta = \sum_{k=0}^{m} \begin{pmatrix} m-\beta \\ m-k \end{pmatrix} \frac{(-x)^k}{k!}$$

$$L_0^\alpha(x) = 1 \ , \quad L_1^\alpha(x) = 1 + \alpha - x \ , \quad L_2^\alpha(x) = \frac{1}{2}(\alpha+1)(\alpha+2) - (\alpha+2)x + \frac{x^2}{2} \ ,$$

$$\int_0^\infty dx\, e^{-x}\, x^\alpha L_m^\alpha(x) L_{m'}^\alpha(x) = \frac{\Gamma(\alpha+m+1)}{m!}\delta_{m,m'} \ ,$$

dove Γ è la funzione Gamma di Euler

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty dt\, t^{z-1} e^{-t} \ , \qquad \mathrm{Re}[z] > 0 \ .$$

Quindi

$$G(x) \propto L_{n_r}^{\ell+\frac{1}{2}}(x) \implies G(\rho) \propto L_{n_r}^{\ell+\frac{1}{2}}(\rho^2)$$

Riassumendo

$$\chi_{n_r\ell}(\rho) = N_{n_r\ell}\rho^{\ell+1} e^{-\frac{1}{2}\rho^2} L_{n_r}^{\ell+\frac{1}{2}}(\rho^2)$$

Determiniamo ora la costante di normalizzazione $N_{n_r\ell}$

$$\int_0^\infty dr|\chi|^2 = 1 \implies \frac{N^2}{\alpha}\int_0^\infty d\rho\rho^{2\ell+2} e^{-\rho^2} L_{n_r}^{\ell+\frac{1}{2}}(\rho^2) L_{n_r}^{\ell+\frac{1}{2}}(\rho^2) = \frac{N^2}{2\alpha}\int_0^\infty dx x^{\ell+\frac{1}{2}} e^{-x} L_{n_r}^{\ell+\frac{1}{2}}(x) L_{n_r}^{\ell+\frac{1}{2}}(x)$$
$$= \frac{\Gamma(\ell+1/2+n_r+1)}{2\alpha n_r!}\cdot N^2 = 1 \ .$$

Vale la proprietà

$$\Gamma(\ell+1/2+n_r+1) = \frac{\sqrt{\pi}}{2^{\ell+n_r+1}}\cdot(2\ell+2n_r+1)!! \implies \frac{\sqrt{\pi}(2\ell+2n_r+1)!!}{\alpha 2^{\ell+n_r+2} n_r!}\cdot N^2 = 1 \ ,$$

inoltre si ha

$$2^{n_r} n_r! = (2n_r)!! \ ,$$

cossicché

$$N_{n_r\ell} = \sqrt{\frac{\alpha 2^{\ell+2}(2n_r)!!}{\sqrt{\pi}(2\ell+2n_r+1)!!}} \ .$$

3 Degenerazione del livello N-esimo

Per N fissato pari

$$\ell = N - 2n_r \implies \ell = N, N-2, N-4, \ldots, 0 \ ,$$

e inoltre

$$n_r = 0, 1, 2, \ldots, \frac{N}{2} \ .$$

Posto $M = N/2$, si ha che, per ogni ℓ, ho $2\ell+1$ stati al variare di m, quindi la degenerazione per N pari è

$$\sum_{\ell=0,2,\ldots,N-2,N}(2\ell+1) = \sum_{n_r=0}^{M}(2N-4n_r+1) = (2N+1)(M+1) - 4\frac{M(M+1)}{2} = \frac{(N+1)(N+2)}{2}$$

Per N fissato dispari $\ell = N, N-2, N-4, \ldots, 1$ e

$$n_r = 0, 1, 2, \ldots, \frac{N-1}{2} \ .$$

Posto $M = \dfrac{N-1}{2}$,

$$\sum_{\ell=1,3,\ldots,N-2,N}(2\ell+1) = \sum_{n_r=0}^{M}(2N-4n_r+1) = \frac{(N+1)(N+2)}{2} \ ,$$

cioè come già trovato separando il problema in coordinate cartesiane.