Oscillatore Armonico in 3D

Prof. G. Martinelli

1 Introduzione

Ci consideri il prodotto diretto di due vettori $\vec{V}$ e $\vec{W}$

$$T_{ab} = V_a\, W_b\,. \tag{1}$$

Decomponiamo il tensore T_{ab} in un tensore simmetrico a traccia nulla, un tensore antisimmetrico (ovviamente a traccia nulla anch'esso) e la traccia:

$$\begin{aligned}
T_{ab} &= S_{ab} + A_{ab} + \frac{\delta_{ab}}{3} Tr \\
&= \left(\frac{V_a\,W_b + V_b\,W_a}{2}\right) - \frac{\delta_{ab}}{3}\,\vec{V}\cdot\vec{W} \\
&+ \left(\frac{V_a\,W_b - V_b\,W_a}{2}\right) \qquad (2)\\
&+ \frac{\delta_{ab}}{3}\,\vec{V}\cdot\vec{W}\,. \qquad (3)
\end{aligned}$$

Ci chiediamo come trasformino sotto una rotazione

$$V'_a = \sum_b O_{ab}(\vec{\omega})\, V_b\,, \tag{4}$$

i tre tensori a due indici appena introdotti. Nel seguito gli indici ripetuti si ritengono sommati. Si ricorda che per le rotazioni $O^{-1}_{ab}\, O_{bc} = O^T_{ab}\, O_{bc} = \delta_{ac}$. Nel seguito ci serviranno alcune proprietà del tensore antisimmetrico ϵ_{abc}

$$\begin{aligned}
\epsilon_{abc}\,\epsilon_{cdf} &= \delta_{ad}\,\delta_{bf} - \delta_{af}\,\delta_{bd}\,, \\
\epsilon_{hab}\,\epsilon_{abc} &= 2\,\delta_{hc}\,. \qquad (5)
\end{aligned}$$

Si consideri ora il tensore T_{ab} dopo la rotazione in eq. (4)

$$T'_{ab} = S'_{ab} + A'_{ab} + \frac{\delta_{ab}}{3} Tr'\,. \tag{6}$$

Abbiamo

$$Tr' = \vec{V}'\cdot\vec{W}' = V'_a W'_a = O_{ab}(\vec{\omega})\, V_b\, O_{ac}(\vec{\omega})\, W_c = V_b\, O^T_{ba}(\vec{\omega})\, O_{ac}(\vec{\omega})\, W_c = V_b\, W_b = Tr\,. \tag{7}$$

Dunque Tr è un invariante della trasformazione di coordinate (scalare).

Consideriamo ora la trasformazione del tensore antisimmetrico A_{ab}. Per comodità introduciamo il vettore $Z_c = \epsilon_{cab}\, A_{ab}$ $(A_{ab} = 1/2\, \epsilon_{abc}\, Z_c)$. La seguente catena di relazioni può essere dedotta

$$\begin{aligned} A'_{ab} &= \epsilon_{abc}\, Z'_c = \epsilon_{abc}\, \epsilon_{cdf}\, V'_d\, W'_f = \epsilon_{abc}\, \epsilon_{cdf} O_{dl}\, V_l\, O_{fk}\, W_k \\ &= (\delta_{ad}\, \delta_{bf} - \delta_{af}\, \delta_{bd})\, O_{dl}\, O_{fk}\, V_l\, W_k = (O_{al}\, O_{bk} - O_{ak}\, O_{bl})\, V_l\, W_k \quad (8) \\ &= O_{al}\, O_{bk}\, \epsilon_{lk\rho}\, \epsilon_{\rho mn}\, V_m\, W_n = O_{al}\, O_{bk}\, \epsilon_{lk\rho} Z_\rho\, , \quad (9) \end{aligned}$$

dove si è sfruttata l'antisimmetria del tensore $(O_{al}\, O_{bk} - O_{ak}\, O_{bl})$ rispetto allo scambio degli indici l e k. Abbiamo inoltre

$$\begin{aligned} Z'_h = \frac{1}{2}\, \epsilon_{hab} A'_{ab} &= \frac{1}{2}\, (\epsilon_{hab}\, \epsilon_{\rho lk} O_{al}\, O_{bk})\, Z_\rho \\ &= det[O]\, O^{-1}_{\rho h}\, Z_\rho = det[O]\, O_{h\rho}\, Z_\rho\, . \end{aligned} \quad (10)$$

Dunque abbiamo trovato che Z_a, ovverosia il tensore antisimmetrico, trasforma come un vettore sotto le usuali rotazioni $(det[O] = +1)$, mentre per quelle trasformazioni definite da una rotazione combinata con un'inversione di parità $(O' = P \times O)$, le componenti del vettore non cambiano di segno (a causa del fattore $det[O] = -1$). Dunque siamo in presenza di un vettore assiale.

In definitiva l'unico che trasforma come tensore di rango 2 è il tensore simmetrico a traccia nulla S_{ab}. Ovviamente, se $\vec{V} = \vec{W}$, la componente antisimmetrica si annulla.

2 Oscillatore armonico in 3D

Si consideri un oscillatore armonico tridimensionale descritto dall'Hamiltoniana

$$\mathcal{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \vec{r}^2}{2} \quad (11)$$

dove $\vec{p} \equiv (p_x, p_y, p_z)$ e $\vec{r} \equiv (x, y, z)$. Per semplicità di esposizione introduciamo la variabile adimensionale

$$\vec{\xi} \equiv (\xi_x, \xi_y, \xi_z) = \xi\, (\cos\phi\, \sin\theta, \sin\phi\, \sin\theta, \cos\theta) = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} \vec{r}\, . \quad (12)$$

L'Hamiltoniana è separabile in quella di tre oscillatori armonici, uno per ciascuna delle direzioni spaziali. Dunque gli autovalori e le autofunzioni sono dati da

$$\begin{aligned} E_n &= \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega \left(n_x + n_y + n_z + \frac{1}{2}\right)\, , \\ \psi_{\vec{n}}(\vec{\xi}) &= \psi_{n_x}(\xi_x)\, \psi_{n_y}(\xi_y)\, \psi_{n_z}(\xi_z)\, , \end{aligned} \quad (13)$$

dove

$$\begin{aligned}
\psi_n(\xi) &= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n\, n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2} \,, & (14)\\
H_0 &= 1 \quad H_1 = 2\xi \quad H_2 = -2 + 4\xi^2 \\
H_3 &= -12\xi + 8\xi^3 \quad H_4 = 12 - 48\xi^2 + 16\xi^4 \ \ldots . & (15)
\end{aligned}$$

Gli autostati dell'Hamiltoniana sono anche autostati dell'operatore di parità, che corrisponde alla trasformazione $\vec{r} \to -\vec{r}$, e commuta con l'Hamiltoniana. La parità degli autostati è data da $(-1)^n = (-1)^{n_x} \times (-1)^{n_y} \times (-1)^{n_z}$. La degenerazione degli stati, $N(n)$, cioè quanti stati corrispondono a una stessa energia, è data dal numero di modi in cui possiamo combinare n_x, n_y e n_z per dare lo stesso valore di n

$$N = \sum_{n_z=0}^{n} \sum_{n_y=0}^{n-n_z} 1 = \sum_{n_z=0}^{n} (n - n_z + 1) = \frac{(n+1)(n+2)}{2} \tag{16}$$

ovvero $N(0) = 1$, $N(1) = 3$, $N(2) = 6$, $N(3) = 10$, ... Vedremo che questi stati corrispondono a multipletti di momento angolare definito con l pari per n pari e l dispari per n dispari.

Si può facilmente verificare che l'Hamiltoniana in eq (11) commuta sia con il moment angolare totale, $\vec{L}^2$ che con ciascuna delle sue componenti, L_i, in particolare L_z. Questo significa che possiamo trovare stati che sono simultaneamente autostati dell'Hamiltoniana, di $\vec{L}^2$ e di L_z, ed inoltre che autostati con lo stesso valore di n, che appartengono allo stesso multipletto di momento angolare e differiscono solo per il valore di L_z, sono necessariamente degeneri. Dato che stati di momento angolare l sono stati di parità definita, data da $(-1)^l$, autostati con n pari (dispari) saranno dati da combinazioni lineari di autostati di momento angolare pari (dispari).

3 Decomposizione dello stato fondamentale e del primo stato eccitato in autofunzioni del momento angolare

Lo stato fondamentale è dato da

$$\begin{aligned}
\psi_{0,0,0}(\vec{\xi}) &= \psi_0(\xi_x))\psi_0(\xi_y)\,\psi_0(\xi_z) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{3/4} e^{-\xi^2/2} \\
&= \left(\frac{1}{\pi}\right)^{3/4} e^{-\xi^2/2}(4\pi)^{1/2}\, Y_{0,0}(\theta,\phi) = R_{00}(\xi)\, Y_{0,0}(\theta,\phi) & (17)
\end{aligned}$$

in quanto lo stato dipende solo dal modulo del vettore posizione $\xi = \sqrt{\xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2}$, mentre non dipende dagli angoli.

I primi tre stati eccitati sono:

$$\begin{aligned}
\psi_{1,0,0}(\vec{\xi}) &= \psi_1(\xi_x))\psi_0(\xi_y)\,\psi_0(\xi_z) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{3/4} \sqrt{2}\;\xi_x\, e^{-\xi^2/2} \\
&= \left(\frac{1}{\pi}\right)^{3/4} \sqrt{2}\;\xi\,\cos\phi\,\sin\theta\, e^{-\xi^2/2} \\
\psi_{0,1,0}(\vec{\xi}) &= \psi_0(\xi_x))\psi_1(\xi_y)\,\psi_0(\xi_z) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{3/4} \sqrt{2}\;\xi\,\sin\phi\,\sin\theta\, e^{-\xi^2/2} \\
\psi_{0,0,1}(\vec{\xi}) &= \psi_0(\xi_x))\psi_0(\xi_y)\,\psi_1(\xi_z) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{3/4} \sqrt{2}\;\xi\,\cos\theta\, e^{-\xi^2/2}\,. \qquad (18)
\end{aligned}$$

Consideriamo $\psi_{0,0,1}(\vec{\xi})$ e riscriviamolo nel seguente modo

$$\begin{aligned}
\psi_{0,0,1}(\vec{\xi}) &= \left(\frac{1}{\pi}\right)^{3/4} \xi\, e^{-\xi^2/2} \left(\frac{8\pi}{3}\right)^{1/2} \left(\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\right) \cos\theta = R_{1,1}(\xi)\, Y_{1,0}(\theta,\phi)\,, \\
R_{1,1}(\xi) &= \left(\frac{1}{\pi}\right)^{3/4} \xi\, e^{-\xi^2/2} \left(\frac{8\pi}{3}\right)^{1/2}\,. \qquad (19)
\end{aligned}$$

Essendo lo stato $\psi_{0,0,1}(\vec{\xi})$ indipendente da ϕ e lineare in $\cos\theta$, si riconosce subito che uno degli autostati dell'Hamiltoniana ha $l = 1$ e $l_z = 0$. Poichè l'Hamiltoniana commuta col momento angolare, se troviamo una componente del multipletto, dobbiamo trovare l'intero multipletto tra gli stati degeneri con quello in eq. (19), ovvero gli stati corrispondenti a $l = 1$, $l_z = \pm 1$. Nel caso delle altre due componenti procediamo costruendo opportune combinazioni lineari di $\psi_{1,0,0}(\vec{\xi})$ e $\psi_{0,1,0}(\vec{\xi})$

$$\begin{aligned}
\psi_{\pm}(\vec{\xi}) &= \frac{\mp\,\psi_{1,0,0}(\vec{\xi}) - i\,\psi_{0,1,0}(\vec{\xi})}{\sqrt{2}} = \mp \left(\frac{1}{\pi}\right)^{3/4} \xi\, e^{-\xi^2/2} e^{\pm i\phi}\,\sin\theta \\
&= R_{1,1}(\xi)\, Y_{1,\pm 1}(\theta,\phi)\,. \qquad (20)
\end{aligned}$$

Allo stesso risultato potevamo arrivare proiettando l'autostato dell'oscillatore armonico sugli autostati del momento angolare, $\langle l, l_z|\psi\rangle$,

$$\begin{aligned}
\langle 1, \pm 1|100\rangle &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{+1} d\cos\theta\, Y^*_{1,\pm 1}(\theta,\phi)\psi_{1,0,0}(\vec{\xi}) = \mp\frac{R_{1,1}(\xi)}{\sqrt{2}} \\
\langle 1, \pm 1|010\rangle &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{+1} d\cos\theta\, Y^*_{1,\pm 1}(\theta,\phi)\psi_{0,1,0}(\vec{\xi}) = i\,\frac{R_{1,1}(\xi)}{\sqrt{2}}\,, \qquad (21)
\end{aligned}$$

da cui

$$
\begin{aligned}
\psi_{1,0,0}(\vec{\xi}) &= \frac{R_{1,1}(\xi)}{\sqrt{2}}\,(-Y_{1,1}(\theta,\phi)+Y_{1,-1}(\theta,\phi)) \\
\psi_{0,1,0}(\vec{\xi}) &= i\,\frac{R_{1,1}(\xi)}{\sqrt{2}}\,(Y_{1,1}(\theta,\phi)+Y_{1,-1}(\theta,\phi))\ .
\end{aligned}
\tag{22}
$$

In vista della generalizzazione a tutti gli stati introduciamo la seguente notazione. Chiamiamo $|n,l,l_z\rangle$ l'autostato simultaneo di H con autovalore $E(n)=\hbar\omega\,(n+3/2)$, di l^2 con autovalore $l(l+1)$ e di l_z. Avremo pertanto

$$
\begin{aligned}
\langle\vec{r}|1,1,0\rangle &= \langle r,\theta,\phi|1,1,0\rangle = \psi_{001}(r,\theta,\phi) \\
\langle\vec{r}|1,1,\pm1\rangle &= \langle r,\theta,\phi|1,1,\pm1\rangle = \psi_{\pm}(r,\theta,\phi)
\end{aligned}
\tag{23}
$$

4 Decomposizione del secondo stato eccitato in autofunzioni del momento angolare

Per $n = 2$ abbiamo 6 stati corrispondenti al pentapletto con $l = 2$ e al singoletto con $l = 0$. Per ottenere la decomposizione conviene fare la proiezione sugli autostati del momento angolare con $l = 2$, $l_z = +2, +1, 0, -1, -2$ o $l = 0$ e $l_z = 0$.

Cominciamo a considerare le funzioni $\psi_{2,0,0}(\vec{\xi})$, $\psi_{0,2,0}(\vec{\xi})$ e $\psi_{0,0,2}(\vec{\xi})$, per le quali si verifica che hanno decomposizione solo su $|2,2\rangle$, $|2,0\rangle$, $|2,-2\rangle$ e $|0,0\rangle$

$$\begin{aligned}
& \psi_{2,0,0}(\vec{\xi}) \sim (4\,\xi_x^2 - 2)\, e^{-\xi^2/2} \\
= & \frac{R_{2,0}(\xi)}{\sqrt{3}}\, Y_{0,0}(\theta,\phi) + \frac{R_{2,2}(\xi)}{2}\left(Y_{2,2}(\theta,\phi) - \sqrt{\frac{2}{3}}\, Y_{2,0}(\theta,\phi) + Y_{2,-2}(\theta,\phi)\right) , \\
& \psi_{0,2,0}(\vec{\xi}) \sim (4\,\xi_y^2 - 2) e^{-\xi^2/2} \\
= & \frac{R_{2,0}(\xi)}{\sqrt{3}}\, Y_{0,0}(\theta,\phi) + \frac{R_{2,2}(\xi)}{2}\left(-Y_{2,2}(\theta,\phi) - \sqrt{\frac{2}{3}}\, Y_{2,0}(\theta,\phi) - Y_{2,-2}(\theta,\phi)\right) , \\
& \psi_{0,0,2}(\vec{\xi}) \sim (4\,\xi_z^2 - 2) e^{-\xi^2/2} \\
= & \frac{R_{2,0}(\xi)}{\sqrt{3}}\, Y_{0,0}(\theta,\phi) + R_{2,2}(\xi)\sqrt{\frac{2}{3}}\, Y_{2,0}(\theta,\phi)\,,
\end{aligned} \tag{24}$$

dove

$$\begin{aligned}
R_{2,0}(\xi) &= \sqrt{\frac{2}{3}}\,\frac{(-3+2\xi^2)}{\pi^{1/4}}\, e^{-\xi^2/2} \\
R_{2,2}(\xi) &= \sqrt{\frac{16}{15}}\,\frac{\xi^2}{\pi^{1/4}} e^{-\xi^2/2}\,.
\end{aligned} \tag{25}$$

Sulla base degli argomenti generali sul prodotto diretto di vettori, il primo autostato del momento angolare, corrispondente a $l = 0$, si trova semplicemente sommando i tre autostati nell'equazione precedente (ovverosia facendo la traccia del tensore di rango 2), con un opportuno fattore per mantenere la normalizzazione degli stati

$$\langle\vec{r}|2,0,0\rangle = \frac{\psi_{2,0,0} + \psi_{0,2,0} + \psi_{0,0,2}}{\sqrt{3}} \sim (4\,\xi^2 - 6)\, e^{-\xi^2/2} = R_{2,0}(\xi) Y_{0,0}(\theta,\phi)\,. \tag{26}$$

Sappiamo che le due combinazioni $\xi_x^2 + \xi_y^2$ e ξ_z^2 sono indipendenti da ϕ, e dunque invarianti rispetto a rotazioni intorno all'asse z. Questo implica che corrispondono a $l_z = 0$ ed è pertanto immediato trovare la combinazione delle funzioni d'onda, ortogonale a $\langle\vec{r}|2,0,0\rangle$, corrispondente a $l = 2$, $l_z = 0$

$$\langle\vec{r}|2,2,0\rangle = \frac{-\psi_{2,0,0} - \psi_{0,2,0} + 2\psi_{0,0,2}}{\sqrt{6}} = R_{2,2}(\xi)Y_{2,0}(\theta,\phi)\,. \tag{27}$$

Ci rimane una sola combinazione possibile, ortogonale alla precedente, ovvero

$$\frac{\psi_{2,0,0} - \psi_{0,2,0}}{\sqrt{2}} = R_{2,2}(\xi)\frac{Y_{2,2}(\theta,\phi) + Y_{2,-2}(\theta,\phi)}{\sqrt{2}}\,. \tag{28}$$

Per trovare gli stati restanti, dobbiamo utilizzare ψ_{110}, ψ_{101} e ψ_{011}. Abbiamo imparato dai casi precedenti che la combinazione $\xi_x \pm i\,\xi_y \sim \exp \pm i\phi$, dunque costruiamo gli stati normalizzati

$$\psi_\pm(\vec{\xi}) \;=\; \frac{\mp\,\psi_{1,0,1}(\vec{\xi}) - i\,\psi_{0,1,1}(\vec{\xi})}{\sqrt{2}} = R_{2,2}(\xi)\,Y_{2,\pm 1}(\theta,\phi)\,, \tag{29}$$

come si verifica immediatamente dalla proiezione $\langle 2,2,\pm 1|\psi_\pm\rangle$. Ci rimane a questo punto solo uno stato, ovverosia ψ_{110}. Usando le proiezioni sugli stati $l = 2$ e $l_z = \pm 2$ (tutte le altre proiezioni sono nulle) otteniamo:

$$\psi_{1,1,0}(\vec{\xi}) = -i\,R_{2,2}(\xi)\frac{Y_{2,2}(\theta,\phi) - Y_{2,-2}(\theta,\phi)}{\sqrt{2}}\,. \tag{30}$$

Dalle eq. (28) e (30) troviamo

$$\begin{aligned}|n=2,l=2,l_z=\pm 2\rangle \;=\;& \frac{|n_x=2,n_y=0,n_z=0\rangle - |n_x=0,n_y=2,n_z=0\rangle}{2}\\ &\pm i\,\frac{|n_x=1,n_y=1,n_z=0\rangle}{\sqrt{2}}\,.\end{aligned} \tag{31}$$

5 L'oscillatore armonico in coordinate polari

Scrivendo l'equazione di Schödinger per gli autostati dell'Hamiltoniana in coordinate polari, e cercando una soluzione della forma $R(r)\,Y_{l,l_z}(\theta,\phi)$, si ottiene

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) + V(r)\right]R(r) = E\,R(r)\,, \tag{32}$$

dove, nel caso dell'oscillatore armonico $V(r) = m\omega^2 r^2/2$. Dividendo tutta l'equazione per il fattore $\hbar\omega/2$, utilizzando la relazione $\xi = \sqrt{m\omega/\hbar}\,r$ e definendo $\epsilon = 2E/(\hbar\omega)$, si ottiene l'equazione in unità adimensionali

$$\left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{2}{\xi}\frac{d}{d\xi} - \frac{l(l+1)}{\xi^2} + \xi^2\right)R(\xi) = \epsilon\,R(\xi)\,. \tag{33}$$

Scriviamo ora

$$R(\xi) = \xi^l \, H_l(\xi) \, e^{-\xi^2/2} \,, \tag{34}$$

dove H_l è un polinomio pari in ξ, essendo la parità data dal fattore ξ^l, che parte da ξ^0. Si ottiene dunque l'equazione

$$\frac{d^2 H_l}{d\xi^2} + \frac{2}{\xi}[(l+1) - \xi^2]\frac{dH_l}{d\xi} + (\epsilon - 3 - 2l)H_l = 0 \,. \tag{35}$$

Poichè $H_l = H_l(\xi^2)$, possiamo utilizzare la variabile $t = \xi^2/2$, e scrivere

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} &= \frac{1}{\xi}\frac{d}{d\xi} \,, \\
\frac{d^2}{dt^2} &= \frac{1}{\xi}\frac{d}{d\xi} \times \frac{1}{\xi}\frac{d}{d\xi} = -\frac{1}{\xi^3}\frac{d}{d\xi} + \frac{1}{\xi^2}\frac{d^2}{d\xi^2} \,, \\
\frac{d^2}{d\xi^2} &= 4t\,\frac{d^2}{dt^2} + 2\frac{d}{dt} \,,
\end{aligned} \tag{36}$$

ottenendo

$$t\,\frac{d^2 H_l}{dt^2} + [(l + 3/2) - t]\frac{dH_l}{dt} + \frac{1}{4}(\epsilon - 3 - 2l)H_l = 0 \,. \tag{37}$$

Questa equazione ammette soluzioni per $(\epsilon - 3 - 2l) \geq 0$, chiamate polinomi generalizzati di Laguerre. Definendo $\epsilon = 3 + 2n$, ovvero $E = \hbar\omega(n + 3/2)$, gli indici del polinomio di Laguerre $L_m^{(a-1)}(\xi^2)$ sono $a = l + 3/2$ e $m = 1/2(n - l)$, con $n \geq l$. La formula dei polinomi di Laguerre generalizzati è data dall'espressione

$$L_m^a(t) = \frac{1}{a(a+1)(a+2)\dots(a+m-1)}\, t^{1-a}\, e^t\, \frac{d^m}{dz^m}\left(t^{a+m-1}\, e^{-t}\right) \,. \tag{38}$$

Si verifica facilmente che le funzioni di Laguerre danno, nei casi considerati, le funzioni $R_{n,l}$ da noi trovate in precedenza, a meno di un inessenziale fattore moltiplicativo che viene fissato dalla normalizzazione

$$\int_0^\infty dr\, r^2\, |R_{n,l}(r)|^2 = 1 \,. \tag{39}$$

Con questo metodo si trovano in maniera diretta le autofunzioni dell'Hamiltoniana per n e l arbitrari.