

Università degli studi di Catania

Corso di laurea in fisica

Esame di meccanica quantistica I

Analisi numerica del potenziale anarmonico

Agata Trovato
Enrica Trovato

Oscillatore armonico

Trattazione quantistica

Consideriamo un sistema fisico immerso in un potenziale. Questo sistema si comporta come un oscillatore armonico se presenta uno stato di equilibrio stabile S, cioè una posizione di minimo potenziale. Infatti se il sistema si trova inizialmente in equilibrio e viene perturbato debolmente darà origine a piccole oscillazioni armoniche attorno al punto di equilibrio S.

Il modello dell'oscillatore armonico trova grande applicazione in svariati campi, ad esempio nello studio dei reticoli cristallini o dei nuclei atomici, pertanto è particolarmente interessante studiarlo da un punto di vista quantistico.

Consideriamo una particella (per semplicità consideriamo il caso unidimensionale) immersa in un potenziale di oscillatore

$$V(q) = \frac{1}{2} k q^2$$

con $k = m\omega^2$, dove ω è la pulsazione di oscillazione.

L'Hamiltoniana del sistema assumerà la forma

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

Introduciamo gli operatori di annichilazione e creazione:

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{q} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right) \quad \hat{a}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{q} - \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right)$$

e posto $\hat{N} = \hat{a}^+ \hat{a}$

si ottiene

$$\hat{H} = \hbar\omega \left[\hat{N} + \frac{1}{2} \right]$$

Il nostro scopo è quello di risolvere l'equazione di Schrodinger stazionaria per trovare lo spettro degli autovalori E_n di \hat{H} che corrispondono a stati legati.

Calcolati gli autovalori n di \hat{N} è possibile trovare lo spettro E_n tramite

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

Utilizzando le proprietà degli operatori \hat{a} e \hat{a}^+ si trova la funzione d'onda dell'oscillatore armonico nello stato fondamentale:

$$\psi_0(q) = P_0(q) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}q^2}$$

Applicando poi ripetutamente a $\psi_0(q)$ l'operatore \hat{a}^+ espresso in termini di \hat{p} e \hat{q} , con delle semplici operazioni di derivazione si possono trovare le altre funzioni d'onda:

$$\psi_n(q) = P_n(q) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}q^2}$$

dove $P_n(q)$ è un polinomio di grado n che prende il nome di *polinomio di Hermite*. Gli zeri del polinomio sono anche zeri per la funzione d'onda. I punti in cui la funzione d'onda si annulla vengono chiamati *nod*i di ψ_n .

Probabilità classica

Dal punto di vista quantistico $|\psi|^2$ rappresenta la probabilità di trovare il sistema nel punto q quando si trova nello stato eccitato n -esimo. Una analoga probabilità può essere definita anche dal punto di vista classico.

Consideriamo ad esempio un pendolo che oscilla con una ampiezza massima pari a q_0 ; sappiamo che posizione e velocità istantanea sono:

$$q = q_0 \cos \omega t$$

$$\dot{q} = -q_0 \omega \sin \omega t$$

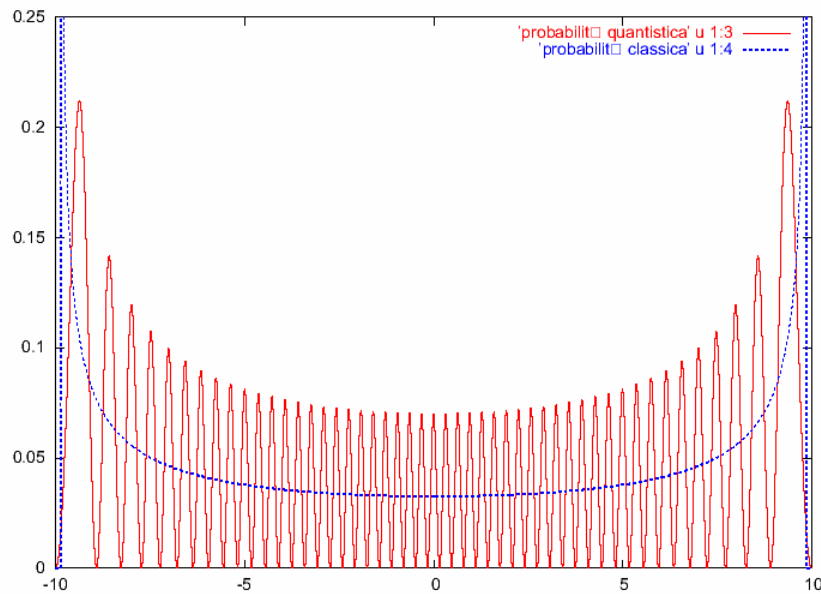
Da semplici considerazioni si trova che la probabilità di trovare la sferetta del pendolo nel punto q è

$$P(q) = \frac{1}{q_0 \omega \sqrt{1 - \frac{q^2}{q_0^2}}}$$

Analizzando questa espressione si vede facilmente che la probabilità classica presenta un minimo per $q = 0$, e diverge nei punti di inversione, cioè per $q = q_0$ e $q = -q_0$. Inoltre è nulla per valori superiori (in valore assoluto) del punto di inversione.

Confrontando con la probabilità quantistica osserviamo delle notevoli differenze. Essa infatti presenta un massimo per $q = 0$ e decresce all'aumentare di q . Inoltre la particella ha una certa probabilità di trovarsi nella regione classicamente proibita.

Tuttavia si osserva che queste differenze diminuiscono man mano che l'energia cresce. Si ha perfetto accordo tra le due probabilità per $n \gg 8$. Questo perché ad alte energie la quantizzazione diventa sempre meno significativa dato che $E_n \gg \hbar \omega$ e il sistema si comporta classicamente:



Come si vede per un alto numero di nodi (48) la probabilità quantistica presenta un elevato numero di picchi e si adagia sulla probabilità classica. All'aumentare di n le oscillazioni della probabilità quantistica sono talmente tante che non si distinguono più e quindi $|\psi|^2$ tende a coincidere con P .

Metodo numerico per la risoluzione dell'equazione di Schrodinger : metodo di Numerov.

Il metodo qui utilizzato per la risoluzione numerica dell'equazione di Schrodinger è il metodo di Numerov, che in realtà consente più in generale di risolvere problemi del tipo

$$\begin{cases} y''(q) = -g(q)y(q) + S(q) \\ y(q_0) = y_0 \\ y'(q_0) = y'_0 \end{cases}$$

Scegliendo

$$g(q) = \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(q)] \quad S(q) = 0$$

si ha che l'equazione da risolvere è quella di Schrodinger dove l'incognita y è la ψ .

L'idea di questo metodo consiste, dopo aver discretizzato il dominio di tutte le funzioni, nel calcolare, a partire dallo sviluppo in serie di Taylor arrestato al quinto ordine della y , il valore di y_{n+1} e y_{n-1} in funzione di y^n e y^{IV} . Da queste, dopo semplici passaggi algebrici, si ricava che

$$y_{n+1} = \frac{(12 - 10f_n)y_n - y_{n-1}f_{n-1}}{f_{n-1}}$$

essendo

$$f_n = 1 + \frac{1}{12} g_n (\Delta x)^2$$

Dunque l'algoritmo partendo dai valori noti di y_0 e y_0^1 calcola in modo iterativo la funzione y .

Il parametro che resta da definire è l'energia. Osserviamo che i livelli energetici possibili E_n non sono noti a priori. Pertanto si sfrutta il fatto che gli autovalori di energia sono correlati al numero di nodi n . Il programma dunque, noto il valore di n , calcola l'energia col metodo shooting: in un intervallo compreso tra $-V_0$ e 0 sceglie il valore per cui la y abbia all'interno della buca di potenziale il numero di nodi scelto dall'utente.

Il file in output contiene : q , $\psi(q)$, $|\psi|^2$, ρ_{cl} (che è la densità di probabilità classica) e $V(q)$.

Questo programma inoltre può essere utilizzato solo per potenziali simmetrici rispetto a $q = 0$, poiché la funzione d'onda viene integrata solo per q positive, e la parte per q negative viene costruita per simmetria.

Analisi numerica del potenziale anarmonico

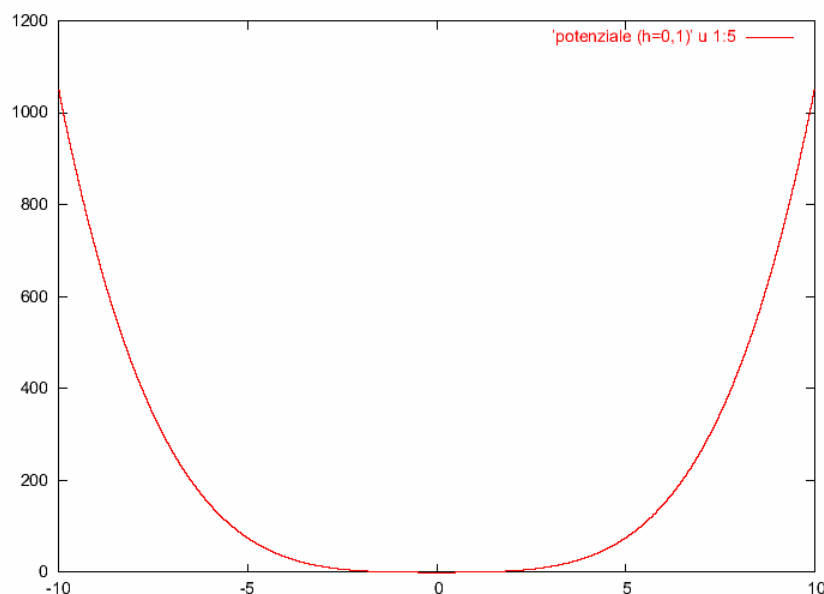
Il potenziale studiato in laboratorio è stato il potenziale anarmonico che assume una forma del tipo:

$$V(q) = \frac{1}{2} kq^2 + hq^4$$

Dove nello studio si è posto $k = 1$.

Questo potenziale risulta assai utile nello studio delle molecole, e in particolar modo per la ricerca di autovalori di energia che permettono la dissociazione delle molecole.

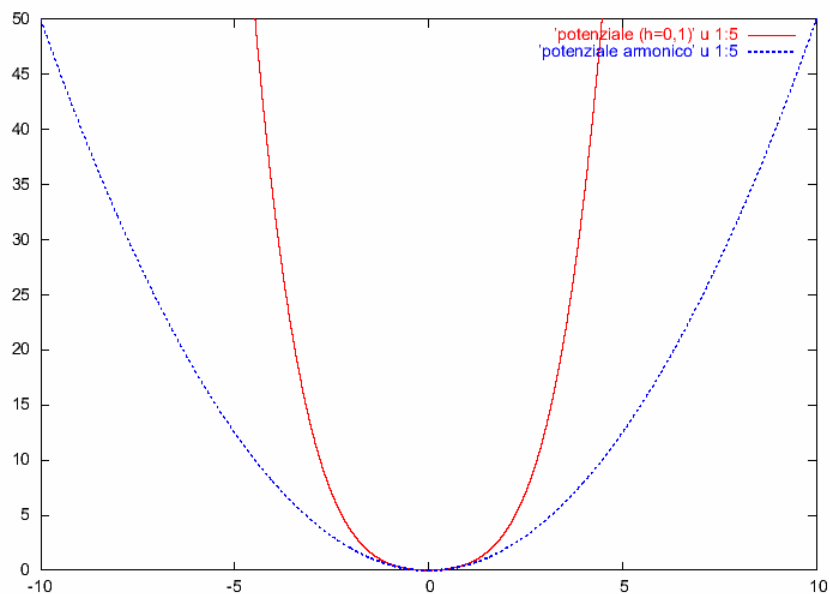
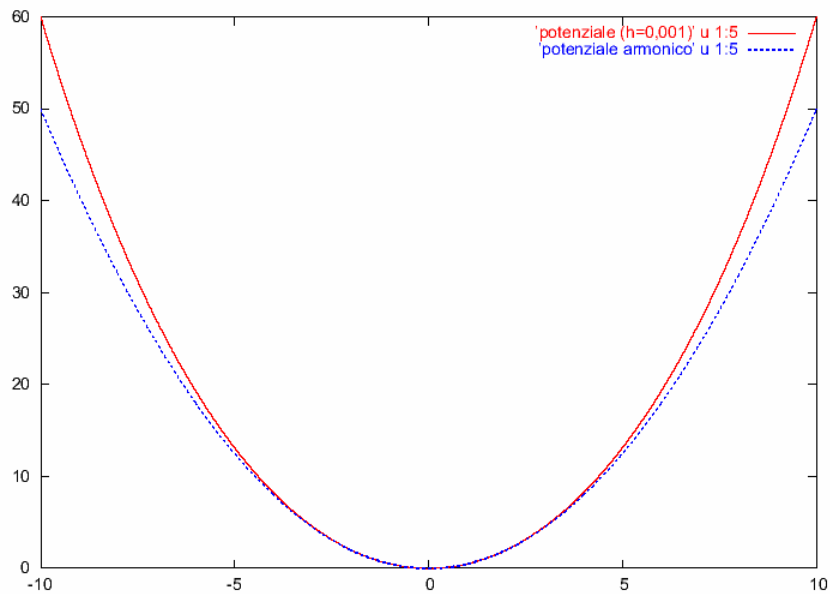
L'andamento del potenziale è mostrato in figura:

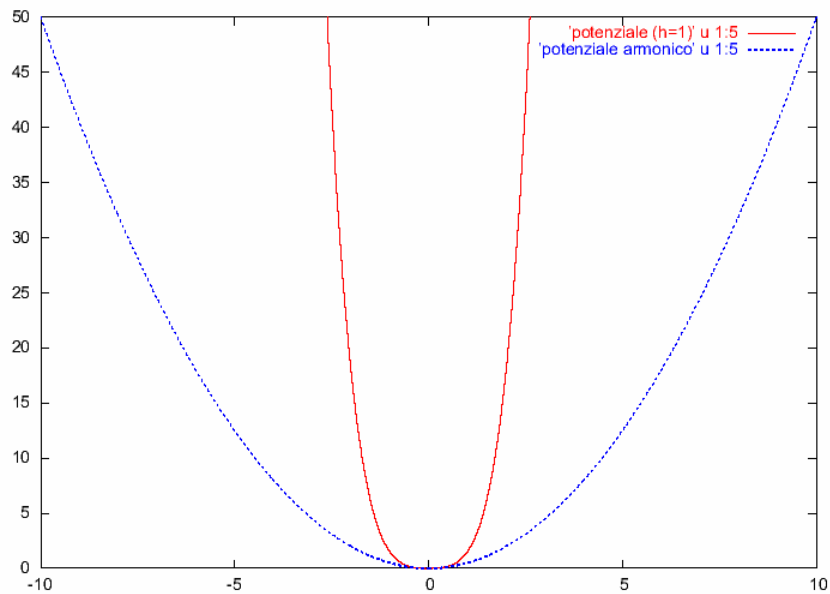


Si vede chiaramente che è simmetrico rispetto alla posizione $q = 0$ pertanto può essere studiato tramite il programma prima descritto.

Notiamo che questo potenziale differisce da quello armonico solo per un termine proporzionale alla quarta potenza della q . Intuitivamente si capisce che tanto più è piccolo il fattore h , tanto più il secondo termine del potenziale può essere trascurato, ottenendo così il potenziale armonico.

In effetti è proprio quello che si osserva dai grafici ottenuti per $h = 0,001$, $h = 0,1$, $h = 1$:

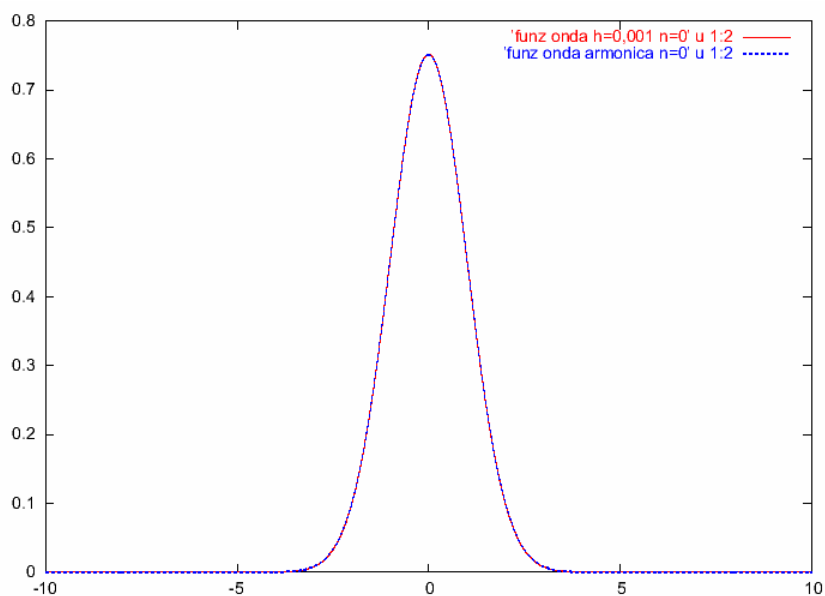


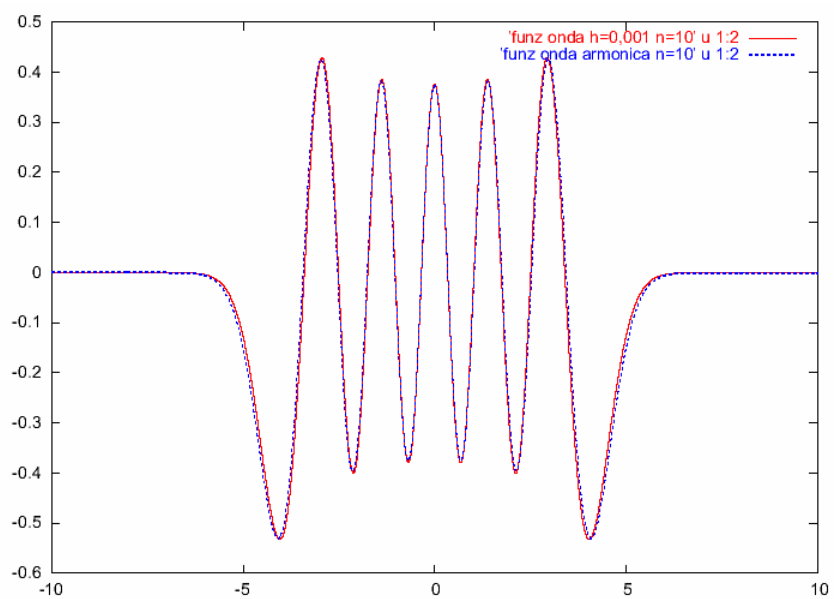
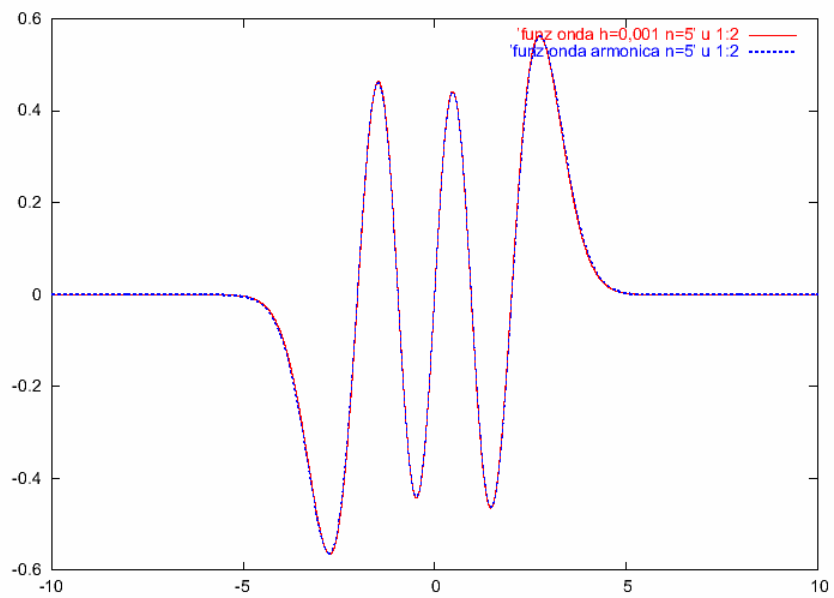
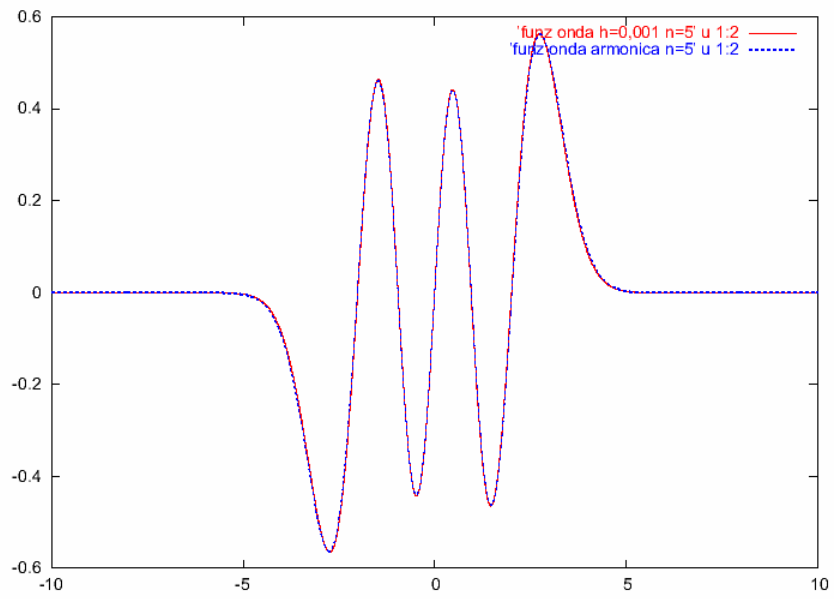


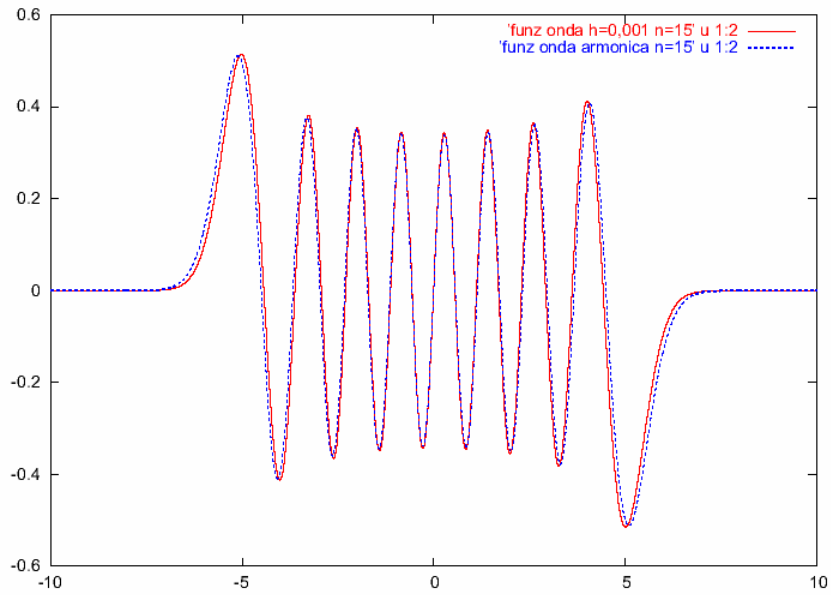
Si vede come per $h = 0,001$ le due curve sono sovrapposte quasi fino al valore $E = 15$. Man mano poi che il fattore h aumenta, il termine hq^4 assume un peso sempre maggiore, e per $h = 1$ le curve coincidono solo per pochissimi valori di energia.

Riportiamo ora i grafici delle funzioni d'onda. Si è preferito riportare simultaneamente le funzioni d'onda calcolate per il potenziale armonico e per il potenziale anarmonico per evidenziare quanto detto finora.

Fissata $h = 0,001$ la funzione d'onda è stata calcolata per diversi numero di nodi : $n=0$, $n=5$, $n=10$ $n=15$:

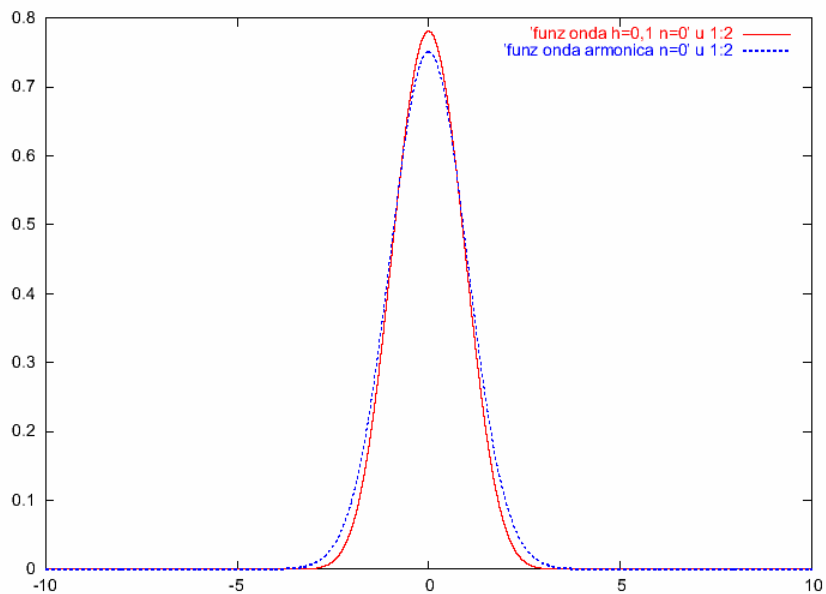


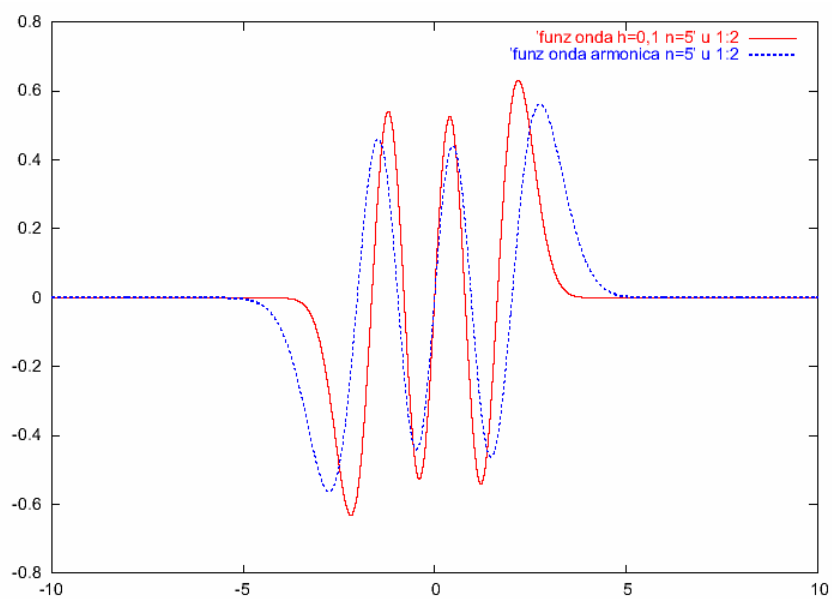
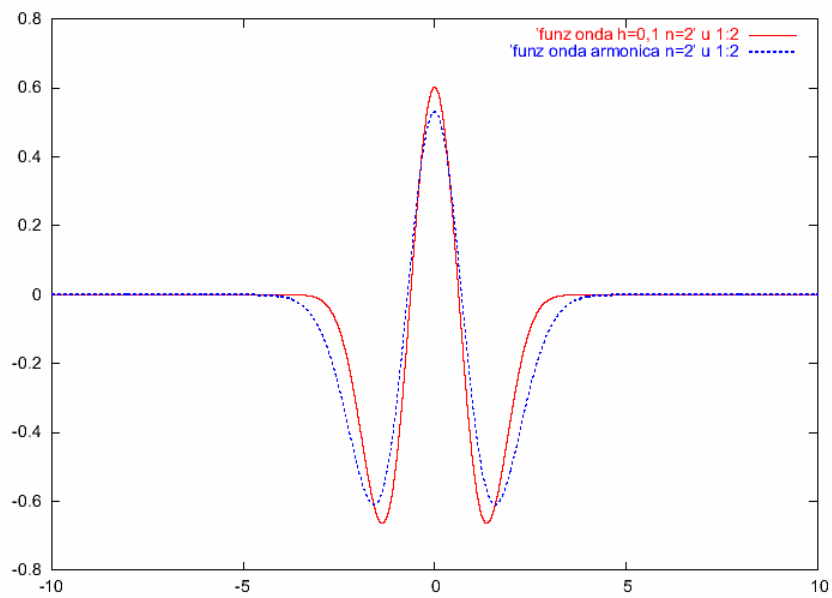
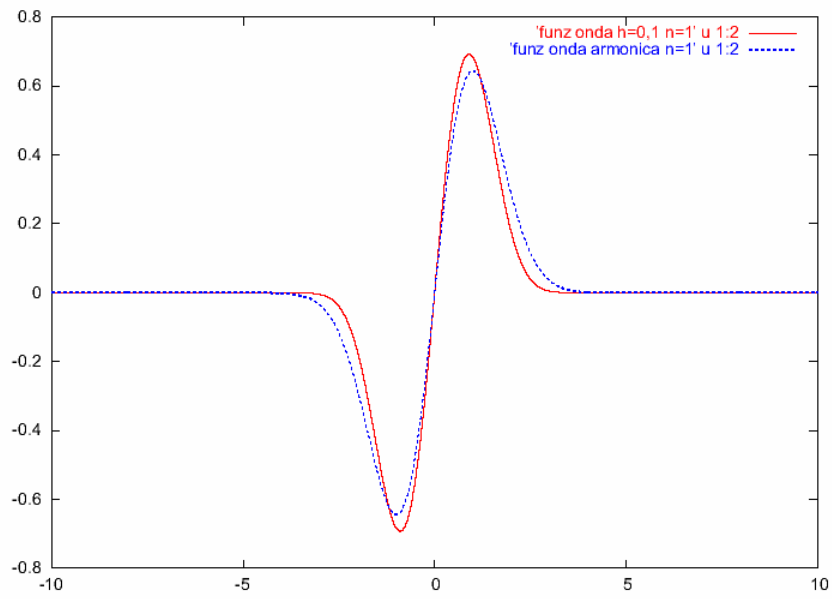


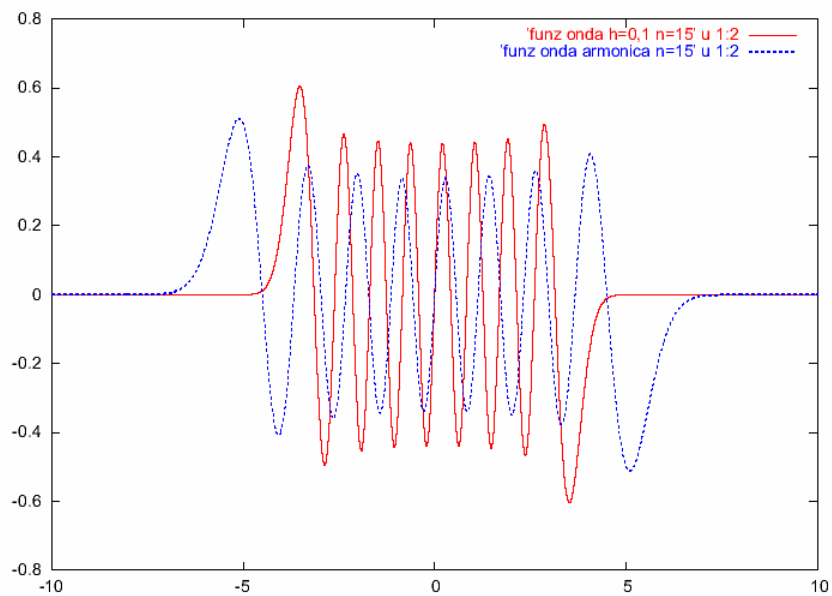
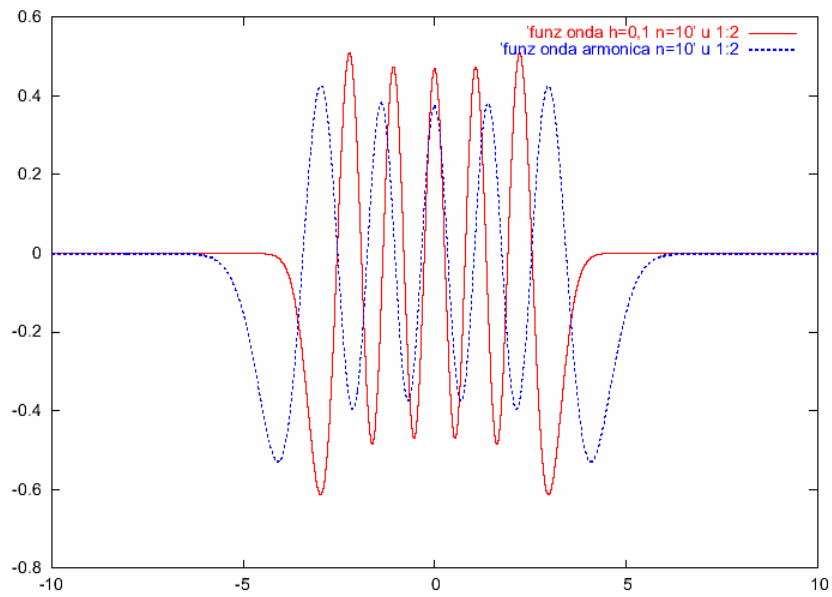


Si vede chiaramente che per $n=0$ le due funzioni sono sovrapposte, ed è stato necessario arrivare a $n=15$ per apprezzare un lieve discostamento tra le due funzioni.

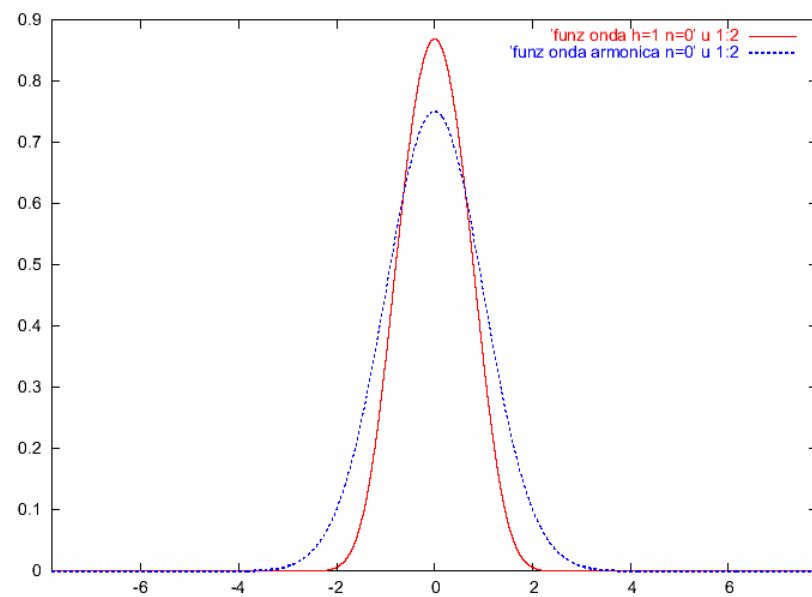
Per $h=0,1$ si osserva che non sempre c'è un buon accordo tra le ψ graficate. Esse coincidono per $n=0$ o per $n=1$. Già per $n=5$ le differenze sono marcate e aumentano ancora di più al crescere del numero di nodi. In effetti è proprio quello che aspettavamo. Inoltre questo comporta per autovalori crescenti di energia i punti di inversione classica non coincidono più come si vede chiaramente dai grafici:

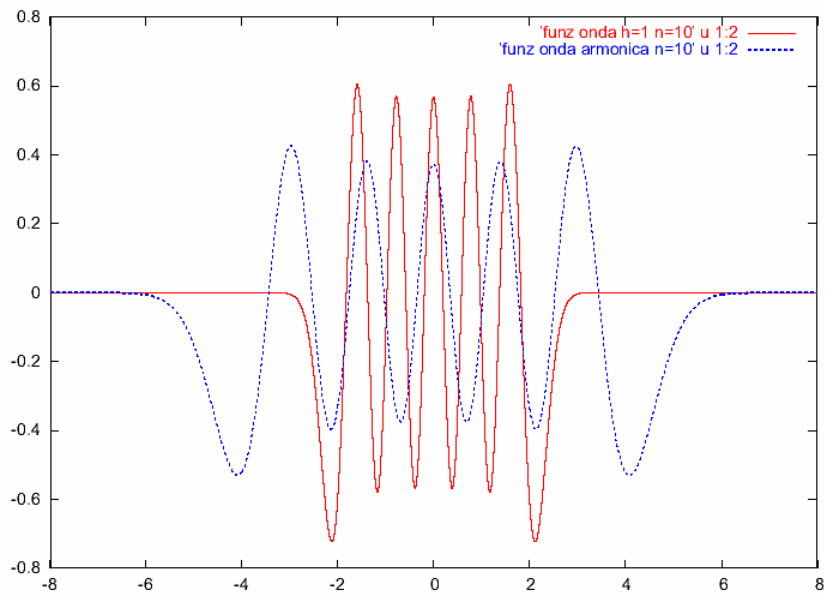
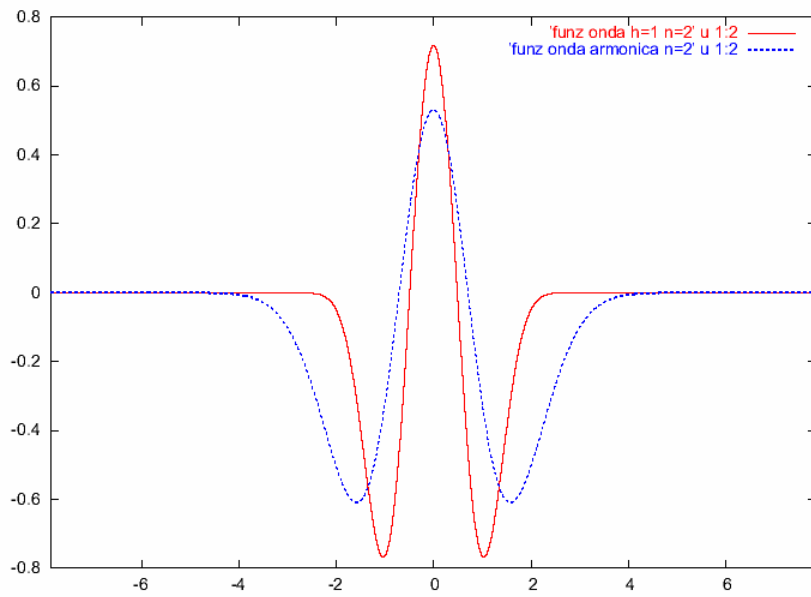






Chiaramente le discrepanze risultano molto più accentuate per $h=1$:





Per avere un'idea degli autovalori di energia trovati riportiamo di seguito una tabella con i risultati ottenuti per i diversi nodi:

Numero di nodi	$h=0$	$h=0,001$	$h=0,1$	$h=1$
0	0,5	0,5007	0,5591	0,8037
1	1,5	1,5037	1,7695	2,7379
2	2,5	2,5097	3,1386	5,1792
5	5,5	5,545	7,8998	14,2031
10	10,5	10,661	17,3519	32,9332
15	15,5	15,846	28,1723	54,8597

Il caso $h = 0$ è chiaramente il caso del potenziale armonico. Concordemente con quanto detto finora notiamo che: per $h=0,001$ la discrepanza per $n=0$ si ha solo nella quarta cifra decimale. Man mano

poi che n aumenta, anche la differenza con l'energia del potenziale armonico aumenta; per $h = 0,1$ si hanno differenze significative già per $n=5$, mentre per $h = 1$ addirittura per $n=1$.
 Riportiamo di seguito una tabella con le differenze di energia trovate per esplicitare meglio quanto detto:

Numero nodi	$ \Delta E $ $h=0,001$	$ \Delta E $ $h=0,1$	$ \Delta E $ $h=1$
0	0,0007	0,0591	0,3037
1	0,0037	0,2695	1,2379
2	0,0097	0,6386	2,6792
5	0,045	2,3998	8,7031
10	0,161	6,8519	22,4332
15	0,346	12,6723	39,3597

Sarebbe stato interessante studiare questo potenziale per valori più grandi di h , ma questo non è stato possibile a causa dei limiti imposti dal sistema numerico utilizzato.

Bibliografia

- ◆ U.Lombardo, *Appunti per il corso di Meccanica Quantistica I*
- ◆ F.Ercolessi – S.De Gironcoli, *Appunti per il corso di Meccanica Quantistica*