

UNITEXT for Physics

Leonardo Angelini

Meccanica quantistica

Problemi scelti

Seconda Edizione



Springer

UNITEXT for Physics

Series editors

Michele Cini, Roma, Italy

Attilio Ferrari, Torino, Italy

Stefano Forte, Milano, Italy

Guido Montagna, Pavia, Italy

Oreste Nicrosini, Pavia, Italy

Luca Peliti, Napoli, Italy

Alberto Rotondi, Pavia, Italy

Paolo Biscari, Milano, Italy

Nicola Manini, Milano, Italy

Morten Hjorth-Jensen, Oslo, Norway

UNITEXT for Physics series, formerly UNITEXT Collana di Fisica e Astronomia, publishes textbooks and monographs in Physics and Astronomy, mainly in English language, characterized of a didactic style and comprehensiveness. The books published in UNITEXT for Physics series are addressed to graduate and advanced graduate students, but also to scientists and researchers as important resources for their education, knowledge and teaching.

More information about this series at <http://www.springer.com/series/13351>

Leonardo Angelini

Meccanica quantistica

Problemi scelti

Seconda Edizione



Springer

Leonardo Angelini
Dipartimento di Fisica
INFN Sezione di Bari
Università di Bari
Italia

ISSN 2198-7882

ISSN 2198-7890 (electronic)

UNITEXT for Physics

ISBN 978-88-470-3965-0

ISBN 978-88-470-3966-7 (eBook)

<https://doi.org/10.1007/978-88-470-3966-7>

Numero di controllo della Biblioteca del Congresso: 2018931920

1a edizione: © Springer-Verlag Italia, Milano 2008

2a edizione: © Springer-Verlag Italia S.r.l., parte di Springer Nature 2018

Quest'opera è protetta dalla legge sul diritto d'autore e la sua riproduzione è ammessa solo ed esclusivamente nei limiti stabiliti dalla stessa. Le fotocopie per uso personale possono essere effettuate nei limiti del 15% di ciascun volume dietro pagamento alla SIAE del compenso previsto dall'art. 68. Le riproduzioni per uso non personale e/o oltre il limite del 15% potranno avvenire solo a seguito di specifica autorizzazione rilasciata da AIDRO, Corso di Porta Romana n.108, Milano 20122, e-mail segreteria@aidro.org e sito web www.aidro.org.

Tutti i diritti, in particolare quelli relativi alla traduzione, alla ristampa, all'utilizzo di illustrazioni e tabelle, alla citazione orale, alla trasmissione radiofonica o televisiva, alla registrazione su microfilm o in database, o alla riproduzione in qualsiasi altra forma (stampata o elettronica) rimangono riservati anche nel caso di utilizzo parziale. La violazione delle norme comporta le sanzioni previste dalla legge. L'utilizzo in questa pubblicazione di denominazioni generiche, nomi commerciali, marchi registrati ecc., anche se non specificatamente identificati, non implica che tali denominazioni o marchi non siano protetti dalle relative leggi e regolamenti.

Printed on acid-free paper

Questo Springer è pubblicato dalla società registrata Springer-Verlag Italia S.r.l. parte di Springer Nature

L'indirizzo della ditta registrata è: Via Decembrio 28, 20137 Milano, Italia

Prefazione

Prefazione alla I edizione

Questo libro è rivolto essenzialmente agli studenti che preparano l'esame scritto di un corso di Meccanica Quantistica. Di riflesso questa raccolta può risultare molto utile anche ai docenti che devono proporre problemi ai loro studenti sia a lezione che per gli esami. Si assume che i contenuti del corso siano sostanzialmente identici a quelli di un tradizionale corso di Istituzioni di Fisica Teorica dei vecchi ordinamenti del corso di laurea in Fisica. Nei nuovi ordinamenti gli stessi argomenti sono stati, in generale, ripartiti su più corsi.

Come molti altri libri di problemi di Meccanica Quantistica non bisogna aspettarsi un particolare sforzo di novità. L'intento è quello di presentare dei problemi che, oltre a sondare la comprensione della materia e l'abilità di applicarla concretamente da parte dello studente, siano risolubili in un tempo limitato. Questo proposito difficilmente si coniuga con una ricerca di originalità. Si troveranno quindi problemi che sono presenti anche in altri libri a partire dai classici russi [1, 2], e quindi nella raccolta che, a partire da essi, fu curata da Ter Haar [3, 4]. Fra gli altri libri di esercizi che sono stati consultati vanno ricordati l'italiano Passatore [5] e quello più recente edito da Yung-Kuo Lim [6], che raccoglie il lavoro di ben 19 fisici cinesi. Molti problemi interessanti si trovano anche nei manuali di Meccanica Quantistica. Qui l'elenco potrebbe essere lunghissimo. Citerò soltanto quelli che ai problemi hanno dedicato maggiore spazio come il testo di Merzbacher [7], il volume dedicato alla Meccanica Quantistica del corso di Fisica Teorica L. Landau e E. Lifchitz [8], i due volumi di Messiah [9] e il più recente Shankar [10]. Una citazione particolare merita il recente testo [11] in italiano di Nardulli, sia per l'abbondanza di problemi con o senza soluzione che contiene, sia per il fatto che i problemi qui presentati sono stati proposti negli anni passati agli studenti del suo corso. A metà tra il manuale e il libro di problemi si posizionano i due volumi di Flügge [12] che forniscono utili suggerimenti, anche se spesso i problemi proposti risultano troppo complessi rispetto alle finalità di questa raccolta.

La categoria *problemi che si possono risolvere in tempi ragionevoli* non è l'unico criterio di scelta adottato. Rispetto agli altri libri non si troveranno ad esempio *i problemi che fanno normalmente parte del programma di orale* tipo i potenziali quadrati

unidimensionali o l'effetto Stark e la struttura fine. Non sono stati inseriti neanche i problemi che richiedono la conoscenza di metodi matematici non sempre presenti nei corsi standard, come, ad esempio, le equazioni differenziali fuchsiane.

Si è preferito scrivere le soluzioni con un certo dettaglio, eliminando soltanto i passaggi più semplici. Questo costa una certa fatica a chi scrive, ma sicuramente risulterà utile agli studenti.

Come in ogni altro libro, i problemi sono stati raggruppati in capitoli. In molti casi la scelta dell'attribuzione ad un capitolo può essere considerata arbitraria: molti problemi di esame presentano problematiche trasversali all'intero programma. La scelta ovvia è stata di tenere conto delle domande più caratterizzanti.

Per un certo periodo questa raccolta è stata affidata alla rete e utilizzata da docenti e studenti. È merito di alcuni di questi ultimi se molti degli errori presenti inizialmente sono stati eliminati. Ringrazio il prof. Stefano Forte che mi ha incoraggiato a pubblicarlo a stampa dopo aver completato alcune parti e riesaminato la struttura. Un ultimo doveroso ringraziamento va a mia moglie; anche l'impegno per la stesura di questo testo ha contribuito a far ricadere su di lei tanta parte degli oneri familiari. Mi scuso infine, in anticipo, con i lettori per gli errori che sicuramente mi saranno sfuggiti; ogni loro suggerimento è sicuramente gradito.

Bari, marzo 2007

Leonardo Angelini

Prefazione alla II edizione

Sono trascorsi 10 anni dalla I edizione ed era indispensabile procedere a una revisione che, prima di tutto, eliminasse, per quanto possibile, i numerosi errori presenti. Essi erano tanti, in genere di ortografia o dovuti ai cambiamenti di notazione finalizzati a dare omogeneità al testo.

Mi è sembrato opportuno ampliare la scelta dei problemi presentati ed inserire anche una parte sui metodi di approssimazione diversi dalla teoria perturbativa, già presente nella I edizione. Nella ricerca di nuovi problemi ho trovato molto interessanti quelli presentati nei testi, oltre a quelli già citati nella I edizione, di Gottfried e Yan [13] e di Sakurai e Napolitano [14].

Pur lasciando invariata le finalità della raccolta, cioè quella di presentare problemi che possono essere risolti nei tempi normalmente dedicati agli esami scritti, ho voluto inserire anche alcuni problemi che avevo tralasciato, in quanto già presenti nei libri di Meccanica quantistica, come i potenziali quadrati. Questo rende più autosufficiente il libro per quanto riguarda la notazione e i riferimenti. Ringrazio i miei studenti che mi hanno segnalato tanti errori e mi scuso con i lettori per quelli non corretti e per i nuovi sicuramente presenti nelle parti aggiunte.

Bari, luglio 2017

Leonardo Angelini

Indice

1	Operatori e funzioni d'onda	1
1.1	Commutatori e spettro	1
1.2	Costanti del moto	1
1.3	Operatore numero	2
1.4	Proprietà dell'impulso	2
1.5	Funzione d'onda e Hamiltoniano	3
1.6	Spettro di un Hamiltoniano	4
1.7	Operatore velocità per una particella carica	5
1.8	Oscillatore anarmonico e teorema del viriale	5
1.9	Potenziale coulombiano e teorema del viriale	6
1.10	Teorema del viriale per un potenziale generico	7
1.11	Teorema di Feynman-Hellmann	9
2	Sistemi unidimensionali	11
2.1	Cosa ci dice una funzione d'onda?	11
2.2	Particella libera e Parità	11
2.3	Gradino di potenziale	12
2.4	Particella vincolata su un segmento I	16
2.5	Particella vincolata su un segmento II	18
2.6	Particella vincolata su un segmento III	19
2.7	Diffusione da buca di potenziale	20
2.8	Particella legata in una buca I	22
2.9	Particella legata in una buca II	27
2.10	Barriera di potenziale	29
2.11	Particella legata in un potenziale δ	30
2.12	Diffusione da potenziale δ	31
2.13	Particella legata in un potenziale a doppia δ	32
2.14	Diffusione su potenziale a doppia δ	35
2.15	Diffusione da parete in presenza di potenziale δ	36
2.16	Stati legati di un potenziale $V(x) \propto -\cosh x^{-2}$	39
2.17	Oscillatore Armonico: operatori posizione e impulso	40
2.18	Oscillatore Armonico: energia cinetica ed energia potenziale	40

2.19	Oscillatore Armonico: aspettazione di x^4	41
2.20	Oscillatore Armonico: proprietà dello stato fondamentale	42
2.21	Stato di un Oscillatore Armonico I	43
2.22	Stato di un Oscillatore Armonico II	44
2.23	Proprietà generali dei potenziali periodici	45
2.24	Pettine di Dirac	47
2.25	Modello di Kronig-Penney	49
3	Sistemi in 2D e 3D e Momento angolare	53
3.1	Oscillatore Armonico piano	53
3.2	Oscillatore Armonico sferico	55
3.3	Riflessione e rifrazione in 3 dimensioni	56
3.4	J^2 e J_z : proprietà degli autostati	58
3.5	Misure di momento angolare in uno stato con $\ell = 1$	60
3.6	Momento angolare di un'onda piana	62
3.7	Misure di momento angolare I	63
3.8	Misure di momento angolare II	64
3.9	Misure di momento angolare III	65
3.10	Momento di dipolo	65
3.11	Momento di quadrupolo	66
3.12	Particella in una sfera	68
3.13	Stati legati di una particella in una buca sferica di potenziale	68
3.14	Particella in un nucleo	72
3.15	Particella in potenziale centrale	73
3.16	Particella carica in campo magnetico	74
3.17	Stati legati dell'atomo idrogenoide	75
3.18	Atomo d'Idrogeno unidimensionale? Una somiglianza ingannevole	77
3.19	Atomo d'Idrogeno: determinarne lo stato	78
3.20	Atomo d'Idrogeno: proprietà dello stato fondamentale	79
3.21	Atomo d'Idrogeno in campo magnetico esterno	80
3.22	Modello molecolare	81
4	Spin	85
4.1	Valore di attesa dello spin totale	85
4.2	Autostati di una componente dello Spin I	86
4.3	Autostati di una componente dello Spin II	86
4.4	Determinazione dello stato di spin I	87
4.5	Determinazione dello stato di spin II	88
4.6	Determinazione dello stato di spin III	88
4.7	Misure in apparato Stern-Gerlach	90
4.8	Autostati di un sistema di fermioni interagenti	91
4.9	Misure di spin su un fermione	92

5	Evoluzione temporale	95
5.1	Sistema a due livelli (I)	95
5.2	Sistema a due livelli (II)	98
5.3	Sistema a due livelli (III)	99
5.4	Sistema a due livelli (IV)	101
5.5	Particella su un segmento (I)	102
5.6	Particella su un segmento (II)	104
5.7	Particella su un segmento (III)	105
5.8	Oscillatore Armonico (I)	106
5.9	Oscillatore Armonico (II)	108
5.10	Oscillatore Armonico (III)	110
5.11	Fermione in campo magnetico (I)	111
5.12	Fermione in campo magnetico (II)	113
5.13	Fermione in campo magnetico (III)	115
5.14	Fermione in campo magnetico (IV)	116
5.15	Fermione in campo magnetico (V)	117
5.16	Fermione in campo magnetico (VI)	118
5.17	Rotatore piano	120
5.18	Rotatore in campo magnetico (I)	121
5.19	Rotatore in campo magnetico (II)	121
5.20	Misura su un atomo d'idrogeno	122
6	Teoria Perturbativa indipendente dal tempo	125
6.1	Particella su un segmento: perturbazione quadrata	125
6.2	Particella su un segmento: perturbazione lineare	126
6.3	Particella su un segmento: correzione sinusoidale	127
6.4	Particella su un segmento in presenza di potenziale δ	128
6.5	Particella in un quadrato: accoppiamento tra i gradi di libertà	130
6.6	Particella su una circonferenza in presenza di perturbazione	131
6.7	Due particelle debolmente interagenti su una circonferenza	133
6.8	Rotatore carico in campo elettrico	135
6.9	Rotatore piano: correzioni dovute alla forza peso	136
6.10	Oscillatore armonico: correzione anarmonica	137
6.11	Oscillatore armonico: correzione cubica	138
6.12	Oscillatore armonico: correzione relativistica	138
6.13	Oscillatore armonico anisotropo	140
6.14	Oscillatore armonico carico in campo elettrico	141
6.15	Oscillatore armonico: secondo potenziale armonico I	142
6.16	Oscillatore armonico: secondo potenziale armonico II	143
6.17	Oscillatore armonico piano: correzione lineare e quadratica	144
6.18	Oscillatori armonici accoppiati	146
6.19	Oscillatore armonico piano: accoppiamento tra i due gradi di libertà	148
6.20	Pendolo: correzione anarmonica alle piccole oscillazioni	149
6.21	Rottura della degenerazione in sistema a due stati	150
6.22	Fermione massivo in campo magnetico	152
6.23	Decadimento β in atomo idrogenoide	154

6.24	Effetto Stark	155
6.25	Idrogeno: correzioni relativistiche	157
6.26	Interazione spin-orbita	158
6.27	Stato fondamentale dell'atomo di Elio	159
7	Teoria Perturbativa dipendente dal tempo	163
7.1	Oscillatore armonico: perturbazione istantanea	163
7.2	Oscillatore armonico in campo elettrico: perturbazione istantanea	164
7.3	Particella su un segmento: perturbazione quadrata	166
7.4	Oscillatore armonico con perturbazione gaussiana	167
7.5	Oscillatore armonico con perturbazione smorzata	168
7.6	Atomo d'idrogeno in campo elettrico impulsato	169
8	Particelle identiche	171
8.1	Due fermioni su un segmento	171
8.2	Due fermioni su un segmento in presenza di potenziale δ	172
8.3	Due fermioni interagenti	173
8.4	Due oscillatori fermionici identici	174
8.5	Oscillatore doppio per particelle identiche	175
8.6	Particelle identiche in una scatola	177
8.7	Tre fermioni su un segmento con accoppiamento tra gli spin	180
8.8	Due fermioni interagenti in una sfera	180
8.9	Due fermioni sulla superficie di una sfera	182
8.10	Tre elettroni in potenziale centrale	183
9	Diffusione (Approssimazione di Born)	185
9.1	Potenziale di Yukawa e potenziale coulombiano	185
9.2	Potenziale gaussiano	186
9.3	Scattering da sfera opaca	187
10	Approssimazione WKB	189
10.1	Oscillatore Armonico	189
10.2	Caduta di un grave	190
10.3	Pozzo di potenziale infinito	192
10.4	Barriera Triangolare	194
10.5	Barriera Parabolica	195
11	Metodo Variazionale	197
11.1	Stato fondamentale dell'oscillatore anarmonico	197
11.2	Stato fondamentale della buca infinita	198
11.3	I primi livelli di energia per il potenziale lineare	199
11.4	Stato fondamentale dell'atomo di Elio	200

A	Formule utili	203
A.1	Integrali di uso frequente	203
A.1.1	Integrali Gaussiani	203
A.1.2	Integrali con funzioni esponenziali	204
A.2	Equazione di continuità	204
A.3	Oscillatore armonico	204
A.3.1	Trattazione operatoriale	204
A.3.2	Trattazione nella rappresentazione X	205
A.4	Cambiamento di coordinate	205
A.5	Momento Angolare	206
A.5.1	Trattazione operatoriale	206
A.5.2	Armoniche Sferiche	206
A.6	Equazione di Schrödinger in coordinate sferiche	207
A.6.1	L'equazione radiale	207
A.7	Funzioni di Bessel sferiche	208
A.7.1	Funzioni di Bessel sferiche di I e II specie	208
A.7.2	Funzioni di Hankel sferiche	209
A.8	Le prime autofunzioni dell'atomo d'idrogeno	209
A.9	Spin	209
A.9.1	Matrici di Pauli	209
A.9.2	Relazioni utili	210
A.10	Perturbazioni indipendenti dal tempo	210
A.11	Perturbazioni istantanee	210
A.12	Perturbazioni dipendenti dal tempo	211
A.13	Approssimazione di Born	211
A.14	Metodo WKB	212
	Riferimenti bibliografici	213

Elenco delle figure

2.1	Il potenziale a gradino	12
2.2	Particella vincolata su un segmento (pozzo di potenziale)	16
2.3	Buca di potenziale	21
2.4	Ricerca grafica dei livelli di energia per le autofunzioni pari	24
2.5	Ricerca grafica dei livelli di energia per le autofunzioni dispari	26
2.6	Barriera di potenziale	29
2.7	Soluzione grafica dell'equazione per le autofunzioni pari. Il lato destro dell'eq. (2.23) è stato riportato per $\Omega a = 0.8, 1.0, 1.2$	34
2.8	Soluzione grafica dell'equazione per le autofunzioni dispari. Il lato destro dell'eq. (2.24) è stato riportato per $\Omega a = 0.8, 1.0, 1.2$	34
2.9	$ A ^2$ in funzione di ka per $\alpha = 1$ (curva blu) e $\alpha = 3$ (curva rossa) ...	38
2.10	Soluzione grafica della disequazione (2.36) per $\Omega a = 5$	48
2.11	L'andamento dell'energia in funzione di qa confrontato con il caso della particella libera ($\Omega a = 5$)	49
2.12	Il modello di Kronig e Penney	50
3.1	Il potenziale della buca (blu), che sommato al potenziale centrifugo (rosso) dà luogo al potenziale efficace (nero)	69
3.2	Soluzione grafica dell'equazione (3.26). La retta a II membro è riportata per 3 valori differenti del coefficiente angolare: $0.3/\pi$ (rosso), $2/\pi$ (verde), $5/\pi$ (blu)	71
6.1	Pozzo di potenziale modificato da una buca	125
6.2	Pozzo di potenziale modificato da una retta	126
6.3	Soluzione grafica dell'equazione per i livelli di energia corrispondenti ad autofunzioni simmetriche. Le rette tratteggiate corrispondono a due diversi valori di ω_0	130
9.1	Andamento nella variabile $y = 2ka$ della sezione d'urto totale (a parte costanti) in approssimazione di Born per la diffusione da una sfera opaca	188

10.1	Buca di potenziale per la caduta di un grave	190
10.2	Buca di potenziale $V(x) = V_0 \cot^2 \frac{\pi x}{a}$	192
10.3	Barriera di potenziale triangolare	194
10.4	Barriera di potenziale parabolica	195

1

Operatori e funzioni d'onda

1.1 Commutatori e spettro

Dati tre operatori A, B, C , dimostrare che se $[A, B] = [A, C] = 0$, ma $[B, C] \neq 0$, lo spettro di A è degenere.

Soluzione

Supponiamo per assurdo che tutti gli autovalori di A siano non degeneri, cioè che, per ogni autovalore a di A , esista un solo stato $|\psi_a\rangle$ tale che

$$A|\psi_a\rangle = a|\psi_a\rangle.$$

Se questo è vero, ciascuno stato $|\psi_a\rangle$ deve essere anche autostato di B e C dato che A, B, C sono compatibili. Possiamo etichettare quindi lo stato $|\psi_a\rangle$ anche con gli autovalori corrispondenti di B e C :

$$A|\psi_{a,b,c}\rangle = a|\psi_{a,b,c}\rangle$$

$$B|\psi_{a,b,c}\rangle = b|\psi_{a,b,c}\rangle$$

$$C|\psi_{a,b,c}\rangle = c|\psi_{a,b,c}\rangle$$

dove ovviamente per ogni a fissato, b e c sono unici. Per ogni generico stato $|\psi\rangle$ risulta:

$$[B, C]|\psi\rangle = (BC - CB) \sum_a |\psi_{a,b,c}\rangle = \sum_a (bc - cb) |\psi_{a,b,c}\rangle = 0$$

risultato in contrasto con l'ipotesi $[B, C] \neq 0$.

1.2 Costanti del moto

Dimostrare che se per un sistema quantistico F e G sono due costanti del moto allora lo è anche $[F, G]$.

Soluzione

Se F e G sono due costanti del moto, allora, per l'equazione di Heisenberg,

$$\frac{\partial F}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}[F, H] \quad \text{e} \quad \frac{\partial G}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}[G, H].$$

Ne risulta:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[F, G] &= \frac{\partial[F, G]}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[[F, G], H] = \\ &= \frac{\partial F}{\partial t}G + F\frac{\partial G}{\partial t} - \frac{\partial G}{\partial t}F - G\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[FG - GF, H] = \\ &= \frac{i}{\hbar}[FHG - HFG + FGH - FGH - GHF + HGF - GFH + GHF] = \\ &= -\frac{i}{\hbar}[FGH - GFH - HFG + HGF] = 0. \end{aligned}$$

1.3 Operatore numero

Sia dato un operatore a che soddisfa le seguenti relazioni:

$$\begin{aligned} aa^+ + a^+a &= 1 \\ a^2 &= (a^+)^2 = 0. \end{aligned}$$

- Può l'operatore essere hermitiano?
- Dimostrare che i soli possibili autovalori per l'operatore $N = a^+a$ sono 0 e 1.

Soluzione

- Supponiamo per assurdo che a sia hermitiano: $a = a^+$. Si avrebbe:

$$aa^+ + a^+a = 2(a^+)^2 = 0$$

in contrasto con l'ipotesi.

- $N^2 = a^+aa^+a = a^+(1 - a^+a)a = a^+a - (a^+)^2a^2 = a^+a = N$.

È noto che se un operatore soddisfa un'equazione algebrica, la soddisfano anche i suoi autovalori. Infatti, detto $|\lambda\rangle$ il generico autoket di N corrispondente all'autovalore λ , avremo

$$(N^2 - N)|\lambda\rangle = (\lambda^2 - \lambda)|\lambda\rangle = 0 \Rightarrow \lambda = 0, 1.$$

1.4 Proprietà dell'impulso

Data una particella di massa m in un potenziale $V(\mathbf{r})$, sistema descritto dall'Hamiltoniano

$$H = T + V = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}),$$

dimostrare la relazione

$$\mathbf{p} = -i\frac{m}{\hbar}[\mathbf{r}, H].$$

Usare questa relazione per dimostrare che in uno stato stazionario

$$\langle \mathbf{p} \rangle = 0.$$

Soluzione

Dette r_i e p_i con $i = 1, 2, 3$ le componenti della posizione e dell'impulso, abbiamo

$$\begin{aligned} [r_i, H] &= [r_i, T] = \frac{1}{2m}(r_i p_i^2 - p_i^2 r_i) = \\ &= \frac{1}{2m}(r_i p_i^2 - p_i^2 r_i - p_i r_i p_i + p_i r_i p_i) = \\ &= \frac{1}{2m}([r_i, p_i] p_i + p_i [r_i, p_i]) = \\ &= \frac{i\hbar p_i}{m}, \end{aligned}$$

come richiesto. Detto $|\psi_E\rangle$ l'autostato di H corrispondente all'autovalore E , il valore di aspettazione di ciascuna componente dell'impulso è

$$\begin{aligned} \langle p_i \rangle &= \langle \psi_E | p_i | \psi_E \rangle = -i\frac{m}{\hbar} \langle \psi_E | [r_i, H] | \psi_E \rangle = \\ &= -i\frac{m}{\hbar} [\langle \psi_E | r_i E | \psi_E \rangle - \langle \psi_E | E r_i | \psi_E \rangle] = 0, \end{aligned}$$

purché $\langle r_i \rangle$ sia una quantità definita. Ad esempio, questo risultato non è valido nel caso di una particella libera, quando si sceglie per $|\psi_E\rangle$ l'autostato comune a H e $\mathbf{p}$.

1.5 Funzione d'onda e Hamiltoniano

Una particella è in uno stato descritto dalla seguente funzione d'onda

$$\psi(\mathbf{r}) = A \sin\left(\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{\hbar}\right).$$

- Si tratta di una particella libera?
- Cosa si può dire sul valore assunto dalla quantità di moto $\mathbf{p}$ e dall'energia E in questo stato?

Soluzione

- La funzione d'onda può solo rappresentare lo stato dinamico di un sistema. Per decidere se si tratta di una particella libera occorre conoscere l'Hamiltoniano.

b) La funzione d'onda si può riscrivere nella forma

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{A}{2i} \left(e^{i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}} - e^{-i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}} \right)$$

e rappresenta quindi la sovrapposizione di due autostati di impulso con autovalori $+\mathbf{p}$ e $-\mathbf{p}$. Poiché i coefficienti della combinazione lineare hanno uguale modulo, il valor medio della quantità di moto è nullo. Non conoscendo l'Hamiltoniano non si può dire nulla sull'energia E .

1.6 Spettro di un Hamiltoniano

Si consideri un sistema con Hamiltoniano

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{\alpha}{2}(pq + qp) + \beta q^2, \quad [q, p] = i\hbar$$

Si dica per quali valori di α e β H è limitato inferiormente e, in questo caso, si trovino autovalori e relativi autostati.

Soluzione

L'Hamiltoniano può essere riscritto nella forma:

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} [p^2 + \alpha m(pq + qp) + m^2 \alpha^2 q^2 - m^2 \alpha^2 q^2 + \beta q^2] = \\ &= \frac{1}{2m} (p + m\alpha q)^2 + \left(\beta - \frac{m\alpha^2}{2} \right) q^2 = \\ &= \frac{1}{2m} p'^2 + \left(\beta - \frac{m\alpha^2}{2} \right) q^2 \end{aligned}$$

dove

$$p' = p + m\alpha q.$$

Notiamo ora che:

- $[q, p'] = [q, p + m\alpha q] = [q, p] = i\hbar$.
- p' è hermitiano, essendo combinazione lineare di due operatori hermitiani, purché α sia reale.

(Notare che queste proprietà valgono anche nel caso di $p' = p + f(q)$ con $f(q)$ funzione reale di q .)

Imponiamo che H sia limitato inferiormente:

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \frac{1}{2m} \langle p' \psi | p' \psi \rangle + \left(\beta - \frac{m\alpha^2}{2} \right) \langle q \psi | q \psi \rangle > -\infty.$$

Essendo il I termine positivo o nullo, tale condizione è verificata per ogni $|\psi\rangle$ purché

$$\beta > \frac{m\alpha^2}{2}.$$

Per questo Hamiltoniano si può, in queste condizioni, ripetere la trattazione usuale per l'oscillatore armonico. Si hanno quindi gli stessi autovalori e gli stessi autostati, con pulsazione:

$$\omega = \sqrt{\frac{2\beta}{m} - \alpha^2}.$$

1.7 Operatore velocità per una particella carica

Per una particella carica in un campo magnetico trovare le regole di commutazione tra gli operatori corrispondenti alle componenti della velocità.

Soluzione

Detto $\mathbf{A}$ il potenziale vettore che genera il campo magnetico $\mathbf{B}$, avremo

$$\hat{P}_i = m\hat{v}_i + \frac{q}{c}A_i,$$

dove le componenti del potenziale vettore non sono operatori, mentre $\hat{P}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}$. Quindi, nella rappresentazione delle coordinate,

$$\begin{aligned} [\hat{v}_i, \hat{v}_j] \psi(\mathbf{r}) &= \frac{1}{m^2} \left[\hat{P}_i - \frac{q}{c}A_i, \hat{P}_j - \frac{q}{c}A_j \right] \psi(\mathbf{r}) = \\ &= \frac{q}{mc^2} \{ [\hat{P}_j, A_i] - [\hat{P}_i, A_j] \} \psi(\mathbf{r}) = \\ &= \frac{i\hbar q}{mc^2} \left(A_i \frac{\partial \psi(\mathbf{r})}{\partial x_j} - \frac{\partial A_j \psi(\mathbf{r})}{\partial x_i} + A_j \frac{\partial \psi(\mathbf{r})}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i \psi(\mathbf{r})}{\partial x_j} \right) = \\ &= \frac{i\hbar q}{mc^2} \left(\frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j} \right) \psi(\mathbf{r}) = \\ &= \frac{i\hbar q}{mc^2} \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk} B_k \psi(\mathbf{r}), \end{aligned}$$

dove ε_{ijk} è il tensore di Levi-Civita.

1.8 Oscillatore anarmonico e teorema del viriale

Un sistema unidimensionale è descritto dall'Hamiltoniano

$$H = \frac{p^2}{2m} + \lambda q^4.$$

Dato un autostato $|\psi\rangle$ dell'Hamiltoniano si dimostri che

$$\langle \mathcal{T} \rangle = \langle \psi | \mathcal{T} | \psi \rangle = 2 \langle \psi | \mathcal{V} | \psi \rangle = 2 \langle \mathcal{V} \rangle$$

dove $\mathcal{T} = p^2/2m$ e $\mathcal{V}$ è l'energia potenziale $\mathcal{V} = \lambda q^4$.

Soluzione

$$\begin{aligned}
\langle \psi | \mathcal{V} | \psi \rangle &= -\frac{1}{4i\hbar} \langle \psi | q[p, \mathcal{H}] | \psi \rangle \\
&= -\frac{1}{4i\hbar} \langle \psi | qp\mathcal{H} - q\mathcal{H}p | \psi \rangle \\
&= -\frac{1}{4i\hbar} \langle \psi | qp\mathcal{H} - [q, \mathcal{H}]p - \mathcal{H}qp | \psi \rangle \\
&= \frac{1}{4i\hbar} \langle \psi | [q, \mathcal{H}]p | \psi \rangle.
\end{aligned}$$

Essendo

$$\begin{aligned}
[q, \mathcal{H}] &= [q, \mathcal{T}] = \frac{1}{2m} (qp^2 - p^2q) \\
&= \frac{1}{2m} (qp^2 - p^2q - pq p + pqp) \\
&= \frac{1}{2m} ([q, p]p + p[q, p]) \\
&= \frac{i\hbar p}{m},
\end{aligned}$$

risulta

$$\langle \psi | \mathcal{V} | \psi \rangle = \frac{1}{4i\hbar} \frac{i\hbar}{m} \langle \psi | p^2 | \psi \rangle = \frac{1}{2} \langle \psi | \mathcal{T} | \psi \rangle.$$

1.9 Potenziale coulombiano e teorema del viriale

- a) Utilizzando l'equazione di Schrödinger, dimostrare che, per ogni grandezza fisica Ω relativa ad un dato sistema fisico, è valido il Teorema di Ehrenfest

$$\frac{d\langle \Omega \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\Omega, \mathcal{H}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \Omega}{\partial t} \right\rangle.$$

- b) Applicando il risultato precedente al caso dell'operatore $\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}$, dimostrare il Teorema del Viriale per il potenziale coulombiano che mette in relazione i valori di attesa in uno stato stazionario dell'energia cinetica media $\mathcal{T}$ e dell'energia potenziale $\mathcal{V}$:

$$\langle \mathcal{T} \rangle = -\frac{1}{2} \langle \mathcal{V} \rangle.$$

Soluzione

- a) Supponiamo che il sistema fisico in oggetto sia, all'istante t , nello stato $|\psi(t)\rangle$. Dalla definizione di valore di attesa

$$\langle \Omega \rangle = \langle \psi(t) | \Omega | \psi(t) \rangle$$

e dall'equazione di Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \mathcal{H} |\psi(t)\rangle$$

deriva

$$\begin{aligned} \frac{d\langle \Omega \rangle}{dt} &= \frac{\partial \langle \psi(t) |}{\partial t} \Omega |\psi(t)\rangle + \langle \psi(t) | \frac{\partial \Omega}{\partial t} |\psi(t)\rangle + \langle \psi(t) | \Omega \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | (\Omega \mathcal{H} - \mathcal{H} \Omega) |\psi(t)\rangle + \left\langle \frac{\partial \Omega}{\partial t} \right\rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\Omega, \mathcal{H}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \Omega}{\partial t} \right\rangle \end{aligned}$$

dove abbiamo tenuto conto del fatto che, nello schema di Schrödinger, gli operatori dipendono dal tempo solo esplicitamente.

- b) Poiché trattasi di stato stazionario e di un operatore che non dipende dal tempo

$$\frac{d\langle \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \rangle}{dt} = \frac{\partial \langle \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \rangle}{\partial t} = 0.$$

Applicando il Teorema di Ehrenfest si ha:

$$0 = \langle [\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}, \mathcal{H}] \rangle = \langle [\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}, \mathcal{T}] \rangle + \langle [\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}, \mathcal{V}] \rangle = \langle [\mathbf{r}, \mathcal{T}] \cdot \mathbf{p} \rangle + \langle \mathbf{r} \cdot [\mathbf{p}, \mathcal{V}] \rangle.$$

Utilizzando $[r_i, p_i] = i\hbar$ si ottiene

$$[x_i, p_i^2] = 2i\hbar p_i \Rightarrow \langle [\mathbf{r}, \mathcal{T}] \cdot \mathbf{p} \rangle = 2i\hbar \langle \mathcal{T} \rangle$$

mentre si trova facilmente:

$$\left[\nabla, \frac{1}{r} \right] = -\frac{\mathbf{r}}{r^3} \Rightarrow \langle \mathbf{r} \cdot [\mathbf{p}, \mathcal{V}] \rangle = i\hbar e^2 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = i\hbar \langle \mathcal{V} \rangle.$$

Sostituendo queste due relazioni nella precedente si ottiene il risultato cercato.

1.10 Teorema del viriale per un potenziale generico

- a) Utilizzando l'equazione di Schrödinger, dimostrare che, per ogni grandezza fisica Ω relativa ad un dato sistema fisico, è valido il Teorema di Ehrenfest

$$\frac{d\langle \Omega \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\Omega, \mathcal{H}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \Omega}{\partial t} \right\rangle.$$

- b) Considerato un sistema a N gradi libertà, applicare il risultato precedente al caso dell'operatore

$$Q = \sum_{i=1}^N r_i p_i,$$

dimostrare il Teorema del Viriale che mette in relazione i valori di attesa in uno stato stazionario dell'energia cinetica media $\mathcal{T}$ e dell'energia potenziale $\mathcal{V}$ (non dipendente dal tempo):

$$\langle \mathcal{T} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left\langle q_i \frac{\partial \mathcal{V}}{\partial q_i} \right\rangle.$$

- c) Applicare il risultato precedente al caso dell'Oscillatore Armonico unidimensionale.

Soluzione

- a) Per la soluzione di questo punto rinviamo all'esercizio 1.9.
- b) Indicando con q l'insieme delle coordinate di posizione e con p l'insieme degli impulsi coniugati, abbiamo $\mathcal{H}(q, p) = \mathcal{T}(p) + \mathcal{V}(q)$, quindi

$$[Q, \mathcal{H}] = \sum_{i=1}^N [q_i p_i, \mathcal{H}] = \sum_{i=1}^N [q_i, \mathcal{T}] p_i + \sum_{i=1}^N q_i [p_i, \mathcal{V}]. \quad (1.1)$$

Calcoliamo separatamente i commutatori presenti sul lato destro.

$$[q_i, \mathcal{T}] = \frac{1}{2m_i} [q_i, p_i^2] = \frac{1}{2m_i} (q_i p_i^2 - p_i^2 q_i) = \frac{1}{2m_i} (p_i^2 q_i + 2i\hbar p_i - p_i^2 q_i) = \frac{i\hbar p_i}{m_i}.$$

Considerando lo sviluppo in serie di potenze di q_i del potenziale $\mathcal{V} = \sum_n c_n q_i^n$, otteniamo

$$\begin{aligned} [p_i, \mathcal{V}] &= \sum_n c_n [p_i, q_i^n] = \sum_n c_n [p_i q_i^n - q_i^n p_i] = \sum_n c_n [q_i^n p_i - i\hbar n q_i^{n-1} - q_i^n p_i] = \\ &= -i\hbar \sum_n c_n n q_i^{n-1} = -i\hbar \frac{\partial \mathcal{V}}{\partial q_i}. \end{aligned}$$

Sostituendo questi risultati nella (1.1) si ha

$$[Q, \mathcal{H}] = 2i\hbar \mathcal{T} - i\hbar \sum_{i=1}^N q_i \frac{\partial \mathcal{V}}{\partial q_i}. \quad (1.2)$$

Applichiamo ora il Teorema di Ehrenfest alla osservabile Q , nell'ipotesi che il sistema si trovi in uno stato stazionario, si ha

$$\frac{d\langle Q \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [Q, \mathcal{H}] \rangle + \left\langle \frac{\partial Q}{\partial t} \right\rangle.$$

Dato che nè Q , nè la distribuzione di probabilità dello stato stazionario dipendono dal tempo, risulta

$$\langle [Q, \mathcal{H}] \rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad 2\langle \mathcal{T} \rangle = \sum_{i=1}^N q_i \left\langle \frac{\partial \mathcal{V}}{\partial q_i} \right\rangle.$$

- c) L'energia potenziale di un Oscillatore Armonico unidimensionale è

$$\mathcal{V}(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2.$$

Quindi la sua energia cinetica media in un qualsiasi stato è data da

$$\langle \mathcal{T} \rangle = \frac{x}{2} \left\langle \frac{d\mathcal{V}}{dx} \right\rangle = \left\langle \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right\rangle = \langle \mathcal{V} \rangle.$$

1.11 Teorema di Feynman-Hellmann

Dato un sistema fisico, sia $\mathcal{H}$ il suo hamiltoniano di autovalori E e autoket $|E\rangle$ normalizzati:

$$\mathcal{H}|E\rangle = E|E\rangle.$$

Supponiamo che l'hamiltoniano dipenda da un parametro λ , $\mathcal{H} = \mathcal{H}(\lambda)$. Anche i suoi autovalori dipenderanno da λ , $E = E(\lambda)$.

Dimostrare che vale la relazione

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{H}(\lambda)}{\partial \lambda} \right\rangle = \frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda}.$$

Soluzione

Essendo E autovalore relativo a $|E\rangle$, deve risultare

$$E(\lambda) = \langle E | \mathcal{H}(\lambda) | E \rangle.$$

Ne segue che

$$\begin{aligned} \frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda} &= \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle E | \mathcal{H}(\lambda) | E \rangle = \\ &= \frac{\partial \langle E |}{\partial \lambda} \mathcal{H}(\lambda) | E \rangle + \langle E | \frac{\partial \mathcal{H}(\lambda)}{\partial \lambda} | E \rangle + \langle E | \mathcal{H}(\lambda) \frac{\partial | E \rangle}{\partial \lambda} = \\ &= \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}(\lambda)}{\partial \lambda} \right\rangle + E \left(\frac{\partial \langle E |}{\partial \lambda} | E \rangle + \langle E | \frac{\partial | E \rangle}{\partial \lambda} \right) = \\ &= \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}(\lambda)}{\partial \lambda} \right\rangle + E \left(\frac{\partial}{\partial \lambda} \langle E | E \rangle \right) = \\ &= \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}(\lambda)}{\partial \lambda} \right\rangle. \end{aligned}$$

2

Sistemi unidimensionali

2.1 Cosa ci dice una funzione d'onda?

Si sa che ad un certo istante una particella è descritta dalla funzione d'onda

$$\psi(x) = A \cos kx.$$

Si può concludere che

- a) descrive uno stato di impulso definito?
- b) descrive una particella libera?

Soluzione

- a) La funzione d'onda è la sovrapposizione di due autofunzioni dell'impulso. Infatti

$$\psi(x) = \frac{A}{2} \left(e^{ikx} + e^{-ikx} \right)$$

rappresenta la sovrapposizione di due stati con impulso $p = \hbar k$ e $p = -\hbar k$. Poiché essi hanno uguali ampiezze sono equiprobabili. È definita invece l'energia $E = \frac{p^2}{2m}$.

- b) Anche in questo caso la risposta è negativa. Essa potrebbe essere autofunzione di un'Hamiltoniano in assenza di potenziale. Ciononostante occorre ricordare che la funzione d'onda specifica lo stato di un sistema, non la dinamica del sistema stesso. Questa è, invece, specificata dall'Hamiltoniano, che, in questo caso, non è noto.

2.2 Particella libera e Parità

Per una particella libera in una dimensione l'insieme di osservabili costituito dall'Hamiltoniano e dalla Parità costituisce un insieme completo di osservabili?

Soluzione

Ad un fissato valore dell'energia di una particella libera in una dimensione corrispondono due autostati linearmente indipendenti che, nella rappresentazione $\mathbf{X}$, sono dati da:

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{px}{\hbar}} \quad \text{e} \quad \psi_{-p}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i\frac{px}{\hbar}}$$

e qualsiasi loro combinazione lineare è anch'essa autostato dell'Hamiltoniano. Poiché l'Hamiltoniano è dato dall'operatore Energia Cinetica, proporzionale alla derivata seconda rispetto a x , esso commuta con l'operatore Parità. Le combinazioni lineari di $\psi_p(x)$ e $\psi_{-p}(x)$ con parità determinata sono, a parte normalizzazione, $\cos(px/\hbar)$ con parità $P = +1$ e $\sin(px/\hbar)$ con parità $P = -1$. Dato che questi autostati comuni all'Hamiltoniano e alla Parità sono completamente determinati, questi due operatori costituiscono un insieme completo di osservabili compatibili per questo sistema fisico.

2.3 Gradino di potenziale

Considerare una particella incidente da sinistra sul potenziale

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{per } x < 0; \\ V_0, & \text{per } x > 0. \end{cases}$$

Studiare il suo comportamento per autovalori dell'energia inferiori e superiori a V_0 determinando la natura dello spettro dell'energia.

Soluzione

Gli autovalori E sono positivi, dato che, come è noto, essi devono essere maggiori del minimo del potenziale. Calcoliamo le soluzioni in ciascuna delle due regioni nelle

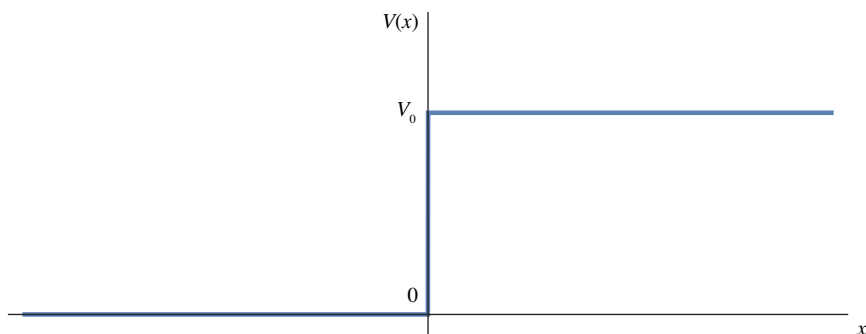


Figura 2.1. Il potenziale a gradino

quali il potenziale è costante. Denominiamo regione I il semiasse negativo e regione II il semiasse positivo.

Regione I

In questa regione l'equazione di Schrödinger si scrive:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = E \psi(x),$$

cioè

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + k^2 \psi(x),$$

dove

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0.$$

La soluzione generale è data da una combinazione lineare dei due integrali linearmente indipendenti per la particella libera:

$$\psi(x) = e^{ikx} + R e^{-ikx}, \quad (2.1)$$

dove abbiamo posto uguale a 1 il coefficiente dell'onda piana che si propaga verso destra. Il primo termine viene detto onda (piana) *incidente* e il secondo onda (piana) *riflessa*. Per dare significato fisico a questa soluzione calcoliamo la corrispondente corrente di probabilità usando la (A.11), tenendo conto del fatto che in questo caso non vi è dipendenza dal tempo e siamo in un caso unidimensionale.

$$\begin{aligned} j(x) &= \frac{\hbar}{m} \Im \left[\psi^*(x) \frac{d}{dx} \psi(x) \right] = \\ &= \frac{\hbar}{m} \Im \left[(e^{-ikx} + R^* e^{ikx}) (ike^{ikx} - ikR e^{-ikx}) \right] = \\ &= \frac{\hbar k}{m} \Re \left[(e^{-ikx} + R^* e^{ikx}) (e^{ikx} - R e^{-ikx}) \right] = \\ &= \frac{\hbar k}{m} \Re \left(1 - |R|^2 + R^* e^{2ikx} + R e^{-2ikx} \right) = \\ &= \frac{\hbar k}{m} (1 - |R|^2) = v \cdot 1 - v \cdot |R|^2. \end{aligned}$$

La densità di corrente di probabilità è composta, pertanto, di due termini costanti: il primo rappresenta una densità di corrente di probabilità che si propaga con velocità v da sinistra verso destra e il secondo una densità di corrente che si propaga con velocità opposta. Si tratta rispettivamente di una densità di corrente di $1 \cdot v$ particelle e di $|R|^2 \cdot v$ particelle al secondo che attraversano ciascun punto.

Regione II

In questa regione l'equazione di Schrödinger si scrive:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V_0 \psi(x) = E \psi(x),$$

cioè

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + k'^2 \psi(x) = 0,$$

dove

$$k' = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} = \frac{p'}{\hbar} = \frac{mv'}{\hbar}.$$

Distinguiamo ora i casi E maggiore o minore di V_0 .

Caso $E > V_0$

In questo caso k' è reale. Ancora una volta la soluzione generale è del tipo

$$\psi(x) = T e^{ik'x} + S e^{-ik'x} \quad (2.2)$$

con T e S costanti. Poiché la particella proviene da sinistra deve essere $S = 0$. Non calcoleremo, quindi l'integrale generale dell'equazione, ma una soluzione particolare corrispondente a particelle che sono inviate da sinistra verso destra. Consideriamo, pertanto,

$$\psi(x) = T e^{ik'x}, \quad (2.3)$$

che corrisponde ad una densità di corrente di $v' \cdot |T|^2$ particelle che passano per ciascun punto della regione II al secondo. Per determinare i coefficienti R e T ricordiamo che la funzione d'onda e la sua derivata prima devono essere continue ovunque, compreso il punto $x = 0$ di frontiera tra le due regioni I e II. Otteniamo così il sistema lineare di due equazioni

$$\begin{cases} 1 + R = T \\ ik(1 - R) = ik'T \end{cases}$$

che ha soluzione

$$R = \frac{k - k'}{k + k'} \quad (2.4)$$

$$T = \frac{2k}{k + k'}. \quad (2.5)$$

Dai valori di R e T otteniamo le correnti

$$\begin{aligned} v|R|^2 &= v \left(\frac{k - k'}{k + k'} \right)^2 \\ v'|T|^2 &= v' \frac{4k^2}{(k + k')^2}. \end{aligned}$$

È facile verificare che

$$v(1 - |R|^2) = v'|T|^2,$$

cioè la corrente è la stessa nelle due regioni.

Notiamo che:

- nel limite $E \gg 0$, cioè per $k \rightarrow k'$, $|R|^2 \rightarrow 0$ e $|T|^2 \rightarrow 1$, confermando l'intuizione che a grande energia la presenza del gradino può essere trascurata rispetto alla situazione della particella libera;

- emerge un'importante novità rispetto al comportamento classico delle particelle: la presenza di una perturbazione nel potenziale genera una probabilità finita di riflessione all'indietro della particella.¹

Caso $E < V_0$

Notiamo che, essendo $E - V_0 < 0$, risulta

$$k'^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} = (\imath\chi)^2 \quad \text{dove} \quad \chi = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad \text{è reale e positivo.}$$

Possiamo riscrivere l'equazione di Schrödinger nella forma:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \chi^2 \psi(x) = 0, \quad (2.6)$$

il cui integrale generale è ancora del tipo (2.2), ma con esponenti reali:

$$\psi(x) = Te^{-\chi x} + Se^{\chi x}. \quad (2.7)$$

Notiamo ora che, dato che la regione II si estende verso $x = +\infty$, il secondo termine non è accettabile perché diverge in questo limite. Abbiamo, pertanto,

$$\psi(x) = Te^{-\chi x}. \quad (2.8)$$

Risolvendo ora il nuovo sistema che si ottiene imponendo le condizioni di continuità o, più semplicemente, con la sostituzione $\imath k' \rightarrow -\chi$ nelle (2.4) e (2.5), otteniamo i due coefficienti R e T :

$$R = \frac{k - \imath\chi}{k + \imath\chi}$$

$$T = \frac{2k}{k + \imath\chi}.$$

In questo caso possiamo notare che:

- R ha modulo 1, mentre, poiché nella regione II la funzione d'onda è reale, la corrente trasmessa è nulla; per questo la corrente riflessa è uguale a quella incidente e tutte le particelle, come accade in meccanica classica, tornano indietro.
- Contrariamente, invece, a quanto accade in meccanica classica per la quale non vi possono essere particelle nella regione II in quanto l'energia cinetica diventerebbe negativa, abbiamo una probabilità non nulla di trovare particelle nella regione $x > 0$.

¹ Il comportamento è analogo a quanto avviene in ottica, dove un cambiamento dell'indice di rifrazione genera un'onda riflessa. Di fatto, le onde elettromagnetiche monocromatiche, una volta eliminata la dipendenza dal tempo, sono governate dalla stessa equazione con il termine $2m(V - E)/\hbar^2$ sostituito da k^2/c^2 , dove c è la velocità di propagazione delle onde elettromagnetiche, funzione dell'indice di rifrazione.

In entrambi i casi $E > V_0$ e $E < V_0$ l'energia può assumere qualsiasi valore positivo, quindi lo spettro dell'energia per questo potenziale è continuo. Tuttavia nei due casi la degenerazione degli autovalori è differente.

$E > V_0$. Lo spettro è doppiamente degenere. Infatti, anche se abbiamo trovato una sola soluzione del problema, ciò è la conseguenza del fatto di aver posto il coefficiente $S = 0$, in modo da riprodurre una situazione fisicamente riproducibile. Esiste, tuttavia, una soluzione linearmente indipendente da questa, corrispondente all'invio di particelle in direzione opposta all'asse x .

$E < V_0$. In questo caso, invece, abbiamo dovuto porre $S = 0$ perché altrimenti avremmo avuto una soluzione divergente all'infinito. Uno dei due integrali linearmente indipendenti dell'equazione agli autovalori non fa parte dello spazio delle funzioni d'onda accettabili fisicamente e, di conseguenza, gli autovalori compresi tra 0 e V_0 sono non degeneri.

2.4 Particella vincolata su un segmento I

Una particella che è vincolata a muoversi su un segmento può essere descritta tramite il potenziale:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{per } 0 < x < L; \\ +\infty, & \text{altrove,} \end{cases}$$

detto anche pozzo di potenziale o buca di potenziale infinita. Determinare le proprietà dello spettro dell'energia e delle corrispondenti autofunzioni.

Soluzione

La funzione d'onda della regione è diversa da zero solo per $0 < x < L$. Infatti, consideriamo ad esempio, la regione $x > L$. Dato che qui il potenziale è infinito, esso è superiore a qualsiasi autovalore E dell'energia noi possiamo fissare. Per questo

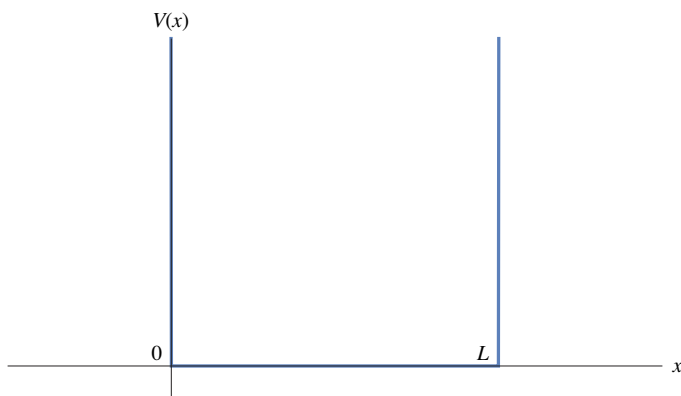


Figura 2.2. Particella vincolata su un segmento (pozzo di potenziale)

potremo risolvere l'equazione di Schrödinger supponendo che in questa regione il potenziale abbia un valore costante $V_0 > E$ e poi prendere il limite della soluzione per $V_0 \rightarrow \infty$. Siamo nella stessa situazione del problema precedente quando si considera il caso $E < V_0$ per la regione II. Abbiamo quindi un'unica soluzione

$$\psi(x) = T e^{-\chi x}.$$

Se adesso consideriamo il limite $V_0 \rightarrow \infty$, abbiamo

$$\lim_{V_0 \rightarrow \infty} \chi = \lim_{V_0 \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} = +\infty \quad \Rightarrow \quad \lim_{V_0 \rightarrow \infty} \psi(x) = 0.$$

Quindi per $x > L$ la funzione d'onda si annulla e analogo ragionamento può essere ripetuto nella regione $x < 0$.

Risolviamo l'equazione di Schrödinger nella regione $0 < x < L$ imponendo che la funzione d'onda si annulli agli estremi del segmento. In questa regione la particella è libera e potremmo considerare come soluzioni linearmente indipendenti le due onde piane dirette in verso opposto. Consideriamo invece, come integrale generale, la soluzione equivalente

$$\psi(x) = A \sin(kx + \delta) \quad \text{dove} \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

La condizione di annullamento in $x = 0$ comporta

$$\delta = 0,$$

mentre, applicando la stessa condizione in $x = L$, abbiamo

$$kL = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} L = n\pi \quad \text{dove} \quad n = 1, 2, \dots$$

Da questa relazione si ricava che gli autovalori dell'energia sono dati da:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} \quad \text{dove} \quad n = 1, 2, \dots$$

Infine determiniamo A normalizzando le autofunzioni:

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^L dx |A|^2 \sin^2 \frac{n\pi x}{L} = \frac{|A|^2}{2} \int_0^L dx \left(1 - \cos \frac{2n\pi x}{L} \right) = \\ &= \frac{|A|^2 L}{2} \quad \Rightarrow \quad A = \sqrt{\frac{2}{L}}, \end{aligned}$$

a meno di un fattore di fase arbitrario. Pertanto le autofunzioni normalizzate sono date da

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \quad \text{con} \quad n = 1, 2, \dots,$$

nella regione $x \in [0, L]$ e nulle altrove. Queste autofunzioni sono simmetriche intorno a $x = \frac{L}{2}$ per n dispari e antisimmetriche per n pari.

In conclusione lo spettro dell'energia è discreto e gli autovalori sono tutti non degeneri.

2.5 Particella vincolata su un segmento II

Una particella di massa m si muove di moto unidimensionale in presenza di un potenziale a buca infinita di larghezza L :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x \in [0, L], \\ +\infty & \text{altrimenti.} \end{cases}$$

Calcolare il valor di attesa e lo scarto quadratico medio delle variabili posizione e impulso negli autostati dell'energia. Commentare il risultato alla luce del principio di indeterminazione.

Soluzione

Ricordiamo che per il pozzo di potenziale (vedi problema 2.4) gli autovalori dell'energia sono dati da

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (2.9)$$

e le corrispondenti autofunzioni nella regione $x \in [0, L]$ sono date da

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (2.10)$$

e nulle altrove. Le distribuzioni di probabilità sono funzioni simmetriche rispetto al punto $x = \frac{L}{2}$, pertanto

$$\langle x \rangle = \frac{L}{2}.$$

Per uno stato legato il valore di attesa dell'impulso è sempre nullo (vedi problema 1.4). Questa proprietà può essere facilmente dimostrata nel caso in oggetto. Infatti, dato che le autofunzioni, a parte un fattore di fase arbitrario, sono reali, si ha:

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{2} \int_0^L dx \frac{d}{dx} \psi^2(x) = \frac{\hbar}{2i} \psi^2(x) \Big|_0^L = 0.$$

Calcoliamo lo scarto quadratico medio di p . Poiché $\langle p \rangle = 0$

$$(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle = 2m \langle E \rangle = 2mE_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{L^2}.$$

Analogamente, il valor medio di x^2 è dato da

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \frac{2}{L} \int_0^L dx x^2 \sin^2 \frac{n\pi x}{L} = \frac{2L^2}{n^3 \pi^3} \int_0^{n\pi} dy y^2 \sin^2 y = \\ &= \frac{2L^2}{n^3 \pi^3} \left(\frac{n^3 \pi^3}{6} - \frac{1}{4} n\pi \cos(2n\pi) - \frac{1}{8} (1 - 6n^2 \pi^2) \sin(2n\pi) \right) = \\ &= L^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2n^2 \pi^2} \right), \end{aligned} \quad (2.11)$$

dove si è integrato ripetutamente per parti.

L'indeterminazione sulla posizione è data da

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = L^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2n^2\pi^2} \right) - \frac{a^2}{4} = L^2 \left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2\pi^2} \right).$$

Il prodotto delle indeterminazioni di x e p è quindi

$$\Delta x \Delta p = \hbar n \pi \sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2\pi^2}}.$$

Tale prodotto assume nello stato fondamentale il suo minimo valore (circa $0.57\hbar$, leggermente superiore a $\hbar/2$) e cresce al crescere di n .

2.6 Particella vincolata su un segmento III

Una particella di massa m , soggetta al potenziale

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x \in [0, L], \\ +\infty & \text{altrimenti,} \end{cases}$$

si trova, all'istante $t=0$, nello stato corrispondente alla funzione d'onda

$$\psi(x) = \frac{2}{\sqrt{L}} \cos \frac{\pi x}{2L} \sin \frac{3\pi x}{2L}.$$

- Scrivere la funzione d'onda come sovrapposizione di autostati dell'Hamiltoniano;
- il valore di attesa dell'energia;
- il valore di attesa della quantità di moto;
- il valore di attesa della posizione.

Soluzione

Ricordiamo che per il pozzo di potenziale (vedi problema 2.4) gli autovalori dell'energia sono dati da

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (2.12)$$

e le corrispondenti autofunzioni nella regione $x \in [0, L]$ sono date da

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (2.13)$$

e nulle altrove.

a) Tenendo conto della relazione

$$\cos \alpha \sin \beta = \frac{1}{2} [\sin(\alpha + \beta) \cos(\alpha - \beta)],$$

troviamo subito

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_1(x) + \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_2(x).$$

b) Il valore di attesa dell'energia è dato da

$$\langle E \rangle_\psi = \langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle = \frac{1}{2} E_1 + \frac{1}{2} E_2 = \frac{5\pi^2 \hbar^2}{4mL^2}.$$

c) Al fine di calcolare il valore di attesa dell'impulso, ricordiamo che (vedi problema 2.5) esso è sempre nullo nel caso di stati legati. Abbiamo, quindi:

$$\begin{aligned} \langle p \rangle_\psi &= \langle \psi | p | \psi \rangle = \frac{1}{2} \langle p \rangle_{\psi_1} + \frac{1}{2} \langle p \rangle_{\psi_2} + \frac{1}{2} \langle \psi_1 | p | \psi_2 \rangle + \frac{1}{2} \langle \psi_2 | p | \psi_1 \rangle = \\ &= \frac{1}{2} 2 \Re(\langle \psi_1 | p | \psi_2 \rangle) = \Re \left(\frac{\hbar}{i} \frac{2}{L} \int_0^L dx \sin \frac{\pi x}{L} \cdot \frac{2\pi}{L} \cdot \cos \frac{2\pi x}{L} \right) = 0 \end{aligned}$$

dato che si tratta della parte reale di un immaginario puro.

d) Calcoliamo, infine, il valore di attesa della posizione:

$$\begin{aligned} \langle x \rangle_\psi &= \langle \psi | x | \psi \rangle = \frac{1}{2} \langle x \rangle_{\psi_1} + \frac{1}{2} \langle x \rangle_{\psi_2} + \frac{1}{2} \langle \psi_1 | x | \psi_2 \rangle + \frac{1}{2} \langle \psi_2 | x | \psi_1 \rangle = \\ &= \frac{L}{2} + \frac{L}{2} + \langle \psi_1 | x | \psi_2 \rangle = a + \frac{2}{L} \int_0^L dx x \sin \frac{\pi x}{L} \sin \frac{2\pi x}{L} = \\ &= a + \frac{4L}{\pi^2} \int_0^\pi d\alpha \alpha \sin^2 \alpha \cos \alpha = \\ &= a + \frac{4L}{3\pi^2} \left[\alpha \sin^3 \alpha \Big|_0^\pi - \int_0^\pi d\alpha \sin^3 \alpha \right] = \\ &= a - \frac{4L}{3\pi^2} \left(z - \frac{z^3}{3} \right) \Big|_{-1}^{+1} = \left(1 - \frac{16}{9\pi^2} \right) L \simeq 0.82L. \end{aligned}$$

2.7 Diffusione da buca di potenziale

Consideriamo la seguente buca di potenziale:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{per } |x| > a; \\ -V_0, & \text{per } |x| < a. \end{cases}$$

Nel caso di autovalori positivi dell'energia considerare una particella proveniente da sinistra e studiare il comportamento delle autofunzioni e le caratteristiche dello spettro dell'energia.

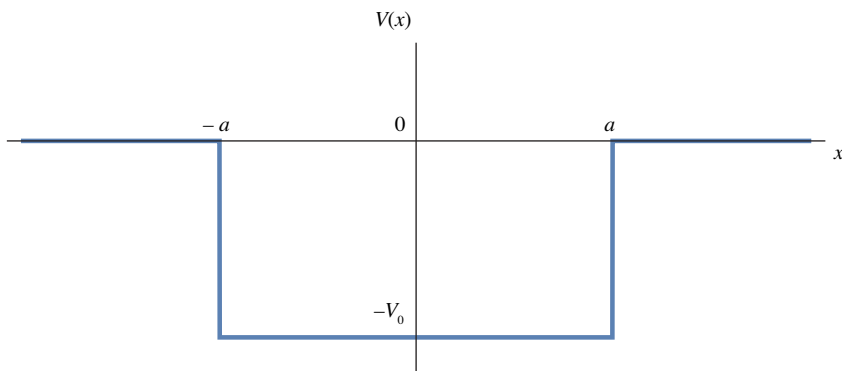


Figura 2.3. Buca di potenziale

Soluzione

Introduciamo i numeri d'onda k e k' relativi alle regioni nelle quali il potenziale è costante.

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \text{e} \quad k' = \sqrt{\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}}.$$

Scriviamo le soluzioni nelle 3 regioni a potenziale costante nella forma

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx}, & \text{per } x < -a; \\ Ae^{ik'x} + Be^{-ik'x}, & \text{per } |x| < a; \\ Te^{ikx}, & \text{per } x > a. \end{cases} \quad (2.14)$$

Come richiesto, la soluzione rappresenta il moto di una particella proveniente da sinistra che, interagendo con la buca, può essere riflessa o trasmessa. La corrente di probabilità nelle 3 regioni è pari a

$$j(x) = \begin{cases} \frac{\hbar k}{m} - \frac{\hbar k}{m} |R|^2, & \text{per } x < -a; \\ \frac{\hbar k'}{m} |A|^2 - \frac{\hbar k'}{m} |B|^2, & \text{per } |x| < a; \\ \frac{\hbar k}{m} |T|^2, & \text{per } x > a. \end{cases}$$

I coefficienti R , A , B e T , possono essere ricavati imponendo le condizioni di continuità della funzione d'onda e della sua derivata nei punti di confine tra le regioni di potenziale costante, a e $-a$. Si hanno le seguenti equazioni:

$$\begin{aligned} e^{-ika} + Re^{ika} &= Ae^{-ik'a} + Be^{ik'a} \\ ik(e^{-ika} - Re^{ika}) &= ik'(Ae^{-ik'a} - Be^{ik'a}) \\ Ae^{ik'a} + Be^{-ik'a} &= Te^{ika} \\ ik'(Ae^{ik'a} - Be^{-ik'a}) &= ikTe^{ika}. \end{aligned}$$

Risolto il sistema, troviamo per R e T le seguenti espressioni

$$R = e^{-2ika} \frac{(k'^2 - k^2) \sin 2k'a}{2kk' \cos 2k'a - i(k'^2 + k^2) \sin 2k'a} \quad (2.15)$$

$$T = e^{-2ika} \frac{2kk'}{2kk' \cos 2k'a - i(k'^2 + k^2) \sin 2k'a}. \quad (2.16)$$

Queste relazioni consentono di verificare che la corrente di probabilità è la stessa in ogni regione.

Possiamo concludere lo studio di questo caso con le seguenti considerazioni:

- Notiamo che

$$|T|^2 \propto (kk')^2 = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) E(E+V_0) \quad \text{mentre} \quad |R|^2 \propto (k'^2 - k^2)^2 = \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right)^2.$$

Pertanto, nel limite di alte energie, $E \gg V_0$, abbiamo

$$kk' \sim \frac{2mE}{\hbar^2} \gg \frac{2mV_0}{\hbar^2} \implies |T|^2 \gg |R|^2$$

e quindi la riflessione è trascurabile.

- Nel limite di basse energie, invece, $T \longrightarrow 0$ ed è la trasmissione ad essere trascurabile.
- R è anche proporzionale a $\sin 2k'a$, pertanto la riflessione si annulla (Risonanza per Trasmissione) ogni volta che

$$k' = \frac{n\pi}{2a} \quad \implies \quad k'^2 = \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2} = \frac{n^2\pi^2}{4a^2}$$

cioè per valori dell'energia

$$E_n = -V_0 + \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2}.$$

Possiamo concludere che per $E > 0$ lo spettro dell'energia è continuo e doppiamente degenere.

2.8 Particella legata in una buca I

Consideriamo la seguente buca di potenziale (vedi Fig. 2.3):

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{per } |x| > a; \\ -V_0, & \text{per } |x| < a. \end{cases}$$

Determinare gli autovalori negativi dell'energia e le corrispondenti autofunzioni.

Soluzione

Nelle due regioni $|x| > a$, a destra e a sinistra della buca, siamo in presenza, come nel caso $E < V_0$ per il gradino (problema 2.3), di un'equazione del tipo (2.6) che ha come integrale generale

$$\psi(x) = c_1 e^{\chi x} + c_2 e^{-\chi x}, \quad \text{dove} \quad \chi^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} > 0.$$

Per evitare divergenze all'infinito della funzione d'onda, nella regione di sinistra dovremo considerare solo il primo dei due termini e nella regione di destra solo il secondo. La funzione d'onda si presenta, nelle varie regioni, nella forma:

$$\psi(x) = \begin{cases} c_1 e^{\chi x}, & \text{per } x < -a; \\ A \cos k'x + B \sin k'x, & \text{per } |x| < a; \\ c_2 e^{-\chi x}, & \text{per } x > a, \end{cases}$$

dove, nella regione centrale, abbiamo scelto come integrale generale una combinazione di funzioni reali (seni e coseni), invece degli esponenziali complessi della (2.14).

Imponendo le condizioni di continuità della funzione d'onda e della sua derivata, si ottiene il sistema di equazioni

$$\begin{aligned} c_1 e^{-\chi a} &= A \cos k'a - B \sin k'a \\ c_1 \chi e^{-\chi a} &= Ak' \sin k'a + Bk' \cos k'a \\ c_2 e^{-\chi a} &= A \cos k'a + B \sin k'a \\ -c_2 \chi e^{-\chi a} &= -Ak' \sin k'a + Bk' \cos k'a. \end{aligned}$$

Ricaviamo c_1 e c_2 dalla prima e dalla terza equazione e sostituiamo i loro valori nella seconda e quarta, si ottengono le due equazioni che devono consentire di calcolare A e B :

$$\chi = k' \frac{A \sin k'a - B \cos k'a}{A \cos k'a + B \sin k'a} \quad (2.17)$$

$$\chi = k' \frac{A \sin k'a + B \cos k'a}{A \cos k'a - B \sin k'a}. \quad (2.18)$$

Se uguagliamo i secondi membri, troviamo che, perché le due equazioni siano compatibili, deve verificarsi

$$AB = 0.$$

Possiamo distinguere, quindi, due tipi di soluzioni²

- **Caso $B = 0$.** Dal sistema vediamo che $c_1 = c_2$ e la soluzione nella regione centrale è $\psi(x) = A \cos k'x$. Complessivamente la soluzione è una funzione **pari** di x .

² La classificazione in autofunzioni pari e dispari può essere imposta a priori dato che, per un potenziale invariante per parità, le autofunzioni dello spettro discreto hanno parità fissata.

- **Caso $A = 0$.** Dal sistema vediamo che $c_1 = -c_2$ e la soluzione nella regione centrale è $\psi(x) = B \sin k'x$. Complessivamente la soluzione è una funzione **dispari** di x .

Autofunzioni pari. Se poniamo $B = 0$ nelle equazioni (2.17) otteniamo

$$\chi = k' \tan k'a$$

che, tenendo conto della relazione che lega χ e k'

$$\chi^2 = \frac{-2mE}{\hbar^2} = \frac{2mV_0}{\hbar^2} - k'^2, \quad (2.19)$$

può essere riscritta nella forma

$$\frac{\sqrt{\lambda^2 - z^2}}{z} = \tan z$$

dove

$$\lambda^2 = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} \quad \text{e} \quad z = k'a$$

sono entrambe quantità positive. L'energia E , in termini della nuova variabile z , è data da

$$E = \frac{\hbar^2 z^2}{2ma^2} - V_0. \quad (2.20)$$

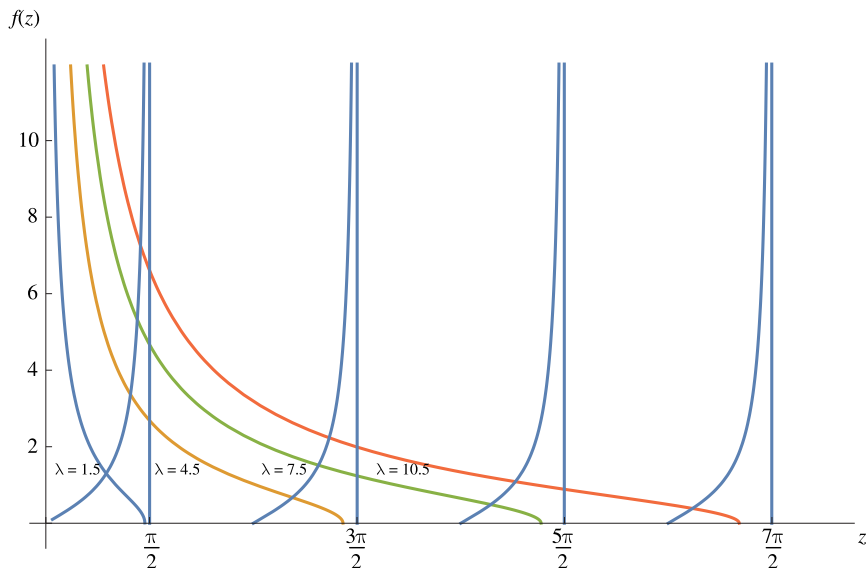


Figura 2.4. Ricerca grafica dei livelli di energia per le autofunzioni pari

Trattandosi di un'equazione trascendente possiamo studiarla qualitativamente utilizzando un grafico nel quale riportiamo le due funzioni a primo e secondo membro in funzione della variabile z . I valori di z dei punti di intersezione tra le due curve consentono di determinare gli autovalori dell'energia tramite la relazione (2.19). Nella figura 2.4 mostriamo nel I quadrante (l'unico ad essere coinvolto) gli archi relativi alla tangente e le curve di $\frac{\sqrt{\lambda^2 - z^2}}{y}$ al variare del parametro λ . Queste ultime intersecano l'asse z nel punto $z_{max} = \lambda = \sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}}$. Notiamo che

- al crescere di λ il numero di intersezioni fra le due curve, e quindi di autovalori dell'energia, aumenta, ma, per quanto λ sia piccolo, ve ne è sempre almeno uno;
- nel limite $\lambda \rightarrow \infty$, cioè $V_0 \rightarrow \infty$ le intersezioni si spostano verso

$$z_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi = (2n + 1) \frac{\pi}{2} \quad \text{con} \quad n = 0, 1, \dots$$

riportandoci ai risultati per il pozzo di potenziale infinito per n dispari (tener conto della sostituzione $2a \rightarrow L$).

Autofunzioni dispari. Ponendo, invece, $A = 0$ nelle equazioni (2.17) otteniamo l'equazione

$$\chi = -k' \cot k'a = k' \tan \left(k'a + \frac{\pi}{2}\right),$$

la quale, usando le variabili già definite, diventa

$$\frac{\sqrt{\lambda^2 - z^2}}{z} = \tan \left(z + \frac{\pi}{2}\right).$$

Le soluzioni possono essere trovate, anche in questo caso, graficamente, come possiamo vedere nella figura 2.4. Notiamo che

- per $\lambda < \pi/2$ non si hanno autofunzioni dispari;
- al crescere di λ il numero di intersezioni, e quindi di autovalori dell'energia, aumenta;
- nel limite $\lambda \rightarrow \infty$, cioè $V_0 \rightarrow \infty$ le intersezioni si spostano verso

$$z_n = n\pi = (2n + 1) \frac{\pi}{2} \quad \text{con} \quad n = 1, 2, \dots$$

e coincidono con i risultati per il pozzo di potenziale infinito per n pari (tener conto della sostituzione $2a \rightarrow L$);

- essendo dispari queste soluzioni si azzerano nell'origine, cosa che si avrebbe se il potenziale fosse dato da:

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{per } x < 0 \\ -V_0, & \text{per } 0 < x < a. \end{cases}$$

Quindi questo potenziale ha autofunzioni dell'energia coincidenti con quelle dispari della buca.

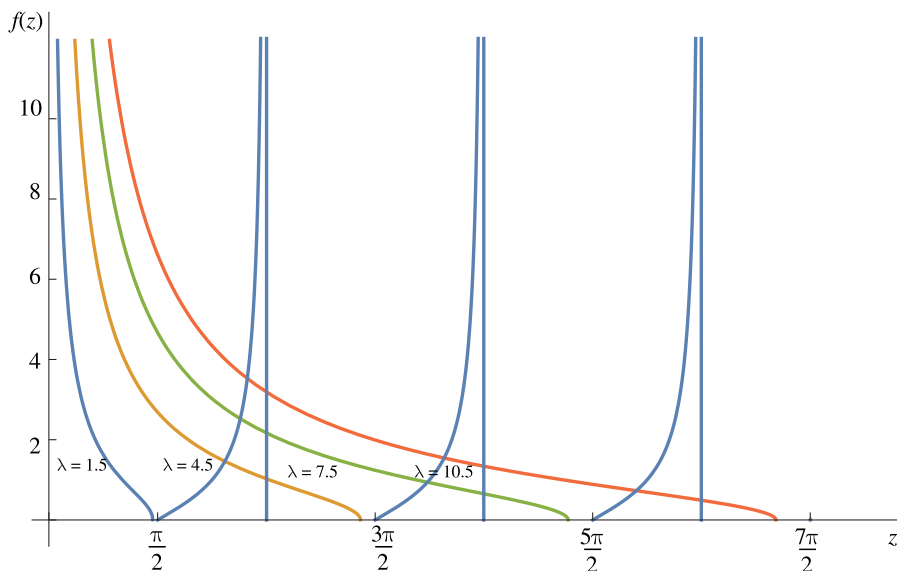


Figura 2.5. Ricerca grafica dei livelli di energia per le autofunzioni dispari

Tenendo presente entrambe le figure, possiamo notare che al crescere di λ , che è proporzionale al prodotto $V_0 a^2$, si ottiene un primo autovalore dell'energia corrispondente a un'autofunzione pari, poi emerge anche un secondo autovalore corrispondente a un'autofunzione dispari e così via, alternando soluzioni pari e soluzioni dispari. Questo è un comportamento generale legato alla simmetria del potenziale. Nel nostro caso, se

$$\lambda \in \left[(n-1) \frac{\pi}{2}, n \frac{\pi}{2} \right],$$

si hanno n livelli di energia e l'autofunzione corrispondente all'autovalore n -simo ha parità $(-1)^{(n+1)}$.

Notiamo anche che, in ciascuno dei due casi ($B = 0$ e $A = 0$) i coefficienti c_1 e c_2 risultano determinati a meno dell'altro coefficiente (A o B rispettivamente). Questo coefficiente residuo può essere fissato, a meno di una fase, tramite la normalizzazione. Per quanto riguarda lo spettro possiamo dire che in questo intervallo di energie esso è discreto, mentre le autofunzioni si annullano esponenzialmente all'infinito e rappresentano il corrispondente quantistico delle orbite classiche limitate ad una regione dello spazio, cioè *stati legati*.

Come si è detto, vi è sempre uno stato legato corrispondente ad un'autofunzione pari. Questo risultato vale per qualsiasi buca di potenziale $\bar{V}(x)$ di forma arbitraria. Infatti è sempre possibile maggiorare $\bar{V}(x)$ con un potenziale $V(x)$ rettangolare; detta $\psi_0(x)$ l'autofunzione dell'energia dello stato fondamentale di $V(x)$, risulta

$$\left\langle \psi_0 \left| \frac{p^2}{2M} + \bar{V}(x) \right| \psi_0 \right\rangle < \left\langle \psi_0 \left| \frac{p^2}{2m} + V(x) \right| \psi_0 \right\rangle < 0,$$

e, perché un operatore abbia un valore di attesa negativo, deve esserci almeno un autovalore negativo, cioè uno stato legato.

2.9 Particella legata in una buca II

Una particella di massa m è vincolata a muoversi in una dimensione soggetta all'azione del potenziale

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } |x| > a; \\ -V_0, & \text{se } |x| < a. \end{cases}$$

- Quale deve essere la profondità della buca V_0 , data la larghezza $2a$, perché il primo livello eccitato abbia energia $E_1 = -\frac{1}{2}V_0$?
- Se la particella si trova nell'autostato dell'Hamiltoniano corrispondente al primo livello eccitato, qual è la probabilità di trovarla nella regione classicamente proibita?
- Quanti sono gli stati legati di questo sistema?

Soluzione

Ricordiamo che (vedi problema 2.8), introdotte le notazioni

$$\chi^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}, \quad k'^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 + E),$$

le autofunzioni pari si ricavano da

$$\chi = k' \tan k' a$$

e quelle dispari da

$$\chi = -k' \cot k' a.$$

- Sappiamo che $E_1 = -\frac{1}{2}V_0$, quindi

$$\chi^2 = -\frac{2m}{\hbar^2} \left(-\frac{1}{2}V_0 \right) = \frac{mV_0}{\hbar^2} = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{2}V_0 = k'^2.$$

Poiché il primo livello eccitato è dispari, occorre trovare il più piccolo valore di $k'a$ per cui $\cot k'a = -\frac{\chi}{k'} = -1$, cioè $k'a = \frac{3}{4}\pi$. Quindi

$$V_0 = \frac{\hbar^2}{m} k'^2 = \frac{9\hbar^2}{16m} \frac{\pi^2}{a^2}.$$

- Determiniamo la funzione d'onda del primo livello eccitato, per il quale $k' = \chi = 3\pi/4a$.

$$\psi_1(x) = \begin{cases} Ce^{\chi x}, & \text{se } x < -a; \\ B \sin k' x, & \text{se } |x| < a; \\ -Ce^{-\chi x}, & \text{se } x > a. \end{cases}$$

Dalle condizioni di continuità in $x = a$

$$\begin{cases} B \sin k'a = -C e^{-\chi a} \\ B k' \cos k'a = C \chi e^{-\chi a} \end{cases}$$

(che sono equivalenti in quanto relative all'autovalore E_1 già fissato) ricaviamo:

$$\frac{B}{C} = \frac{\chi}{k'} \frac{e^{-\chi a}}{\cos k'a} = 1 \cdot \frac{e^{-\frac{3\pi}{4}}}{\cos \frac{3\pi}{4}} = -\sqrt{2} e^{-\frac{3\pi}{4}}.$$

Imponendo la normalizzazione la funzione d'onda

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_1(x)|^2 dx &= 2 \int_a^{+\infty} |C|^2 e^{-2\chi x} dx + \int_{-a}^a |B|^2 \sin^2 k' x dx = \\ &= \frac{|C|^2}{\chi} e^{-2\chi a} + |B|^2 \int_{-a}^a \frac{1 - \cos 2k' x}{2} dx = \\ &= \frac{|C|^2}{\chi} e^{-2\chi a} + \frac{|B|^2}{2} \left(2a - \frac{1}{k'} \sin 2k'a \right) = \\ &= 2a e^{-\frac{3\pi}{2}} \left(\frac{4}{3\pi} + 1 \right) |C|^2 = 1, \end{aligned}$$

ricaviamo

$$|C|^2 = \frac{3\pi}{4 + 3\pi} \frac{e^{\frac{3\pi}{2}}}{2a}.$$

La probabilità P di trovare la particella nella regione classicamente proibita è:

$$\begin{aligned} P &= 2 \int_a^{+\infty} |C|^2 e^{-2\chi x} dx = \\ &= \frac{3\pi}{4 + 3\pi} \frac{e^{\frac{3\pi}{2}}}{2a} \frac{e^{-2\chi a}}{\chi} = \\ &= \frac{2}{4 + 3\pi}. \end{aligned}$$

c) Ricordiamo che, se

$$\lambda^2 = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} \in \left[(n-1)^2 \frac{\pi^2}{4}, n^2 \frac{\pi^2}{4} \right],$$

si hanno n livelli di energia e l'autofunzione corrispondente all'autovalore n -simo ha parità $(-1)^{(n+1)}$. Il secondo livello eccitato, corrispondente ad $n = 3$, si ottiene, quindi, come seconda soluzione dell'equazione per le soluzioni pari. Perché esso esista, occorre che $\lambda^2 = 2mV_0 a^2 / \hbar^2 \geq \pi^2$. Nel nostro caso questo si verifica:

$$\frac{2m}{\hbar^2} V_0 a^2 = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{9\hbar^2}{16m} \pi^2 = \frac{9}{8} \pi^2 > \pi^2.$$

Non vi è tuttavia una seconda soluzione dispari, dato che non è verificata la relazione $\frac{2m}{\hbar^2} V_0 a^2 > \frac{9}{4} \pi^2$.

Esistono, in conclusione, solo tre stati legati.

2.10 Barriera di potenziale

Consideriamo il potenziale

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{per } |x| > a; \\ V_0, & \text{per } |x| < a, \end{cases}$$

e supponiamo che su di esso incidano delle particelle di fissata energia $E < V_0$ provenienti da $x = -\infty$. Determinare la probabilità che una particella possa attraversare la barriera.

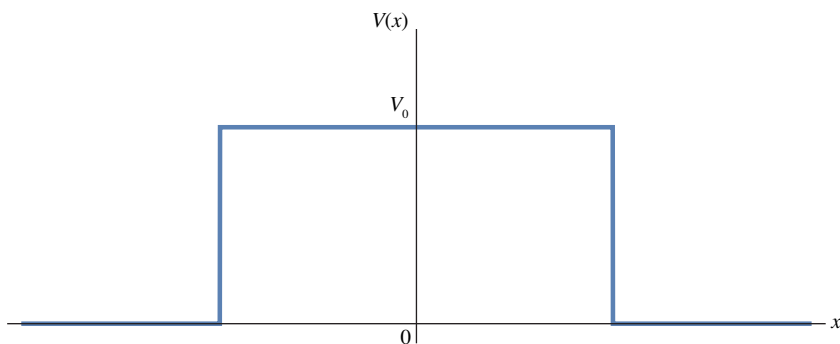


Figura 2.6. Barriera di potenziale

Soluzione

Caso $0 < E < V_0$

Notiamo che gli autovalori dell'energia, dovendo essere superiori al minimo del potenziale, sono sicuramente positivi. Come richiesto, consideriamo la soluzione dell'equazione di Schrödinger corrispondente ad una particella proveniente da sinistra

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx}, & \text{per } x < -a; \\ Ae^{\chi x} + Be^{-\chi x}, & \text{per } |x| < a; \\ Te^{ikx}, & \text{per } x > a. \end{cases}$$

Questa soluzione è la stessa trovata per la buca (2.14), salvo le sostituzioni $V_0 \rightarrow -V_0$ e $ik' \rightarrow \chi$ (con $\chi = \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$ reale e positivo). Quest'ultima sostituzione è necessaria dato che nella regione $|x| < a$ l'equazione ha soluzioni con esponenti reali. Possiamo, quindi, effettuare le suddette sostituzioni direttamente sui risultati del problema 2.7. In particolare il coefficiente di trasmissione T è dato da

$$T = e^{-2ika} \frac{2k(-i\chi)}{2k(-i\chi) \cos 2(-i\chi)a - i((-i\chi)^2 + k^2) \sin 2(-i\chi)a}$$

e, tenendo conto delle relazioni

$$\cos ix = \cosh x \quad \text{e} \quad \sin ix = i \sinh x,$$

otteniamo

$$T = e^{-2ika} \frac{2k\chi}{2k\chi \cosh 2\chi a + i(k^2 - \chi^2) \sinh 2\chi a}.$$

La densità di corrente di probabilità al di là della barriera è data dal prodotto di $\frac{\hbar k}{m}$, la velocità, per il modulo quadro di T , che è pari a

$$\begin{aligned} |T|^2 &= \frac{(2k\chi)^2}{4k^2\chi^2 \cosh^2 2\chi a + (k^2 - \chi^2)^2 \sinh^2 2\chi a} = \\ &= \frac{(2k\chi)^2}{4k^2\chi^2(1 + \sinh^2 2\chi a) + (k^2 - \chi^2)^2 \sinh^2 2\chi a} = \\ &= \frac{(2k\chi)^2}{(k^2 + \chi^2)^2 \sinh^2 2\chi a + (2k\chi)^2}. \end{aligned}$$

Questa espressione, che rappresenta anche il rapporto tra la densità di corrente trasmessa e quella incidente sulla barriera (che è pari a $\frac{\hbar k}{m}$), è sicuramente positiva e ci dice che in meccanica quantistica, contrariamente alla soluzione classica, si presenta sempre una probabilità di attraversamento (effetto Tunnel) di una barriera di potenziale.

2.11 Particella legata in un potenziale δ

Una particella di massa m si muove in una dimensione in presenza di un potenziale dato da

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{m} \Omega \delta(x),$$

dove $\delta(x)$ è l'usuale funzione delta di Dirac. Il sistema ha un unico stato legato. Determinare l'energia e l'autofunzione normalizzata di tale stato. Calcolare, inoltre, il valore x_0 tale che la probabilità di trovare la particella con $x < x_0$ è esattamente uguale a $1/2$.

Soluzione

Poiché si vogliono gli stati legati, consideriamo gli autovalori $E < 0$ dell'equazione di Schrödinger

$$\psi''(x) + 2\Omega \delta(x) \psi(x) - \alpha^2 \psi(x) = 0, \quad \text{dove} \quad \alpha^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} > 0.$$

Per $x \neq 0$ questa equazione ha soluzione, che soddisfa la condizione di continuità della ψ in $x = 0$,

$$\psi(x) = A \exp\{-\alpha|x|\}.$$

Per la presenza nel potenziale della δ , la ψ' deve essere discontinua in $x = 0$, altrimenti ivi esisterebbe la sua derivata seconda e la singolarità della δ non sarebbe compensata nell'equazione di Schrödinger. Per trovare quanto vale la discontinuità integriamo l'equazione tra $-\varepsilon$ e $+\varepsilon$:

$$\psi'(x)|_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} + 2\Omega \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} dx \psi(x) \delta(x) + \alpha^2 \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} dx \psi(x) = 0.$$

Nel limite $\varepsilon \rightarrow 0$, essendo $\psi(x)$ continua in $x = 0$, otteniamo

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -2\Omega \psi(0). \quad (2.21)$$

Questa condizione è soddisfatta da un unico valore di α ,

$$\alpha = \Omega. \quad (2.22)$$

Esiste quindi un solo stato legato con energia

$$E = -\frac{\hbar^2 \Omega^2}{2m}.$$

La costante A viene fissata, a meno di un fattore di fase, dalla condizione di normalizzazione:

$$|A|^2 = \left[\int_{-\infty}^0 e^{2\alpha x} dx + \int_0^{+\infty} e^{-2\alpha x} dx \right]^{-1} = \left[2 \left(-\frac{1}{2\alpha} \right) e^{-2\alpha x} \Big|_0^{+\infty} \right]^{-1} = \alpha = \Omega.$$

Quindi la funzione d'onda è data da

$$\psi(x) = \sqrt{\Omega} e^{-\Omega|x|}.$$

Infine, il valore x_0 che dimezza la probabilità cumulativa è chiaramente 0, essendo la funzione d'onda, e quindi anche la distribuzione di probabilità, una funzione pari.

2.12 Diffusione da potenziale δ

Un fascio monocromatico di particelle di massa m si muove lungo l'asse x in presenza del potenziale

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{m} \Omega \delta(x),$$

dove $\delta(x)$ è la delta di Dirac e Ω è una quantità positiva, detta opacità della barriera.

Per un fascio proveniente da $-\infty$ una funzione d'onda stazionaria di energia E si può scrivere, posto $k = \sqrt{2mE}/\hbar$:

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + R e^{-ikx}, & \text{se } x \leq 0 \\ T e^{ikx}, & \text{se } x > 0. \end{cases}$$

Determinare le probabilità di riflessione e di trasmissione attraverso la barriera ed esaminare i limiti di piccola e grande opacità.

Soluzione

Al fine di determinare i coefficienti R e T a fissata energia E , imponiamo le condizioni di continuità della $\psi(x)$ e di discontinuità, per la presenza del potenziale δ , della $\psi'(x)$ in $x = 0$ (2.21):

$$\begin{aligned}\psi(0^+) - \psi(0^-) &= 0 \Rightarrow 1 + R = T \\ \psi'(0^+) - \psi'(0^-) &= -2\Omega \psi(0) \Rightarrow ikT - ik(1 - R) = -2\Omega T,\end{aligned}$$

dalle quali si ottiene

$$R = \frac{i\Omega}{k - i\Omega} \quad \text{e} \quad T = \frac{k}{k - i\Omega}.$$

Il flusso di probabilità trasmesso attraverso la barriera è dato da

$$\frac{\hbar k}{m} |T|^2 = \frac{\hbar k}{m} \frac{1}{1 + \frac{\Omega^2}{k^2}},$$

mentre il flusso riflesso è dato da

$$-\frac{\hbar k}{m} |R|^2 = -\frac{\hbar k}{m} \frac{\frac{\Omega^2}{k^2}}{1 + \frac{\Omega^2}{k^2}}.$$

Notiamo che la corrente di probabilità è la stessa nelle due regioni:

$$\frac{\hbar k}{m} |1|^2 - \frac{\hbar k}{m} |R|^2 = \frac{\hbar k}{m} |T|^2$$

e che le correnti, che sono i risultati fisici osservabili, non dipendono dal segno di Ω . Nel limite $\Omega \rightarrow 0$ si ha $|T|^2 \rightarrow 1$ e $|R|^2 \rightarrow 0$, per cui tutte le particelle sono trasmesse al di là della barriera, mentre la riflessione è nulla. Il contrario avviene quando $\Omega \rightarrow \infty$.

2.13 Particella legata in un potenziale a doppia δ

Una particella di massa m si muove nella doppia buca di potenziale data da

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{m} \Omega [\delta(x-a) + \delta(x+a)] \quad \Omega > 0.$$

Mostrare che l'Hamiltoniano ha, al più, due stati legati e risolvere graficamente l'equazione che li determina. Stimare inoltre per grandi valori di a la separazione tra i livelli.

Soluzione

L'equazione di Schrödinger diventa:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + 2\Omega [\delta(x-a) + \delta(x+a)] \psi(x) - \varepsilon^2 \psi(x) = 0 \quad \text{dove} \quad \varepsilon^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} > 0.$$

Ricordiamo che, per la presenza della δ nel potenziale, la ψ' deve essere discontinua in $x = a$ e $x = -a$:

$$\begin{aligned}\psi'(a^+) - \psi'(a^-) &= -2\Omega\psi(a) \\ \psi'(-a^+) - \psi'(-a^-) &= -2\Omega\psi(-a).\end{aligned}$$

Poiché il potenziale è pari, possiamo scegliere soluzioni di parità definita.

Consideriamo prima le autofunzioni **pari**.

Escludendo i punti $x = a$ e $x = -a$, l'equazione di Schrödinger ha integrali indipendenti

$$\psi_1(x) = e^{\varepsilon x} \quad \text{e} \quad \psi_2(x) = e^{-\varepsilon x}.$$

Le soluzioni devono andare a zero all'infinito e devono essere pari, possiamo quindi scrivere, a meno di una costante complessiva:

$$\psi_p(x) = \begin{cases} e^{\varepsilon x}, & \text{se } x < -a; \\ A \cosh \varepsilon x, & \text{se } |x| < a; \\ e^{-\varepsilon x}, & \text{se } x > a. \end{cases}$$

A causa della simmetria basta imporre le condizioni di continuità nel solo punto $x = a$:

$$\begin{cases} e^{-\varepsilon a} = A \cosh \varepsilon a \\ -A\varepsilon \sinh \varepsilon a - \varepsilon e^{-\varepsilon a} = -2\Omega e^{-\varepsilon a}. \end{cases}$$

Si avrà soluzione per l'incognita A solo se le due equazioni sono compatibili, cioè solo se

$$\tanh \varepsilon a = \frac{2\Omega}{\varepsilon} - 1 = \frac{2\Omega a}{\varepsilon a} - 1. \quad (2.23)$$

La soluzione può essere trovata graficamente come si vede in figura 2.7, nella quale primo e secondo membro della equazione (2.23) sono riportate in funzioni di εa per vari valori di Ωa .

Consideriamo ora le autofunzioni **dispari**:

$$\psi_p(x) = \begin{cases} -e^{\varepsilon x}, & \text{se } x < -a; \\ A \sinh \varepsilon x, & \text{se } |x| < a; \\ e^{-\varepsilon x}, & \text{se } x > a. \end{cases}$$

Imponiamo le condizioni di continuità nel punto $x = a$:

$$\begin{cases} e^{-\varepsilon a} = A \sinh \varepsilon a \\ -A\varepsilon \cosh \varepsilon a - \varepsilon e^{-\varepsilon a} = -2\Omega e^{-\varepsilon a}. \end{cases}$$

Si avrà soluzione per l'incognita A solo se le due equazioni sono compatibili, cioè solo se

$$\tanh \varepsilon a = \frac{1}{\frac{2\Omega}{\varepsilon} - 1} = \frac{1}{\frac{2\Omega a}{\varepsilon a} - 1}. \quad (2.24)$$

La soluzione può essere trovata graficamente come si vede in figura 2.8.

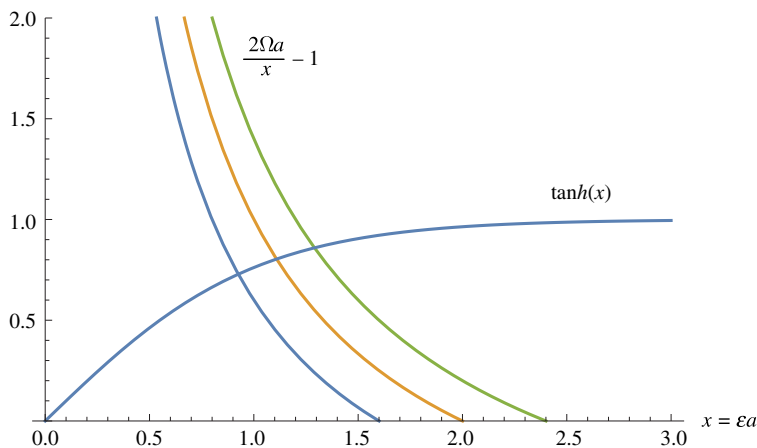


Figura 2.7. Soluzione grafica dell'equazione per le autofunzioni pari. Il lato destro dell'eq. (2.23) è stato riportato per $\Omega a = 0.8, 1.0, 1.2$

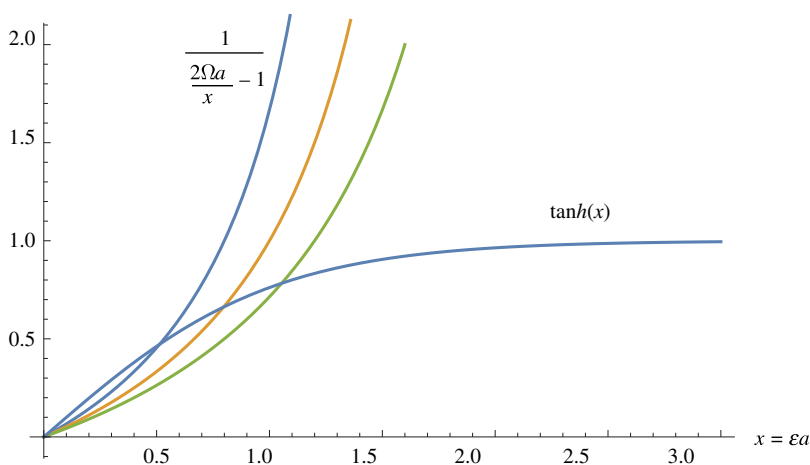


Figura 2.8. Soluzione grafica dell'equazione per le autofunzioni dispari. Il lato destro dell'eq. (2.24) è stato riportato per $\Omega a = 0.8, 1.0, 1.2$

Può esistere una soluzione, purché la pendenza nell'origine della funzione a destra nell'eq. (2.24) sia inferiore a quella della funzione a sinistra, la $\tanh \epsilon a$, che è 1.

$$\left. \frac{d}{dx} \frac{x}{2\Omega a - x} \right|_{x=0} = \frac{1}{2\Omega a} < 1.$$

È facile vedere che si tratta di uno stato eccitato. Infatti l'intersezione, essendo $\tanh \epsilon a < 1$, si ha per valori di $\epsilon a < \Omega a$, mentre per le autofunzioni pari si aveva per $\epsilon a > \Omega a$, quindi l'energia corrispondente $E = -\frac{\hbar^2}{2m} \epsilon^2$ è più alta.

La separazione tra i due livelli tende a zero nel limite di grande distanza tra le due δ . Infatti entrambe le funzioni sul lato destro delle eq. (2.23), (2.24) valgono 1 in $\varepsilon a = \Omega a$ ed anche la funzione $\tanh \varepsilon a$ tende a 1 per a grandi.

2.14 Diffusione su potenziale a doppia δ

Risolvere l'equazione di Schrödinger per l'energia potenziale

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{m} \Omega (\delta(x-a) + \delta(x+a)) \quad \Omega > 0$$

calcolando le autofunzioni dell'Hamiltoniano corrispondenti a un problema di diffusione e i relativi autovalori. Discutere la dipendenza dall'energia del coefficiente di trasmissione.

Soluzione

Poiché $V(x) > 0 \forall x$, gli autovalori di $\mathcal{H}$ sono positivi. Fissato $E = \hbar^2 k^2 / 2m > 0$, le autofunzioni relative ad E corrispondenti ad una particella che si muove inizialmente nella direzione positiva dell'asse x sono del tipo:

$$\psi_E(x) = \begin{cases} e^{ikx} + R e^{-ikx}, & \text{se } x < -a; \\ A e^{ikx} + B e^{-ikx}, & \text{se } |x| < a; \\ T e^{ikx}, & \text{se } x > a, \end{cases}$$

dove la densità di corrente incidente è stata posta pari a $|1|^2 \frac{\hbar k}{m}$. Le condizioni di continuità di ψ e di discontinuità della sua derivata ψ'

$$\begin{aligned} \psi(\pm a^+) - \psi(\pm a^-) &= 0 \\ \psi'(\pm a^+) - \psi'(\pm a^-) &= 2\Omega \psi(\pm a) \end{aligned}$$

determinano completamente i coefficienti R, A, B, T :

$$\begin{cases} e^{-ika} + R e^{ika} - A e^{-ika} - B e^{ika} = 0 \\ A e^{ika} + B e^{-ika} - T e^{ika} = 0 \\ (2\Omega + ik) e^{-ika} + (2\Omega - ik) R e^{ika} - ik A e^{-ika} + ik B e^{ika} = 0 \\ ik A e^{ika} - ik B e^{-ika} + (2\Omega - ik) T e^{ika} = 0. \end{cases}$$

Ne deriva che ogni valore positivo di E è autovalore dell'Hamiltoniano. Ponendo ora

$$\alpha = \frac{ik - 2\Omega}{ik} = 1 + i \frac{2\Omega}{k} \quad ; \quad \beta = e^{ika},$$

la II e la IV equazione diventano

$$\begin{cases} \beta A + \beta^* B = \beta T \\ \beta A - \beta^* B = \beta \alpha T. \end{cases}$$

Ricaviamo così

$$A = \frac{1}{2}(1 + \alpha)T \quad B = \frac{\beta}{\beta^*} \frac{1}{2}(1 - \alpha)T.$$

Ritornando al sistema, dalla I e dalla III equazione si ottiene

$$\begin{cases} \beta^*(1 + \alpha^*) + \beta(1 - \alpha)R = \beta^*(1 + \alpha)T \\ \beta^*(1 - \alpha^*) + \beta(1 + \alpha)R = \frac{\beta^2}{\beta^*}(1 - \alpha)T, \end{cases}$$

dalle quali, con semplici passaggi, si ricava l'espressione per T :

$$T = \frac{1}{(1 + i\gamma)^2 + \gamma^2 e^{4ika}}$$

dove $\gamma = \Omega/k$.

Il coefficiente di trasmissione è $|T|^2$, che, dopo qualche passaggio diventa:

$$|T|^2 = \frac{1}{(1 + \gamma^2)^2 + \gamma^4 + 2\gamma^2[(1 - \gamma^2)\cos 4ka + 2\gamma\sin 4ka]}.$$

Notiamo che

- $\lim_{k \rightarrow 0} |T|^2 = \lim_{\gamma \rightarrow \infty} |T|^2 = 0$, cioè nel limite di bassa energia il coefficiente di trasmissione si annulla;
- $\lim_{k \rightarrow \infty} |T|^2 = \lim_{\gamma \rightarrow 0} |T|^2 = 1$, cioè nel limite di alta energia si ha trasmissione completa;
- $|T|^2$ presenta delle oscillazioni corrispondenti alle oscillazioni di $(1 - \gamma^2)\cos 4ka + 2\gamma\sin 4ka$.

2.15 Diffusione da parete in presenza di potenziale δ

Sia data una particella di massa m proveniente da $x = +\infty$ con energia $E > 0$ che urta contro il potenziale unidimensionale della forma

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{se } x \leq -a; \\ \Omega\delta(x), & \text{se } x > -a. \end{cases}$$

- Cosa succede nel caso classico?
- Trovare la forma della funzione d'onda per $x < 0$ e per $x > 0$.
- Trovare la probabilità di riflessione.
- Trovare lo sfasamento dell'onda riflessa (rispetto al caso $\Omega = 0$) per $x = +\infty$.
- Discutere la dipendenza da $\frac{\Omega}{k}$ ($k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$) delle espressioni trovate per lo sfasamento e per l'ampiezza della funzione d'onda nel tratto $-a < x < 0$.

Soluzione

- a) Nel caso classico la particella, qualsiasi sia la sua energia, viene riflessa nella posizione $x = 0$. Questo può essere compreso pensando la funzione δ come il limite di una funzione rettangolare il cui spessore tende a zero mentre la sua altezza tende a $+\infty$. La particella dovrebbe avere energia infinita per poter passare.
- b) Dato il potenziale, l'autofunzione di energia E richiesta avrà la forma

$$\psi(x) = \begin{cases} A \sin(kx + \delta), & \text{se } -a \leq x \leq 0; \\ e^{-ikx} + R e^{ikx}, & \text{se } x > 0. \end{cases}, \quad \text{con } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}},$$

dove si è posto uguale ad uno il coefficiente che rappresenta il moto verso la barriera. La funzione d'onda si deve annullare in $x = -a$, per cui $\delta = ka$. Poniamo

$$\alpha = \frac{2m\Omega}{\hbar^2}, \quad (2.25)$$

che ha le dimensioni di $[Lunghezza]^{-1}$, cioè le stesse di k , in quanto la δ di Dirac ha anch'essa dimensioni $[Lunghezza]^{-1}$ e Ω ha le dimensioni di $[Energia][Lunghezza]$. Le condizioni di continuità della funzione d'onda e di discontinuità della sua derivata prima in $x = 0$ danno luogo al sistema

$$\begin{aligned} \psi(0^+) &= \psi(0^-) \Rightarrow A \sin ka = 1 + R \\ \psi'(0^+) - \psi'(0^-) &= \alpha \psi(0) \Rightarrow -kA \cos ka - ik(1 - R) = \alpha A \sin ka, \end{aligned}$$

che ha soluzione

$$\begin{aligned} A &= -\frac{2ik}{k \cos ka + \alpha \sin ka - ik \sin ka} \\ R &= -\frac{k \cos ka + \alpha \sin ka + ik \sin ka}{k \cos ka + \alpha \sin ka - ik \sin ka}. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Risulta così completamente determinata la funzione d'onda.

- c) Poiché R è il rapporto di due quantità complesse coniugate, il coefficiente di riflessione è dato da

$$|R|^2 = 1.$$

Come nel caso classico si ha riflessione completa, ma la funzione d'onda è non nulla tra la barriera a δ e la parete impenetrabile.

- d) Detti ρ e θ rispettivamente il modulo e la fase del numeratore di R , si ha

$$R = e^{i\pi} \frac{\rho e^{i\theta}}{\rho e^{-i\theta}} = e^{i(2\theta+\pi)} \quad \text{dove} \quad \theta = \arctan \frac{\tan ka}{1 + \frac{\alpha}{k} \tan ka}.$$

In assenza della δ basta porre $\Omega = 0$, cioè $\alpha = 0$ nelle formule. Si ottiene

$$\theta \rightarrow \theta_0 = ka \quad \text{e} \quad R \rightarrow R_0 = e^{i(2ka+\pi)}.$$

Lo sfasamento dovuto alla barriera è quindi:

$$\Delta \varphi = 2\theta - 2\theta_0 = 2 \arctan \frac{\tan ka}{1 + \frac{\alpha}{k} \tan ka} - 2ka.$$

e) Consideriamo prima l'andamento di $\Delta\varphi$ in funzione di $\alpha/k = 2m\Omega/\hbar^2k$. Si nota che:

- $\Delta\varphi = 0$, a parte il caso banale in cui $\alpha = 0$, se $\tan ka = 0$, cioè se $ka = n\pi$, con $n = 0, 1, 2, \dots$. In questi casi la barriera diventa trasparente.
- Per piccoli valori di α/k lo sfasamento tende a 0.
- Nel limite $\alpha/k \rightarrow +\infty$ $\Delta\varphi$ tende asintoticamente a $-2ka$, che corrisponde a $R = -1$, cioè alla situazione in cui anche la δ diventa una barriera impenetrabile. Per questo motivo il parametro Ω viene spesso detto *opacità*.

Studiamo ora il comportamento dell'ampiezza A della funzione d'onda per $x < 0$, o, meglio, del suo modulo quadro:

$$\begin{aligned} |A|^2 &= \frac{4k^2}{(k \cos ka + \alpha \sin ka)^2 + k^2 \sin^2 ka} = \\ &= \frac{4}{(\cos ka + \frac{\alpha}{k} \sin ka)^2 + \sin^2 ka}. \end{aligned}$$

- A k fissato, $|A|^2$ assume il valore 4 per $\alpha/k = 0$.
- Sempre considerando k fissato, $|A|^2$ è funzione decrescente di α/k , confermando così il ruolo di Ω . Ha, inoltre, un punto di massimo in corrispondenza del valore $\alpha/k = -\cot ka$.
- Il massimo rappresenta un fenomeno di risonanza, fenomeno che può essere studiato meglio ad α fissato. In figura 2.9 si nota la presenza di una struttura a picchi che si attenua a grandi energie.

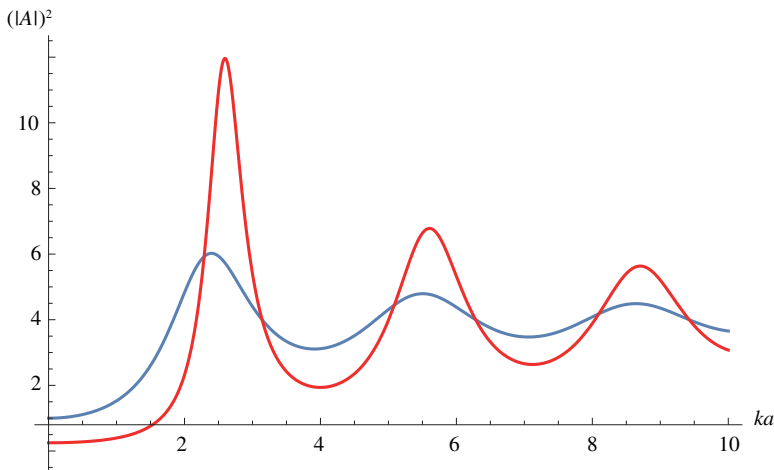


Figura 2.9. $|A|^2$ in funzione di ka per $\alpha = 1$ (curva blu) e $\alpha = 3$ (curva rossa)

2.16 Stati legati di un potenziale $V(x) \propto -\cosh x^{-2}$

Considerare una particella di massa m nel potenziale unidimensionale

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{\cosh^2 x}.$$

a) Mostrare che

$$\psi(x) = (\tanh x + C) \exp(ikx)$$

è soluzione dell'equazione di Schrödinger per un particolare valore della costante C . Determinare tale valore e l'energia corrispondente a tale soluzione. Studiando gli andamenti asintotici di $\psi(x)$ calcolare i coefficienti di riflessione e di trasmissione.

b) Mostrare che anche

$$\phi(x) = \frac{1}{\cosh x}$$

soddisfa l'equazione di Schrödinger. Mostrare che si tratta di uno stato legato e calcolarne l'energia. Dare un argomento a favore del fatto che si tratta dello stato fondamentale.

Soluzione

Definito

$$\varepsilon = \frac{2mE}{\hbar^2},$$

l'equazione di Schrödinger diventa:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{2}{\cosh^2 x} \psi(x) + \varepsilon \psi(x) = 0.$$

a) Imponendo che $\psi(x)$ ne sia soluzione si trova:

$$(\varepsilon - k^2)(\tanh x + C) + \frac{2}{\cosh^2 x}(ik + C) = 0.$$

Questa relazione risulta verificata $\forall x$ purché:

$$\varepsilon = k^2 \quad \text{e} \quad C = -ik.$$

Nel limite $x \rightarrow +\infty$

$$\psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow +\infty} (1 - ik)e^{ikx},$$

mentre per $x \rightarrow -\infty$

$$\psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} -(1 + ik)e^{ikx}.$$

Non vi è quindi componente riflessa ($\propto e^{-ikx}$):

$$R = 0 \quad \text{e} \quad T = 1.$$

- b) Per quanto riguarda $\phi(x)$ sostituendo nell'equazione di Schrödinger si ottiene:

$$-\frac{1}{\cosh x} + \frac{2}{\cosh x} + \frac{\varepsilon}{\cosh x} = 0$$

e quindi

$$\varepsilon = -1.$$

Notiamo che per $|x| \rightarrow \infty$ $\phi(x) \rightarrow 0$, quindi $\phi(x)$ rappresenta uno stato legato. Inoltre si tratta di una funzione priva di nodi, e quindi si tratta di uno stato fondamentale.

2.17 Oscillatore Armonico: operatori posizione e impulso

Calcolare gli elementi di matrice degli operatori posizione e impulso nella base dell'energia dell'Oscillatore Armonico. Valutare i valori medi di entrambe le grandezze in un autostato dell'energia.

Soluzione

Utilizzando le espressioni per gli operatori x e p in termini degli operatori a e $a^\dagger$ (vedi A.14) e ricordando che (A.15)

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

si ha

$$\begin{aligned} x_{jk} &= \langle j|x|k\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle j|(a+a^\dagger)|k\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[\sqrt{k}\delta_{k,j+1} + \sqrt{k+1}\delta_{k,j-1} \right] \\ p_{jk} &= \langle j|p|k\rangle = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \langle j|(a-a^\dagger)|k\rangle \\ &= -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \left[\sqrt{k}\delta_{k,j+1} - \sqrt{k+1}\delta_{k,j-1} \right]. \end{aligned}$$

Per quanto riguarda i valori medi, essi sono entrambi nulli:

$$\langle x \rangle_k = \langle k|x|k\rangle = 0 \quad \langle p \rangle_k = \langle k|p|k\rangle = 0.$$

2.18 Oscillatore Armonico: energia cinetica ed energia potenziale

Calcolare gli elementi di matrice degli operatori x^2 e p^2 nella base dell'energia dell'Oscillatore Armonico. Far vedere che, in un autostato dell'energia, il valor di attesa dell'energia cinetica e dell'energia potenziale sono uguali.

Soluzione

Utilizzando la (A.14) si ha

$$\begin{aligned}(x^2)_{jk} &= \langle j|x^2|k\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle j|a^2 + (a^\dagger)^2 + aa^\dagger + a^\dagger a|k\rangle \\ (p^2)_{jk} &= \langle j|p^2|k\rangle = -\frac{\hbar m\omega}{2} \langle j|a^2 + (a^\dagger)^2 - (aa^\dagger + a^\dagger a)|k\rangle.\end{aligned}$$

Dalla (A.15) otteniamo

$$\begin{aligned}\langle j|a^2|k\rangle &= \sqrt{k} \langle j|a|k-1\rangle = \sqrt{k(k-1)} \delta_{k,j+2} \\ \langle j|(a^\dagger)^2|k\rangle &= \sqrt{k+1} \langle j|a^\dagger|k+1\rangle = \sqrt{(k+1)(k+2)} \delta_{k,j-2},\end{aligned}$$

mentre, da $[a, a^\dagger] = 1$,

$$\langle j|aa^\dagger + a^\dagger a|k\rangle = \langle j|1 + 2a^\dagger a|k\rangle = \frac{2}{\hbar\omega} \langle j|\mathcal{H}|k\rangle = (2k+1) \delta_{j,k}.$$

Sostituendo si ha, per gli elementi di matrice richiesti,

$$\begin{aligned}(x^2)_{jk} &= \frac{\hbar}{2m\omega} \left[\sqrt{k(k-1)} \delta_{k,j+2} + \sqrt{(k+1)(k+2)} \delta_{k,j-2} + (2k+1) \delta_{j,k} \right] \\ (p^2)_{jk} &= -\frac{\hbar m\omega}{2} \left[\sqrt{k(k-1)} \delta_{k,j+2} + \sqrt{(k+1)(k+2)} \delta_{k,j-2} - (2k+1) \delta_{j,k} \right].\end{aligned}$$

I valori medi, detta E_k l'autovalore dell'energia per lo stato $|k\rangle$, sono dati da

$$\begin{aligned}\langle x^2 \rangle_k &= \langle k|x^2|k\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} (2k+1) = \frac{E_k}{m\omega^2} \\ \langle p^2 \rangle_k &= \langle k|p^2|k\rangle = \frac{\hbar m\omega}{2} (2k+1) = mE_k\end{aligned}$$

da cui si vede che i valori medi dell'energia cinetica e dell'energia potenziale sono entrambi uguali a metà dell'energia del livello. Abbiamo, pertanto, ritrovato il risultato ottenuto applicando il teorema del Viriale (vedi problema 1.10).

2.19 Oscillatore Armonico: aspettazione di x^4

Calcolare il valor di attesa dell'operatore x^4 in un autostato dell'energia dell'Oscillatore Armonico.

Soluzione

Utilizzando la relazione di completezza e i risultati del problema 2.18 si ha

$$\begin{aligned}\langle x^4 \rangle_j &= \langle j|x^4|j\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \langle j|x^2|k\rangle \langle k|x^2|j\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} |\langle j|x^2|k\rangle|^2 = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2} \times \\ &\times \left[\sqrt{k(k-1)} \delta_{k,j+2} + \sqrt{(k+1)(k+2)} \delta_{k,j-2} + (2k+1) \delta_{j,k} \right]^2.\end{aligned}$$

Sviluppato il quadrato i prodotti di δ con indici differenti non danno contributo:

$$\begin{aligned} \langle x^4 \rangle_j &= \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2} [j(j-1) + (j+1)(j+2) + (2j+1)^2] = \\ &= \frac{3\hbar^2}{4m^2\omega^2} [2j^2 + 2j + 1] . \end{aligned}$$

2.20 Oscillatore Armonico: proprietà dello stato fondamentale

Un oscillatore armonico di massa m e costante elastica k si trova nello stato fondamentale. Si calcoli la probabilità di trovarlo al di fuori della zona permessa classicamente.

Soluzione

La regione permessa classicamente è il segmento compreso tra i due punti d'inversione del moto $\pm$, dove

$$\bar{x} = \sqrt{\frac{2E}{k}}$$

ottenuto risolvendo l'equazione

$$E = V(x) = \frac{1}{2}kx^2 .$$

Nello stato fondamentale $E = \hbar\omega/2$ ($\omega = \sqrt{k/m}$), mentre lo stato è descritto dalla funzione d'onda (vedi A.3)

$$\phi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-m\omega x^2/2\hbar} .$$

Tenendo conto della simmetria della distribuzione di probabilità risultante, la probabilità richiesta è quindi

$$\begin{aligned} P &= 2 \int_{\bar{x}}^{+\infty} |\phi_0(x)|^2 dx = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_1^{+\infty} e^{-x^2} dx = \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left[\frac{\sqrt{\pi}}{2} - \int_0^1 e^{-x^2} dx \right] = 1 - 2\text{Erf}(1) = 1 - 0.84 = 0.16 . \end{aligned} \quad (2.27)$$

dove

$$\text{Erf}(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^y e^{-x^2} dx$$

è la funzione errore, che si trova tabulata o si calcola per via numerica.

2.21 Stato di un Oscillatore Armonico I

Un oscillatore armonico di pulsazione ω è in uno stato sovrapposizione degli autostati dell'Hamiltoniano corrispondenti ai due livelli più bassi di energia.

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle.$$

Trovare

- a) a quale condizione il valore di attesa della posizione è diverso da zero;
- b) per quali valori dei coefficienti tale valore di attesa assume il valore massimo e il valore minimo.

Soluzione

I coefficienti devono soddisfare la condizione di normalizzazione

$$|a|^2 + |b|^2 = 1.$$

Fissando la fase arbitraria possiamo considerare a reale:

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + \sqrt{1-a^2} e^{i\delta} |1\rangle.$$

- a) Il valore di attesa della posizione è (2.17)

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= |a|^2 \langle 0|X|0\rangle + |b|^2 \langle 1|X|1\rangle + a^* b \langle 0|X|1\rangle + ab^* \langle 1|X|0\rangle = \\ &= 2\Re(a^* b) \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} = 2\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} a\sqrt{1-a^2} \cos \delta \end{aligned}$$

dato che il valore di attesa della posizione in un autostato dell'energia è nullo. Perché $\langle x \rangle$ sia diverso da zero, dando per scontato che a e b siano non nulli, occorre che

$$\cos \delta \neq 0 \quad \Leftrightarrow \quad \delta \neq \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi \quad \text{con } n \in \mathbb{N}.$$

- b) Per determinare massimo e minimo di $\langle x \rangle$ annulliamo che derivate rispetto ai due parametri a e δ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle x \rangle}{\partial a} &= 2\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{(1-2a^2)}{\sqrt{1-a^2}} \cos \delta = 0 \\ \frac{\partial \langle x \rangle}{\partial \delta} &= -2\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} a\sqrt{1-a^2} \sin \delta = 0. \end{aligned}$$

Dalla seconda condizione ricaviamo $\sin \delta = 0$ che implica $b = \pm\sqrt{1-a^2}$. La prima condizione non può quindi essere soddisfatta da $\cos \delta = 0$, ma solo da $a = \pm\frac{1}{\sqrt{2}}$. In definitiva, sempre tenendo conto della fase arbitraria:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle.$$

Dall'espressione per $\langle x \rangle$ si vede che esso diventa massimo quando il segno è $+$ e minimo quando il segno è $-$.

2.22 Stato di un Oscillatore Armonico II

Si sa con certezza che lo stato di un oscillatore armonico di pulsazione ω non contiene stati più eccitati del secondo livello:

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle + c|2\rangle.$$

Si sa inoltre che il valore di aspettazione della posizione x all'istante considerato è zero e che il valore di aspettazione dell'energia è $(3/4)\hbar\omega$.

Che si può dire dei valori di a, b, c nell'ipotesi che siano reali? È completamente determinato lo stato in queste condizioni?

Soluzione

Ricordando che (A.14)

$$x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^+)|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n}|n-1\rangle + \sqrt{n+1}|n+1\rangle), \quad (2.28)$$

si ottiene

$$\langle x \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(2ab + 2\sqrt{2}bc) = 0 \quad (2.29)$$

che ha due soluzioni

- a) $b \neq 0$ e $a = -\sqrt{2}c$;
- b) $b = 0$.

Abbiamo a disposizione altre due equazioni

$$\begin{aligned} a^2 + b^2 + c^2 &= 1 \quad (\text{condizione di normalizzazione}) \\ a^2 + 3b^2 + 5c^2 &= \frac{3}{2} \quad (\text{condizione sull'energia}). \end{aligned}$$

Nel caso a) si ottiene:

$$c = \pm \frac{\sqrt{3}}{2}, \quad b = \pm i \frac{\sqrt{5}}{2}, \quad a = \mp \sqrt{\frac{3}{2}}$$

che è incompatibile con l'ipotesi di realtà dei coefficienti. Nel caso b) si ottiene:

$$b = 0, \quad c = \pm \frac{1}{2\sqrt{2}}, \quad a = \pm \sqrt{\frac{7}{8}}.$$

Si hanno, in definitiva, due possibili determinazioni dello stato, a seconda che a e c abbiano segno concorde o discorde.

Attenzione: L'ipotesi di realtà dei coefficienti, benché utile a rendere risolubile il problema, ha poco senso fisico, poiché la fase di ciascuno di essi non è misurabile. Di fatto, i risultati di questo problema possono dipendere dalla definizione utilizzata per gli operatori a e $a^\dagger$.

2.23 Proprietà generali dei potenziali periodici

Un potenziale $V(x)$ che verifica la relazione

$$V(x + na) = V(x) \quad \text{per } n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.30)$$

è detto potenziale periodico di passo a . In questo caso l'equazione di Schrödinger è invariante per trasformazioni

$$x \rightarrow x + na,$$

per traslazioni, cioè, di multipli interi di a .

Siano $u_1(x)$ e $u_2(x)$ due soluzioni linearmente indipendenti dell'equazione di Schrödinger. Per l'invarianza, anche

$$u_1(x + a) \quad \text{e} \quad u_2(x + a)$$

sono soluzioni. Deve risultare quindi:

$$u_1(x + a) = c_{1,1} u_1(x) + c_{1,2} u_2(x) \quad (2.31)$$

$$u_2(x + a) = c_{2,1} u_1(x) + c_{2,2} u_2(x). \quad (2.32)$$

Dimostrare che

- a) Teorema di Floquet: tra tutte le soluzioni dell'equazione di Schrödinger ne esistono due, ψ_1 e ψ_2 che godono della proprietà

$$\psi(x + a) = \lambda \psi(x) \quad (2.33)$$

dove λ è una costante;

- b) Teorema di Bloch: tali soluzioni si possono scrivere nella forma

$$\psi(x) = e^{ikx} u_k(x)$$

dove $u_k(x)$ è una funzione periodica di x con passo a :

$$u_k(x + a) = u_k(x).$$

Soluzione

- a) Per le soluzioni del tipo (2.33) dovrà anche risultare

$$\psi(x + na) = \lambda^n \psi(x) \quad \text{per } n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.34)$$

Se ψ è soluzione, è possibile scriverla nella forma

$$\psi(x) = A u_1(x) + B u_2(x).$$

Dalla (2.31)

$$\begin{aligned} \psi(x + a) &= A u_1(x + a) + B u_2(x + a) = \\ &= (A c_{1,1} + B c_{2,1}) u_1(x) + (A c_{1,2} + B c_{2,2}) u_2(x). \end{aligned}$$

La ψ verifica la proprietà (2.33) se

$$Ac_{1,1} + Bc_{2,1} = \lambda A$$

$$Ac_{1,2} + Bc_{2,2} = \lambda B$$

che costituisce un sistema lineare omogeneo di due equazioni nelle incognite A e B ed ha soluzioni diverse da quella banale se e solo se

$$\begin{vmatrix} c_{1,1} - \lambda & c_{2,1} \\ c_{1,2} & c_{2,2} - \lambda \end{vmatrix} = 0.$$

Questa è un'equazione quadratica in λ , le cui soluzioni λ_1 e λ_2 permettono di determinare effettivamente due soluzioni ψ_1 e ψ_2 aventi la proprietà richiesta.

- b) Dimostriamo, prima di tutto, che λ_1 e λ_2 sono complessi coniugati e di modulo 1. Notiamo che il Wronskiano di ψ_1 e ψ_2

$$W(x) = \psi_1 \psi_2' - \psi_1' \psi_2$$

soddisfa la relazione

$$W(x+a) = \lambda_1 \lambda_2 W(x).$$

Il Wronskiano di due autofunzioni corrispondenti allo stesso autovalore è costante (p.e. Messiah [9] vol.I cap. III.8), quindi

$$\lambda_1 \lambda_2 = 1.$$

Le funzioni ψ_1 e ψ_2 saranno accettabili se e soltanto se $|\lambda_1| = |\lambda_2| = 1$. Infatti se accadesse che $|\lambda_k| > 1$, l'ampiezza della ψ_k crescerebbe oltre ogni limite per $x \rightarrow +\infty$, mentre, se fosse $|\lambda_k| < 1$, la stessa cosa accadrebbe per $x \rightarrow -\infty$. Pertanto possiamo scrivere

$$\lambda_1 = e^{ika}, \quad \lambda_2 = e^{-ika}$$

dove k è un numero reale. Poiché le ψ_k sono funzioni periodiche di k possiamo limitarci a considerare i valori di k tali che

$$-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$$

sufficienti a determinare tutte le autofunzioni possibili. Per tutte le autofunzioni limitate si avrà quindi (2.34):

$$\psi(x+na) = e^{mka} \psi(x) \quad \text{per } n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Questa espressione mostra che le proprietà di invarianza del potenziale per traslazioni di una lunghezza pari al passo a , si riflettono sulla funzione d'onda in modo tale che, spostandoci di un numero intero di passi, essa sia modificata di un semplice fattore di fase. Le osservabili fisiche non sono influenzate dalla traslazione, cioè la misura di una qualsiasi di esse non consente di dire se ci troviamo in x o in $x+na$.

Se scriviamo la $\psi(x)$ nella forma

$$\psi(x) = e^{ikx} u_k(x)$$

la $u_k(x)$ deve essere una funzione periodica di x con passo a :

$$u_k(x+a) = u_k(x).$$

Questo risultato è noto come **Teorema di Bloch**. Esso presenta le soluzioni come onde piane, le soluzioni per particelle libere, modificate da un'ampiezza che riflette le proprietà di periodicità del potenziale.

2.24 Pettine di Dirac

Il più semplice potenziale periodico che si possa considerare è il cosiddetto Pettine di Dirac:

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{m} \Omega \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x+na),$$

una sequenza infinita di delta di Dirac posizionate nei punti $x = na$ con n intero relativo o nullo.

Determinare le autofunzioni di Bloch dell'Hamiltoniano e mostrare che lo spettro è composto di bande continue di autovalori.

Soluzione

In ciascuno degli intervalli $]na, (n+1)a[$ la particella è libera, quindi possiamo considerare, fissato l'autovalore E dell'energia, come soluzioni fondamentali le onde piane:

$$u_1(x) = e^{iqx} \quad \text{e} \quad u_2(x) = e^{-iqx}, \quad \text{dove} \quad q^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

Cerchiamo ora le soluzioni limitate di Floquet (vedi problema 2.23), cioè tali che, se

$$\psi(x) = Ae^{iqx} + Be^{-iqx} \quad \text{nell'intervallo} \quad 0 < x < a,$$

risulti anche

$$\psi(x) = e^{ika} \psi(x-a) = e^{ika} [Ae^{iq(x-a)} + Be^{-iq(x-a)}] \quad \text{nell'intervallo} \quad a < x < 2a.$$

Imponiamo la continuità della soluzione e, data la presenza di una δ di Dirac sulla frontiera (vedi (2.21)), la discontinuità della sua derivata prima:

$$\begin{aligned} \psi(a^+) &= \psi(a^-) \\ \psi'(a^+) &= \psi'(a^-) + 2\Omega \psi(a). \end{aligned}$$

Sostituendo, si ottiene il sistema

$$\begin{aligned} e^{ika}(A+B) &= Ae^{iqa} + Be^{-iqa} \\ iq e^{ika}(A-B) &= iq(Ae^{iqa} - Be^{-iqa}) + 2\Omega(Ae^{iqa} + Be^{-iqa}), \end{aligned}$$

cioè

$$\begin{aligned} (e^{ika} - e^{iqa})A + (e^{ika} - e^{-iqa})B &= 0 \\ \left[e^{ika} - e^{iqa} \left(1 - 2i \frac{\Omega}{q} \right) \right] A - \left[e^{ika} - e^{-iqa} \left(1 + 2i \frac{\Omega}{q} \right) \right] B &= 0. \end{aligned}$$

Si tratta di un sistema omogeneo, e, per ottenere soluzioni diverse da quella banale, occorre imporre la condizione

$$\begin{vmatrix} e^{ika} - e^{iqa} & e^{ika} - e^{-iqa} \\ e^{ika} - e^{iqa} \left(1 - 2i \frac{\Omega}{q} \right) & e^{ika} - e^{-iqa} \left(1 + 2i \frac{\Omega}{q} \right) \end{vmatrix} = 0,$$

dalla quale con brevi passaggi otteniamo

$$\cos ka = \cos qa + \frac{\Omega}{q} \sin qa. \quad (2.35)$$

Le bande degli autovalori dell'energia sono, perciò, definite dalla condizione

$$\left| \cos qa + \frac{\Omega}{q} \sin qa \right| \leq 1. \quad (2.36)$$

Una volta trovati i valori di q che soddisfano la disequazione (2.36), in corrispondenza di ciascuno di essi è possibile determinare dall'equazione (2.35) il valore di k che caratterizza le funzioni di Bloch. L'energia del livello è data da:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} q^2.$$

Dalla figura 2.10 si nota che le bande proibite sono più ampie per piccoli valori di q e tendono ad annullarsi nel limite $q \rightarrow \infty$. Riportiamo in figura 2.11, q^2 , in

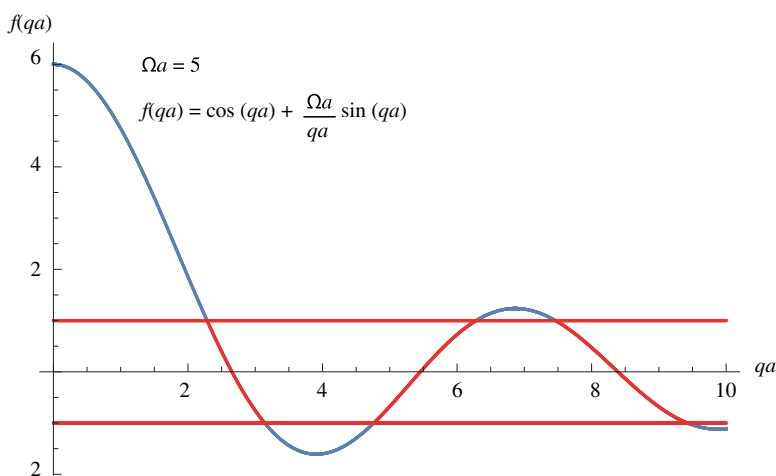


Figura 2.10. Soluzione grafica della disequazione (2.36) per $\Omega a = 5$

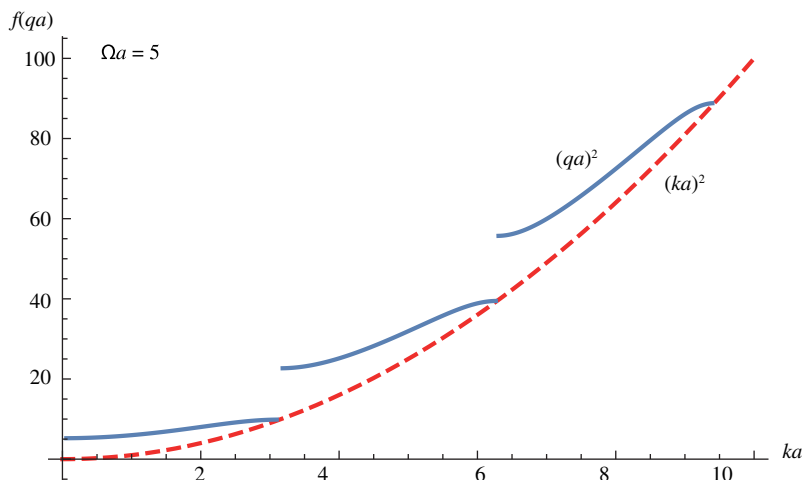


Figura 2.11. L'andamento dell'energia in funzione di qa confrontato con il caso della particella libera ($\Omega a = 5$)

pratica l'energia, in funzione di k , confrontata con la parabola k^2 , che si avrebbe se le autofunzioni fossero le onde piane, cioè se il moto fosse libero e q coincidesse con k . Le due curve coincidono nei punti $k = \frac{n\pi}{a}$, cioè al limite superiore di ciascuna banda.

Vediamo ora l'influenza del valore del parametro Ω , l'opacità, sullo spettro. Se esso tende a zero, l'equazione (2.35) comporta che $k \rightarrow q$, cioè il reticolo cristallino diventa trasparente, le bande proibite sempre più piccole fino ad annullarsi. Se invece $\Omega \rightarrow \infty$, la funzione a secondo membro della (2.35) assume valori sempre più grandi e soddisfa la condizione (2.36) per intervalli sempre più limitati di q . Le bande permesse degenerano nello spettro discreto che corrisponde alla situazione in cui in ogni segmento di passo a c'è una buca con pareti impenetrabili.

2.25 Modello di Kronig-Penney

Il modello di Kronig-Penney consiste di una sequenza infinita di barriere rettangolari con altezza del potenziale V_0 , larghezza b e separate da una distanza $a - b$, in modo che a costituisce il passo del reticolo.

Determinare le autofunzioni di Bloch dell'Hamiltoniano e mostrare che, per energie $E < V_0$, lo spettro è composto di bande continue di autovalori.

Soluzione

Per risolvere il modello utilizzeremo un metodo leggermente diverso da quello usato nel caso del Pettine di Dirac (problema 2.24).

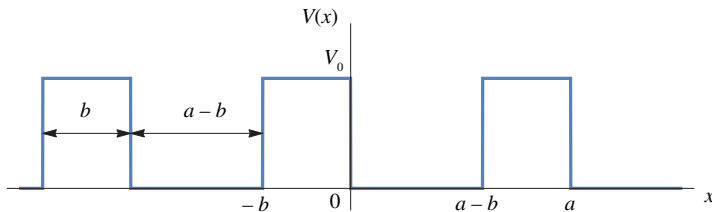


Figura 2.12. Il modello di Kronig e Penney

Nel corso della dimostrazione del Teorema di Floquet (problema 2.23) abbiamo visto che

$$\lambda_1 = e^{ika} \quad \text{e} \quad \lambda_2 = e^{-ika}$$

sono gli autovalori della matrice

$$\begin{pmatrix} c_{1,1} & c_{2,1} \\ c_{1,2} & c_{2,2} \end{pmatrix}$$

che permette di scrivere le funzioni d'onda cercate in termini di due qualsivoglia soluzioni dell'equazione di Schrödinger. Risolvendo l'equazione agli autovalori troviamo:

$$\lambda_{1,2} = \frac{c_{1,1} + c_{2,2}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{c_{1,1} + c_{2,2}}{2}\right)^2 + c_{1,2}c_{2,1} - c_{1,1}c_{2,2}}.$$

Questo risultato, combinato con l'espressione per λ_1 e λ_2 , comporta

$$c_{1,1} + c_{2,2} = \lambda_1 + \lambda_2 = 2 \cos ka. \quad (2.37)$$

Costruiamo ora due soluzioni linearmente indipendenti $u_1(x)$ e $u_2(x)$ per il potenziale in oggetto, corrispondenti ad autovalori $E < V_0$. Introduciamo le grandezze

$$\alpha = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad \text{e} \quad \beta = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

Una soluzione è data da

$$\begin{aligned} u_1(x) &= e^{\alpha x} && \text{per } -b < x < 0 \\ u_1(x) &= \cos \beta x + \frac{\alpha}{\beta} \sin \beta x && \text{per } 0 < x < a-b, \end{aligned}$$

dove abbiamo posto uguale a 1 il coefficienti di u_1 e abbiamo imposto la continuità della funzione d'onda e della sua derivata in $x = 0$.

In modo del tutto analogo possiamo determinare una soluzione indipendente u_2 data da

$$\begin{aligned} u_2(x) &= e^{-\alpha x} && \text{per } -b < x < 0 \\ u_2(x) &= \cos \beta x - \frac{\alpha}{\beta} \sin \beta x && \text{per } 0 < x < a-b. \end{aligned}$$

Spostandoci nella regione occupata dalla successiva barriera, tra $a - b$ e a dobbiamo avere:

$$\begin{aligned} u_1(x) &= c_{1,1}e^{\alpha x} + c_{1,2}e^{-\alpha x} & \text{per } a - b < x < a \\ u_2(x) &= c_{2,1}e^{\alpha x} + c_{2,2}e^{-\alpha x} & \text{per } a - b < x < a. \end{aligned}$$

Nel punto $x = a - b$ le funzioni e le derivate prime devono coincidere per entrambe le funzioni $u_1(x)$ e $u_2(x)$. Questo porta al sistema:

$$\begin{aligned} \cos \beta(a - b) + \frac{\alpha}{\beta} \sin \beta(a - b) &= c_{1,1} e^{\alpha(a-b)} + c_{1,2} e^{-\alpha(a-b)} \\ \cos \beta(a - b) - \frac{\alpha}{\beta} \sin \beta(a - b) &= c_{2,1} e^{\alpha(a-b)} + c_{2,2} e^{-\alpha(a-b)} \\ -\beta \sin \beta(a - b) + \alpha \cos \beta(a - b) &= \alpha \left(c_{1,1} e^{\alpha(a-b)} - c_{1,2} e^{-\alpha(a-b)} \right) \\ -\beta \sin \beta(a - b) - \alpha \cos \beta(a - b) &= \alpha \left(c_{2,1} e^{\alpha(a-b)} - c_{2,2} e^{-\alpha(a-b)} \right) \end{aligned}$$

dal quale è possibile determinare i coefficienti $c_{i,k}$. Risolvendo la seconda e la quarta equazione per $c_{2,1}$ e $c_{1,2}$ e sostituendo nelle altre due equazioni possiamo ricavare:

$$\begin{aligned} c_{1,1} &= \frac{\alpha^2 - \beta^2}{2\alpha\beta} e^{\alpha b} \sin \beta(a - b) + e^{\alpha b} \cos \beta(a - b) \\ c_{2,2} &= -\frac{\alpha^2 - \beta^2}{2\alpha\beta} e^{-\alpha b} \sin \beta(a - b) + e^{-\alpha b} \cos \beta(a - b). \end{aligned}$$

Infine, utilizzando la relazione (2.37) otteniamo:

$$\cos ka = \frac{\alpha^2 - \beta^2}{2\alpha\beta} \sinh \alpha b \sin \beta(a - b) + \cosh \alpha b \cos \beta(a - b). \quad (2.38)$$

Come nel caso del Pettine di Dirac, questa relazione consente di determinare k solo quando il secondo membro è compreso tra -1 e 1 , dando così origine allo spettro a bande.

3

Sistemi in 2D e 3D e Momento angolare

3.1 Oscillatore Armonico piano

Un oscillatore armonico piano ha come Hamiltoniano

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(q_x^2 + q_y^2).$$

- Si dica quali sono i livelli energetici e la loro degenerazione;
- si scriva l'Hamiltoniano in termini degli operatori

$$\eta_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x + ia_y) \quad \eta_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x - ia_y)$$

con

$$a_x = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} q_x + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} p_x \quad a_y = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} q_y + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} p_y$$

e dei loro hermitiano coniugati;

- si scriva l'operatore momento angolare per questo problema; cosa si può dire sul momento angolare a fissato livello di energia?

Soluzione

a)

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_x + \mathcal{H}_y = \hbar\omega(a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y + 1).$$

Gli autovalori di $\mathcal{H}$ sono dati da

$$E = (n+1)\hbar\omega \quad \text{con } n = 0, 1, \dots$$

ai quali corrispondono gli autostati $|n_x, n_y\rangle$ con $n_x + n_y = n$, $n_x > 0$, $n_y > 0$, che possiamo anche scrivere nella forma

$$|k, n-k\rangle \quad \text{con } k = 0, 1, \dots, n.$$

E_n è quindi degenerare $n+1$ volte.

b) In termini degli operatori η si ottiene

$$a_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(\eta_+ + \eta_-) \quad a_y = \frac{1}{i\sqrt{2}}(\eta_+ - \eta_-)$$

$$\mathcal{H} = \hbar\omega(\eta_+^\dagger \eta_+ + \eta_-^\dagger \eta_- + 1).$$

c) Per questo sistema il momento angolare ha solo componente lungo l'asse z . Poiché

$$q_x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a_x + a_x^\dagger) \quad p_x = \frac{1}{i}\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(a_x - a_x^\dagger),$$

abbiamo

$$\begin{aligned} L &= q_x p_y - q_y p_x = \frac{\hbar}{2i} [(a_x + a_x^\dagger)(a_y - a_y^\dagger) - (a_y + a_y^\dagger)(a_x - a_x^\dagger)] = \\ &= \frac{\hbar}{i} [a_x^\dagger a_y - a_x a_y^\dagger]. \end{aligned}$$

In linea di principio dovrebbe essere possibile trovare un set di autostati comuni ad $\mathcal{H}$ ed L , poiché si dimostra facilmente che i due operatori commutano. Ci limitiamo tuttavia a studiare, come richiesto, gli elementi di matrice di L nei sottospazi relativi a ciascun autovalore dell'energia, cioè a n fissato. Si ottiene

$$\langle k', n - k' | L | k, n - k \rangle = \frac{\hbar}{i} \left(\sqrt{(k+1)(n-k)} \delta_{k', k+1} - \sqrt{k(n-k+1)} \delta_{k', k-1} \right),$$

con $k = 0, 1, \dots, n$. Si vede subito che gli elementi diagonali, cioè i valori di aspettazione di L negli autostati dell'energia che abbiamo trovato, sono nulli. In questi autostati accade quindi o che $\ell = 0$, oppure che sono presenti combinazioni di ℓ e di $-\ell$ che si compensano.

In ciascun sottospazio relativo ad un valore E_n la matrice di L ha questa forma:

$$L_{k',k}^{(n)} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{n} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -\sqrt{n} & 0 & \sqrt{2(n-1)} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{2(n-1)} & 0 & \sqrt{3(n-2)} & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{3(n-2)} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \sqrt{n} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -\sqrt{n} & 0 \end{pmatrix}.$$

$L^{(n)}$ è tridiagonale, antisimmetrica rispetto alla diagonale principale, simmetrica rispetto a quella opposta. Si può dimostrare in generale che il numero quantico ℓ è soggetto alla condizione:

$$\ell = -n, -n+2, \dots, n-2, n.$$

Si possono facilmente calcolare gli autovalori per i primi valori di n :

$$\begin{aligned} &\text{per } n = 0, \ell = 0 \\ &\text{per } n = 1, \ell = \pm 1 \\ &\text{per } n = 2, \ell = 0, \pm 2 \\ &\text{per } n = 3, \ell = \pm 1, \pm 3. \end{aligned}$$

3.2 Oscillatore Armonico sferico

Si consideri un oscillatore armonico tridimensionale di pulsazione ω . Gli autostati dell'Hamiltoniano dipendono da tre numeri interi positivi o nulli n_x, n_y, n_z :

$$E(n_x, n_y, n_z) = \hbar\omega \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right) = \hbar\omega \left(n + \frac{3}{2} \right)$$

$$|n\rangle = |n_x, n_y, n_z\rangle.$$

- Esprimere gli operatori di momento angolare L_x, L_y, L_z in funzione degli operatori di innalzamento ed abbassamento pertinenti ai vari gradi di libertà, $a_x, a_x^\dagger, a_y, a_y^\dagger, a_z, a_z^\dagger$, definiti in maniera usuale, e calcolare il commutatore di L_z con l'operatore Numero relativo alla direzione z : $N_z = a_z^\dagger a_z$.
- Considerati i tre autostati con $n_x + n_y + n_z = 1$, determinare le loro combinazioni che corrispondono agli autostati di L_z e calcolarne i corrispondenti autovalori (di L_z).

Soluzione

Per ciascuno dei gradi di libertà $k = x, y, z$ sono definiti gli operatori

$$q_k = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a_k + a_k^\dagger) \quad \text{e} \quad p_k = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (a_k - a_k^\dagger)$$

$$a_k = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} q_k + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} p_k \quad \text{e} \quad a_k^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} q_k - i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} p_k$$

che soddisfano le relazioni:

$$[a_k, a_j] = [a_k^\dagger, a_j^\dagger] = 0 \quad [a_k, a_j^\dagger] = \delta_{k,j}.$$

- Calcoliamo le componenti del momento angolare

$$\begin{aligned} L_x &= q_y p_z - q_z p_y = \frac{\hbar}{2i} [(a_y + a_y^\dagger)(a_z - a_z^\dagger) - (a_z + a_z^\dagger)(a_y - a_y^\dagger)] = \\ &= \frac{\hbar}{i} [a_y^\dagger a_z - a_y a_z^\dagger]. \end{aligned}$$

Analogamente si trova

$$L_y = \frac{\hbar}{i} [a_z^\dagger a_x - a_z a_x^\dagger]$$

$$L_z = \frac{\hbar}{i} [a_x^\dagger a_y - a_x a_y^\dagger].$$

Il commutatore tra L_z e N_z è

$$[L_z, N_z] = \frac{\hbar}{i} [a_x^\dagger a_y - a_x a_y^\dagger, N_z] = 0.$$

b) Il generico stato con $n_x + n_y + n_z = 1$ è

$$|1\rangle = a|1, 0, 0\rangle + b|0, 1, 0\rangle + c|0, 0, 1\rangle.$$

Poiché abbiamo visto che $[L_z, N_z] = 0$, cerchiamo gli autoket comuni ad entrambi gli operatori. Si vede subito che

- Se $a = b = 0$ e $c = 1$ si ha $N_z|1\rangle = N_z|0, 0, 1\rangle = 1 \cdot |0, 0, 1\rangle$.
 $|0, 0, 1\rangle$ è anche autoket di L_z corrispondente all'autovalore 0. Infatti

$$L_z|0, 0, 1\rangle = \frac{\hbar}{i} [a_x^\dagger a_y - a_y a_x^\dagger] |0, 0, 1\rangle = 0.$$

- Se $c = 0$ risulta: $N_z|1\rangle = N_z[a|1, 0, 0\rangle + b|0, 1, 0\rangle] = 0$. Cioè per qualsiasi valore di a e b si ha un autoket di N_z corrispondente all'autovalore 0. Cerchiamo per quali valori di a e b esso è autoket di L_z imponendo che soddisfi l'equazione agli autovalori

$$L_z[a|1, 0, 0\rangle + b|0, 1, 0\rangle] = \frac{\hbar}{i} [-a|0, 1, 0\rangle + b|1, 0, 0\rangle] = m\hbar[a|1, 0, 0\rangle + b|0, 1, 0\rangle].$$

Si ricava subito

$$\begin{cases} -\frac{1}{i}a = mb \\ \frac{1}{i}b = ma \end{cases} \Rightarrow m^2 = \hbar^2 \Rightarrow m = \pm 1.$$

Per $m = 1$, imponendo la condizione di normalizzazione $|a|^2 + |b|^2 = 1$, troviamo l'autoket

$$|n = 1, L_z = +\hbar\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1, 0, 0\rangle + i|0, 1, 0\rangle],$$

mentre per $m = -1$ troviamo l'autoket

$$|n = 1, L_z = -\hbar\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1, 0, 0\rangle - i|0, 1, 0\rangle].$$

3.3 Riflessione e rifrazione in 3 dimensioni

Considerare il seguente gradino di potenziale in 3 dimensioni

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0, & \text{se } x < 0, \\ V_0, & \text{se } x > 0. \end{cases}$$

Derivare le leggi di riflessione e rifrazione per un'onda piana che incide obliquamente sulla discontinuità del potenziale e determinare le condizioni per la riflessione totale.

Soluzione

Notiamo che l'equazione di Schrödinger è separabile in coordinate cartesiane, essendo l'Hamiltoniano dato da:

$$\mathcal{H} = \begin{cases} \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m}, & \text{se } x < 0, \\ \frac{p_x^2}{2m} + V_0 + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m}, & \text{se } x > 0. \end{cases}$$

Come si vede dall'Hamiltoniano il sistema è simmetrico per rotazioni intorno all'asse x , possiamo quindi fissare la direzione di incidenza nel piano xy , ponendo $p_z = E_z = 0$. In questo modo il problema coinvolge solo le due dimensioni x e y . Per la separabilità abbiamo:

$$E = E_x + E_y,$$

e, per la relativa autofunzione,

$$\Psi(x, y) = \psi(x)\phi(y).$$

Nella coordinata y il moto è libero, mentre nella coordinata x si ha un potenziale a gradino. Ponendo

$$k_x = \sqrt{\frac{2mE_x}{\hbar^2}}, \quad k_y = \sqrt{\frac{2mE_z}{\hbar^2}},$$

abbiamo, fissando uguale a 1 il coefficiente dell'onda incidente,

$$\begin{aligned} \phi(y) &= e^{ik_y y} \\ \psi(x) &= \begin{cases} e^{ik_x x} + R e^{-ik_x x}, & \text{se } x < 0 \\ T e^{iq_x x}, & \text{se } x > 0 \end{cases} \end{aligned}$$

dove

$$q_x = \sqrt{\frac{2m(E_x - V_0)}{\hbar^2}}.$$

Sono così individuati 3 vettori d'onda:

- Il vettore dell'onda incidente $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ dato dalle condizioni iniziali;
- Il vettore dell'onda riflessa $\mathbf{k}' = (k'_x, k'_y) = (-k_x, k_y)$;
- Il vettore dell'onda trasmessa $\mathbf{q} = (q_x, k_y)$.

Denotiamo con α , α' e β rispettivamente gli angoli tra questi vettori e l'asse x . Troviamo subito che l'angolo d'incidenza e l'angolo di riflessione sono uguali $\alpha = \alpha'$.

Imponendo le condizioni di continuità sulla frontiera delle due regioni con diverso potenziale ($x = 0$), si ottiene

$$R = \frac{k_x - k'_x}{k_x + k'_x} \quad \text{e} \quad T = \frac{2k_x}{k_x + k'_x}.$$

La situazione presenta analogie e differenze rispetto al caso delle onde elettromagnetiche, per le quali vale la legge di Snell. Nel presente caso V_0 , cioè la variazione del potenziale, assume il ruolo di cambiamento dell'indice di rifrazione. Tuttavia, mentre per i fotoni vale la semplice relazione (n = indice di rifrazione)

$$k = \frac{\omega}{c} n = \frac{E}{\hbar c} n,$$

per le particelle la relazione è

$$k = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}.$$

In termini dei vettori d'onda gli angoli sono dati da

$$\begin{aligned} \sin \alpha &= \frac{k_y}{\sqrt{k_y^2 + k_x^2}} & \sin \beta &= \frac{k_y}{\sqrt{k_y^2 + q_x^2}} \\ \frac{\sin \alpha}{\sin \beta} &= \frac{\sqrt{k_y^2 + q_x^2}}{\sqrt{k_y^2 + k_x^2}} = \sqrt{\frac{E_y + E_x - V_0}{E_y + E_x}}. \end{aligned}$$

Possiamo distinguere due casi:

$V_0 > 0$. Se $E < V_0$, q_x è immaginario, e nella regione $x > 0$ la funzione d'onda è smorzata esponenzialmente. Si trova che $|R| = 1$ e la corrente trasmessa è nulla: siamo nel caso di totale riflessione. Se, invece, $E > V_0$, q_x è reale e si ha una corrente trasmessa; abbiamo $\sin \beta > \sin \alpha$ e quindi $\beta > \alpha$. Questo caso corrisponde, quindi, al passaggio della luce da un mezzo più rifrangente ad uno meno rifrangente.

$V_0 < 0$. Qualsiasi sia il valore di $E > 0$ abbiamo $\alpha > \beta$. È quanto accade quando la luce passa da un mezzo meno rifrangente ad uno più rifrangente.

3.4 J^2 e J_z : proprietà degli autostati

Gli operatori $J_{\pm} = J_x \pm iJ_y$ svolgono il ruolo di operatori di innalzamento/abbassamento della componente z del momento angolare:

$$J_+ |j, m\rangle = c_+ |j, m+1\rangle \quad (3.1)$$

$$J_- |j, m\rangle = c_- |j, m-1\rangle. \quad (3.2)$$

- Calcolare i coefficienti c_+ e c_- imponendo la normalizzazione degli autoket di J^2 e J_z .
- Calcolare gli elementi di matrice degli operatori J_x , J_y e J_z nella rappresentazione relativa a J^2 e J_z .

- c) Mostrare che in un autostato di J^2 e J_z corrispondente ai numeri quantici j ed m , la massima accuratezza nella misura contemporanea di J_x e J_y si ottiene quando $|m| = j$.
- d) Calcolare il valore di attesa in un autostato di J^2 e J_z della componente del momento angolare lungo una direzione $\hat{n}$ che forma angolo θ con l'asse z .

Soluzione

- a) La relazione duale della (3.1) si scrive

$$\langle j, m | J_- = c_+^* \langle j, m+1 |$$

e, quindi

$$\langle j, m | J_- J_+ | j, m \rangle = |c_+|^2 \langle j, m+1 | j, m+1 \rangle = |c_+|^2$$

dalla quale si ricava

$$\begin{aligned} |c_+|^2 &= \langle j, m | J_- J_+ | j, m \rangle = \langle j, m | J^2 - J_z^2 - \hbar J_z | j, m \rangle = \\ &= [\hbar^2 j(j+1) - \hbar^2 m^2 - \hbar^2 m] \langle j, m | j, m \rangle, \end{aligned}$$

e, ponendo uguale a 0 la fase di c_+ ,

$$c_+ = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}. \quad (3.3)$$

In modo analogo si ottiene:

$$c_- = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}. \quad (3.4)$$

Le due relazioni (3.1) e (3.2) possono essere, quindi, riscritte nella forma:

$$J_{\pm} |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle. \quad (3.5)$$

- b) Calcoliamo ora gli elementi di matrice delle tre componenti di $\mathbf{J}$ nella rappresentazione $|j, m\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle j', m' | J_x | j, m \rangle &= \left\langle j', m' \left| \frac{J_+ + J_-}{2} \right| j, m \right\rangle = \\ &= \frac{\hbar}{2} \left[\sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \delta_{j,j'} \delta_{m,m'-1} + \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \delta_{j,j'} \delta_{m,m'+1} \right] \end{aligned} \quad (3.6)$$

$$\begin{aligned} \langle j', m' | J_y | j, m \rangle &= \left\langle j', m' \left| \frac{J_+ - J_-}{2i} \right| j, m \right\rangle = \\ &= \frac{\hbar}{2i} \left[\sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \delta_{j,j'} \delta_{m,m'-1} - \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \delta_{j,j'} \delta_{m,m'+1} \right] \end{aligned} \quad (3.7)$$

$$\langle j', m' | J_z | j, m \rangle = \hbar m \delta_{j,j'} \delta_{m,m'}. \quad (3.8)$$

- c) Cerchiamo, ora, il minimo nello stato $|jm\rangle$ delle indeterminazioni di J_x e J_y , che sono uguali per motivi di simmetria (come, del resto, si può verificare):

$$(\langle \Delta J_x \rangle)^2 = \langle J_x^2 \rangle - \langle J_x \rangle^2 = (\langle \Delta J_y \rangle)^2 = \langle J_y^2 \rangle - \langle J_y \rangle^2.$$

Sempre per motivi di simmetria, $\langle J_x \rangle = \langle J_y \rangle$. Questi valori di attesa sono nulli; infatti, utilizzando i risultati precedenti, si ottiene:

$$\begin{aligned} \langle J_x \rangle &= \langle j, m | J_x | j, m \rangle = \\ &= \frac{\hbar}{2} \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \langle j, m | j, m+1 \rangle + \\ &+ \frac{\hbar}{2} \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \langle j, m | j, m-1 \rangle = 0. \end{aligned}$$

Pertanto:

$$\begin{aligned} \langle \Delta J_x \rangle^2 &= \langle J_x^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle J^2 - J_z^2 \rangle = \frac{1}{2} [j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2] = \\ &= \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - m^2] \end{aligned}$$

che è chiaramente minima per $|m| = j$, il valore massimo che $|m|$ può assumere.

- d) Il versore $\hat{n}$ in coordinate sferiche ha la forma

$$\hat{n} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta).$$

La componente di $\mathbf{J}$ nella direzione $\hat{n}$ è

$$\mathbf{J} \cdot \hat{n} = J_x \sin \theta \cos \phi + J_y \sin \theta \sin \phi + J_z \cos \theta.$$

Il valore di aspettazione cercato è dunque:

$$\begin{aligned} \langle j, m | \mathbf{J} \cdot \hat{n} | j, m \rangle &= \sin \theta \cos \phi \langle j, m | J_x | j, m \rangle + \sin \theta \sin \phi \langle j, m | J_y | j, m \rangle + \\ &+ \cos \theta \langle j, m | J_z | j, m \rangle = \hbar m \cos \theta \end{aligned}$$

dato che, come abbiamo visto, i valori di aspettazione relativi a J_x e J_y sono nulli.

3.5 Misure di momento angolare in uno stato con $\ell = 1$

Si consideri un sistema in uno stato di momento angolare $\ell = 1$. Dopo aver misurato la componente del momento angolare lungo una direzione $\hat{n}$ che forma angolo θ con l'asse z ed avendo trovato il risultato $+\hbar$, si misura la componente del momento angolare lungo l'asse z . Qual è la probabilità di trovare il valore $+\hbar$?

Soluzione

Ricordiamo che le componenti del momento angolare sono compatibili con il suo modulo quadro; pertanto, le loro misure non modificano la proprietà di essere nello stato con $\ell = 1$.

Svilupperemo, pertanto, i calcoli nella rappresentazione $|\ell, m\rangle$ ponendoci nel sotto-spazio relativo a $\ell = 1$. Poiché m può assumere i valori $+1, 0, -1$ ai ket corrispondono vettori colonna a 3 righe e agli operatori matrici 3×3 .

Calcoliamo esplicitamente gli elementi di matrice di L_x, L_y e L_z utilizzando le espressioni (3.6), (3.7), (3.8) per $j = \ell = 1$

$$\begin{aligned}(L_x)_{m',m} &= \langle 1, m' | L_x | 1, m \rangle = \\ &= \frac{\hbar}{2} \left[\sqrt{2-m(m+1)} \delta_{m,m'-1} + \sqrt{(2m(m+1))} \delta_{m,m'+1} \right] \\ (L_y)_{m',m} &= \langle 1, m' | L_y | 1, m \rangle = \\ &= \frac{\hbar}{2i} \left[\sqrt{2-m(m+1)} \delta_{m,m'-1} - \sqrt{(2m(m+1))} \delta_{m,m'+1} \right] \\ (L_z)_{m',m} &= \langle 1, m' | L_z | 1, m \rangle = m\hbar \delta_{m,m'}.\end{aligned}$$

Possiamo scrivere esplicitamente queste matrici se associamo l'indice i di riga o di colonna con il valore di m nel modo seguente

$$\begin{aligned}m &= +1, 0, -1 \\ i &= 1, 2, 3.\end{aligned}$$

Otteniamo così:

$$L_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad L_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad L_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

È facile verificare che L_x e L_y hanno gli stessi autovalori di L_z , come ci si aspetta, dato che tutte le direzioni dello spazio sono equivalenti.

Gli autovettori di L_z sono

$$\psi_{+1} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \psi_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \psi_{-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Il versore $\hat{n}$ è dato da

$$\hat{n} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$$

e la componente di $\mathbf{L}$ nella direzione $\hat{n}$ è

$$\mathbf{L} \cdot \hat{n} = L_x \sin \theta \cos \phi + L_y \sin \theta \sin \phi + L_z \cos \theta$$

cioè

$$\mathbf{L} \cdot \hat{n} = \hbar \begin{pmatrix} \cos \theta & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{-i\phi} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{i\phi} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{-i\phi} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{i\phi} & -\cos \theta \end{pmatrix}.$$

Gli autovalori di $\mathbf{L} \cdot \hat{n}$ sono, come per qualsiasi componente di $\mathbf{L}$, $+\hbar, 0, -\hbar$. Dopo la misura di $\mathbf{L} \cdot \hat{n}$ il sistema si trova nell'autovettore corrispondente all'autovalore $+\hbar$ che indichiamo con

$$\psi_{+\hbar}^{\hat{n}} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = a \psi_{+1} + b \psi_0 + c \psi_{-1}.$$

Quindi il modulo quadro di a rappresenta la probabilità di trovare $+\hbar$ in una successiva misura di L_z . Per determinare $|a|^2$ imponiamo che $\psi_{+\hbar}^{\hat{n}}$ sia autovettore relativamente all'autovalore $+\hbar$ di $\mathbf{L} \cdot \hat{n}$

$$\mathbf{L} \cdot \hat{n} \psi_{+\hbar}^{\hat{n}} = \hbar \psi_{+\hbar}^{\hat{n}},$$

ottenendo il sistema

$$\begin{cases} a \cos \theta + \frac{b}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{-i\phi} - a = 0 \\ \frac{a}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{i\phi} + \frac{c}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{-i\phi} - b = 0 \\ \frac{b}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{i\phi} - c \cos \theta - c = 0. \end{cases}$$

Possiamo usare solo due di queste equazioni, dato che si tratta di un sistema omogeneo con determinante dei coefficienti nullo, ma un'altra equazione è data dalla condizione di normalizzazione

$$|a|^2 + |b|^2 + |c|^2 = 1.$$

Sviluppando i conti si trova la probabilità richiesta

$$P(L_z = \hbar) = |a|^2 = \frac{(1 + \cos \theta)^2}{4}.$$

3.6 Momento angolare di un'onda piana

Una particella ha impulso definito $\mathbf{p}$. Quale risultato si ottiene misurando la componente del momento angolare lungo la direzione di $\mathbf{p}$?

Soluzione

La funzione d'onda della particella è un'onda piana che si propaga nella direzione di $\mathbf{p}$:

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}},$$

dove $k = \frac{p}{\hbar}$.

Scegliendo il sistema di riferimento in modo che $\mathbf{p}$ sia diretto lungo l'asse z , si può scrivere:

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} e^{ikz} = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} e^{ikr \cos \theta}.$$

La componente di $\mathbf{L}$ lungo $\mathbf{p}$ è L_z , cioè

$$L_{\mathbf{p}} = L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}.$$

È immediato verificare che, dato che $\psi_{\mathbf{p}}$ non dipende da ϕ ,

$$L_z \psi_{\mathbf{p}} = 0.$$

Possiamo quindi affermare che la particella è in un autostato di $L \cdot \mathbf{p}$ corrispondente all'autovalore 0.

3.7 Misure di momento angolare I

Lo stato di una particella di massa m è descritto dalla funzione d'onda

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} (e^{i\varphi} \sin \vartheta + \cos \vartheta) g(r),$$

dove

$$\int |g(r)|^2 r^2 dr = 1$$

e φ , ϑ sono gli angoli azimutale e polare rispettivamente.

- Quali sono i possibili risultati di una misura della componente L_z del momento angolare della particella in questo stato?
- Qual è la probabilità di ottenere ciascuno di tali possibili risultati?
- Qual è il valore di attesa di L_z ?

Soluzione

- c) Mediante le formula (A.35), la funzione d'onda può essere riscritta nella forma

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{3}} (Y_{1,0} - \sqrt{2} Y_{1,1}) g(r);$$

quindi i possibili valori L_z sono $+\hbar$ e 0.

Supponendo normalizzata la sua parte radiale, la funzione d'onda è complessivamente normalizzata. Infatti

$$\begin{aligned} \int |\psi|^2 d\mathbf{r} &= \int_0^\infty dr r^2 |g(r)|^2 \frac{1}{3} \int_{-1}^{+1} d\cos \vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi |Y_{1,0} - \sqrt{2} Y_{1,1}|^2 \\ &= \frac{1}{3} \int_{-1}^{+1} d\cos \vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi (|Y_{1,0}|^2 + 2|Y_{1,1}|^2) = 1. \end{aligned}$$

Quindi $P(L_z = \hbar) = 2/3$ e $P(L_z = 0) = 1/3$.

- c) $\langle L_z \rangle = 2/3 \cdot \hbar + 1/3 \cdot 0 = 2/3 \hbar$.

3.8 Misure di momento angolare II

Una particella è in uno stato descritto dal pacchetto d'onda

$$\psi(x, y, z) = C(xy + yz + zx)e^{-\alpha r^2}.$$

- Qual è la probabilità che una misura del quadrato del momento angolare dia per risultato 0?
- Qual è la probabilità che dia $6\hbar^2$?
- Se si trova che il valore del numero quantico angolare è 2, quali sono le probabilità relative ai possibili valori di L_z ?

Soluzione

Introducendo le coordinate sferiche mediante la A.21, possiamo scrivere

$$\begin{aligned}\psi(r, \theta, \phi) &= C r^2 e^{-\alpha r^2} (\sin^2 \theta \sin \phi \cos \phi + \sin \theta \cos \theta \sin \phi + \sin \theta \cos \theta \cos \phi) \\ &= \frac{C}{2i} r^2 e^{-\alpha r^2} \left\{ \frac{1}{2} \sin^2 \theta (e^{2i\phi} - e^{-2i\phi}) + \sin \theta \cos \theta [e^{i\phi}(1+i) - e^{-i\phi}(1-i)] \right\} \\ &= \frac{C}{2i} r^2 e^{-\alpha r^2} \sqrt{\frac{8\pi}{15}} [Y_{2,-2} - Y_{2,2} - (1+i)Y_{2,1} + (1-i)Y_{2,-1}],\end{aligned}$$

dove si sono introdotte le Armoniche Sferiche A.36.

- La particella si trova in uno stato con $\ell = 2$, quindi $P(\ell = 0) = 0$.
- $P(L^2 = 6\hbar^2) = P(\ell = 2) = 1$.
- La probabilità di trovare un certo valore di L_z è dato dal modulo quadro del coefficiente della relativa Armonica Sferica, dopo avere integrato su r e normalizzato la funzione d'onda. Il risultato dell'integrazione su r è un termine uguale per tutte le componenti, per cui è più semplice calcolare i moduli quadri dei coefficienti delle singole armoniche sferiche e poi rinormalizzarli a somma 1. La somma dei moduli quadri dei coefficienti è

$$1 + 1 + |1+i|^2 + |1-i|^2 = 1 + 1 + 2 + 2 = 6$$

e le probabilità richieste sono date da

$$\begin{aligned}P(L_z = -2\hbar) &= \frac{1}{6} \\ P(L_z = +2\hbar) &= \frac{1}{6} \\ P(L_z = -1\hbar) &= \frac{1}{3} \\ P(L_z = +1\hbar) &= \frac{1}{3} \\ P(L_z = 0\hbar) &= 0.\end{aligned}$$

3.9 Misure di momento angolare III

Una particella è in uno stato descritto dalla funzione d'onda

$$\psi(\mathbf{r}) = Ae^{-\alpha r}$$

dove α è una costante ed A una costante di normalizzazione. Se si esegue una misura di L^2 , quale sarà la funzione d'onda immediatamente dopo la misura?

Soluzione

Ricordiamo (A.35)

$$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \quad (3.9)$$

$$Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi}. \quad (3.10)$$

Notiamo che le coordinate cartesiane,

$$x = r \sin \theta \cos \phi \quad (3.11)$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi \quad (3.12)$$

$$z = r \cos \theta \quad (3.13)$$

possono essere scritte in termini delle armoniche sferiche. Ne consegue che la funzione d'onda può essere, quindi, riscritta nella forma:

$$\psi(\mathbf{r}) = A \left[-\frac{r}{2} \left(\frac{8\pi}{3} \right)^{\frac{1}{2}} (Y_{1,+1} - Y_{1,-1}) \right] e^{-\alpha r}.$$

Si tratta quindi di un autostato di L^2 corrispondente all'autovalore $1(1+1)\hbar^2 = 2\hbar^2$. Per questo, la misura di L^2 non perturba la funzione d'onda.

3.10 Momento di dipolo

Considerare gli elementi di matrice della componente z del vettore posizione fra differenti autostati $|\ell, m\rangle$ di L^2 e di L_z :

$$\langle \ell, m | r \cos \theta | \ell', m' \rangle.$$

Utilizzando le relazioni di ricorrenza per le Armoniche sferiche (A.31)

$$\cos \theta Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = a_{\ell,m} Y_{\ell+1,m}(\theta, \phi) + a_{\ell-1,m} Y_{\ell-1,m}(\theta, \phi)$$

dove

$$a_{\ell,m} = \sqrt{\frac{(\ell+1+m)(\ell+1-m)}{(2\ell+1)(2\ell+3)}}. \quad (3.14)$$

Mostrare che tali elementi di matrice sono nulli a meno che le differenze $\ell' - \ell$ ed $m' - m$ non assumano particolari valori.

Soluzione

Calcoliamo gli elementi di matrice richiesti nella rappresentazione della posizione usando le coordinate sferiche. Tenendo conto della relazione indicata si ha:

$$\begin{aligned}
 \langle \ell, m | r \cos \theta | \ell', m' \rangle &= r \int d\Omega Y_{\ell, m}^*(\theta, \phi) \cos \theta Y_{\ell', m'}(\theta, \phi) = \\
 &= r \int d\Omega Y_{\ell, m}^*(\theta, \phi) [a_{\ell', m'} Y_{\ell+1, m'} + a_{\ell'-1, m'} Y_{\ell-1, m'}] = \\
 &= r (a_{\ell-1, m} \delta_{\ell', \ell-1} + a_{\ell+1, m} \delta_{\ell', \ell+1}) \delta_{m, m'},
 \end{aligned}$$

dove abbiamo anche usato le proprietà di ortogonalità delle Armoniche Sferiche (A.30). Ne deriva che questi elementi di matrice sono nulli, a meno che

$$\Delta m = m' - m = 0 \quad \text{e} \quad \Delta \ell = \ell' - \ell = \pm 1. \quad (3.15)$$

Queste relazioni prendono il nome di regole di selezione poiché questi elementi di matrice sono rilevanti nel calcolo delle probabilità delle transizioni di dipolo elettrico.

3.11 Momento di quadrupolo

Il momento di quadrupolo è il tensore

$$Q_{ik} = 3x_i x_k - r^2 \delta_{ik}.$$

I suoi valori di attesa indicano le deviazioni della distribuzione di probabilità rispetto ad una sfericamente simmetrica.

Si chiede di determinarne i valori di aspettazione per una particella in presenza di un potenziale centrale in un autostato di L^2 e di L_z .

Soluzione

Utilizzando la separabilità in coordinate sferiche per un potenziale centrale, un'autofunzione di L^2 e di L_z ha l'espressione A.38, per cui le espressioni da calcolare sono:

$$\langle Q_{ik} \rangle = \int_0^\infty dr |\chi_\ell(r)|^2 \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\phi |Y_{\ell, m}(\theta, \phi)|^2 Q_{ik}.$$

Gli elementi di matrice Q_{ik} dipendono dalle coordinate sferiche mediante le A.21. Notiamo che gli elementi non diagonali dipendono da ϕ tramite $\cos \phi$, $\sin \phi$, e $\sin \phi \cos \phi$, mentre la funzione integranda non dipende da ϕ . Questi termini sono tutti nulli poiché l'integrale in $d\phi$ è nullo.

Restano da calcolare gli elementi diagonali:

$$\begin{aligned}
 Q_{11} &= Q_{xx} = 3x^2 - r^2 = r^2(3 \sin^2 \theta \cos^2 \phi - 1) \\
 Q_{22} &= Q_{yy} = 3y^2 - r^2 = r^2(3 \sin^2 \theta \sin^2 \phi - 1) \\
 Q_{33} &= Q_{zz} = 3z^2 - r^2 = r^2(3 \cos^2 \theta - 1).
 \end{aligned}$$

Per Q_{xx} e Q_{yy} l'integrazione in $d\phi$, tenendo conto di

$$\cos^2 \phi = \frac{1 + \cos 2\phi}{2} \quad \text{e} \quad \sin^2 \phi = \frac{1 - \cos 2\phi}{2},$$

dà dei termini

$$\int_0^{2\pi} d\phi \cos^2 \phi = \int_0^{2\pi} d\phi \sin^2 \phi = \int_0^{2\pi} \frac{1}{2} d\phi.$$

Quindi, se definiamo

$$\langle r^2 \rangle = \int_0^\infty dr r^2 |\chi_\ell(r)|^2,$$

risulta

$$\langle Q_{xx} \rangle = \langle Q_{yy} \rangle = \langle r^2 \rangle \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \left(\frac{3}{2} \sin^2 \theta - 1 \right) |Y_\ell^m(\theta, \phi)|^2.$$

Ma, poiché

$$\frac{3}{2} \sin^2 \theta - 1 = -\frac{1}{2} (3 \cos^2 \theta - 1),$$

risulta

$$\langle Q_{xx} \rangle = \langle Q_{yy} \rangle = -\frac{1}{2} \langle Q_{zz} \rangle.$$

Calcoliamo dunque $\langle Q_{zz} \rangle$. Tenendo conto della relazione di ricorrenza per le armoniche sferiche A.31, si ottiene:

$$\begin{aligned} \langle Q_{zz} \rangle &= \langle r^2 \rangle \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta (3 \cos^2 \theta - 1) |Y_{\ell,m}(\theta, \phi)|^2 = \\ &= \langle r^2 \rangle [3(a_{\ell,m}^2 + a_{\ell-1,m}^2) - 1] = \langle r^2 \rangle \frac{2\ell(\ell+1) - 6m^2}{(2\ell-1)(2\ell+3)}. \end{aligned}$$

Vediamo ora alcuni casi particolari.

Onda s : $\ell = 0, m = 0 \Rightarrow \langle Q_{zz} \rangle = 0$, si ha completa simmetria sferica.

Onda p , $\ell = 1$: abbiamo tre possibilità:

$m = 0$: $\Rightarrow \langle Q_{zz} \rangle = \frac{4}{5} \langle r^2 \rangle > 0$ che indica una distribuzione allungata nella direzione z ;

$m = \pm 1$: $\Rightarrow \langle Q_{zz} \rangle = -\frac{2}{5} \langle r^2 \rangle < 0$ che indica una distribuzione schiacciata nella direzione z .

Notiamo che la simmetria sferica viene ripristinata se si considera la somma dei $\langle Q_{zz} \rangle$ relativi ai tre stati di m . Questo risultato è valido in generale per ogni valore di ℓ :

$$\sum_{m=-\ell}^{+\ell} \langle Q_{zz} \rangle = \langle r^2 \rangle \frac{2}{(2\ell-1)(2\ell+3)} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} [\ell(\ell+1) - 3m^2] = 0$$

dato che

$$\sum_{m=-\ell}^{+\ell} m^2 = \frac{1}{3} \ell(\ell+1)(2\ell+1).$$

Un atomo che ha gli elettroni che completano gli stati m corrispondenti agli stati di momento angolare presenti, ha simmetria sferica ed è quindi più stabile rispetto alle interazioni elettromagnetiche. Ovviamente stiamo trascurando l'interazione tra gli elettroni.

3.12 Particella in una sfera

Determinare gli autovalori dello spettro discreto dell'energia per una particella circondata da una sfera di potenziale impenetrabile, all'interno della quale il potenziale è nullo.

Soluzione

Denotiamo con R il raggio della sfera. La sua impenetrabilità comporta che la funzione d'onda si annulli sulla superficie, di modo che la corrente sia nulla. Siamo, dunque, in presenza di pareti con potenziale infinito. All'interno, invece, la particella è libera e, normalizzazione a parte, la funzione d'onda radiale è data da

$$R_{k,\ell}(r) = j_\ell(kr),$$

dove $k = \sqrt{2mE}/\hbar$. Essa si deve annullare sulla parete, cioè

$$j_\ell(kR) = 0.$$

Le funzioni di Bessel sferiche dipendono da funzioni trigonometriche ed hanno infiniti zeri che possiamo numerare in ordine crescente. Detto $\tilde{z}_{n_r,\ell}$ lo n_r -simo zero della funzione j_ℓ , perché $j_\ell(kR)$ si annulli deve risultare $k = \frac{\tilde{z}_{n_r,\ell}}{R}$. Deduciamo che possibili autovalori dell'energia sono solo quelli che soddisfano la relazione

$$E_{n_r,\ell} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\tilde{z}_{n_r,\ell}^2}{R^2}. \quad (3.16)$$

n_r viene detto numero quantico radiale, per differenziarlo dal numero quantico orbitale ℓ . Gli zeri delle funzioni di Bessel sferiche sono tabulati (vedi, ad esempio, [15]).

3.13 Stati legati di una particella in una buca sferica di potenziale

Determinare gli autovalori dell'energia degli stati legati per una particella in presenza del potenziale:

$$V(r) = \begin{cases} 0, & \text{per } r > a; \\ -V_0, & \text{per } r < a. \end{cases}$$

Soluzione

La presenza del potenziale centrifugo genera un potenziale efficace pari a

$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} \quad (3.17)$$

mostrato in nero in figura 3.1. Condizione necessaria perché ci possano essere stati legati è che il minimo del potenziale sia inferiore al valore asintotico, che è nullo. Poiché il minimo è posizionato sempre in $r = a$, questo equivale alla condizione

$$V_0 > \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2ma^2}. \quad (3.18)$$

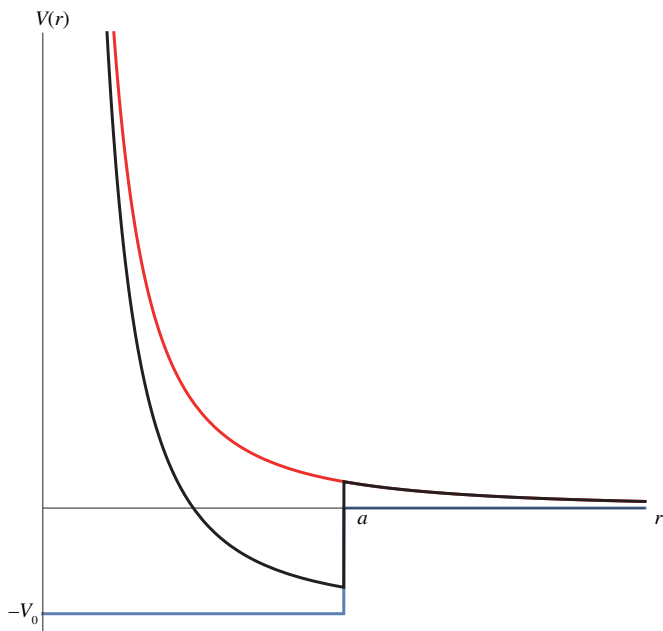


Figura 3.1. Il potenziale della buca (blu), che sommato al potenziale centrifugo (rosso) dà luogo al potenziale efficace (nero)

Possiamo già dire che ci sono situazioni per le quali non si hanno stati legati ed altre per le quali essi sono presenti, ma solo per gli stati più bassi di momento angolare. Vedremo, tuttavia, la condizione (3.18) non è una condizione sufficiente.

A fissati valore di ℓ e di energia $E < 0$ possiamo distinguere due regioni a seconda che r sia minore o maggiore di a .

Regione I: $r < a$

All'interno della sfera abbiamo un potenziale costantemente uguale a $-V_0$. L'equazione radiale è quella di una particella libera

$$\frac{d^2}{dr^2} U_{k,\ell}(r) + \left[k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] U_{k,\ell}(r) = 0 \quad (3.19)$$

con numero d'onda k dato da

$$k^2 = \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}.$$

Poiché l'origine è compresa in questa regione, l'unica soluzione accettabile è

$$U_{k,\ell}(r) = A r j_\ell(kr) \quad (3.20)$$

dove A è una costante.

Regione II: $r > a$

Anche all'esterno della sfera il potenziale è costante, ma ora il suo valore è nullo. L'equazione radiale è quella di una particella libera con autovalori, però, negativi.

$$\frac{d^2}{dr^2} U_{k,\ell}(r) + \left[-\chi^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] U_{k,\ell}(r) = 0 \quad (3.21)$$

dove χ è dato da

$$\chi^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} > 0.$$

Le soluzioni di questa equazione sono ancora delle funzioni di Bessel sferiche, con la sostituzione $k \rightarrow i\chi$. La condizione da imporre su queste soluzioni non è l'andamento regolare nell'origine, che non fa parte di questa regione, ma che non diverga per $r \rightarrow +\infty$. Da quanto esposto in Appendice, vediamo che le soluzioni con corretto andamento asintotico sono le funzioni di Hankel sferiche di I specie (A.56).

La soluzione in questa regione è, dunque, data da:

$$U_{k,\ell}(r) = B r h_\ell^{(1)}(i\chi r). \quad (3.22)$$

Raccordo delle soluzioni

Come sappiamo, le soluzioni devono coincidere in $r = a$ insieme alle loro derivate, o, equivalentemente insieme alle loro derivate logaritmiche. La condizione di continuità delle soluzioni determina il rapporto B/A (la condizione di normalizzazione consente poi di determinare il modulo di ciascuno di essi).

La condizione di continuità della derivata logaritmica determina, invece, lo spettro degli autovalori dell'energia. Infatti essa comporta:

$$\frac{1}{h_\ell^{(1)}(i\chi a)} \left[\frac{d}{dr} h_\ell^{(1)}(i\chi r) \right]_{r=a} = \frac{1}{j_\ell(ka)} \left[\frac{d}{dr} j_\ell(kr) \right]_{r=a}. \quad (3.23)$$

Notiamo che k e χ , non sono variabili indipendenti, in quanto

$$\chi^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2, \quad (3.24)$$

quindi, in generale il raccordo delle derivate logaritmiche, cioè l'esistenza di una soluzione valida in entrambe le regioni, sarà possibile solo per determinati valori dell'energia.

Poiché, come si è detto, per grandi valori di ℓ non si hanno autovalori, l'equazione (3.23) deve essere risolta a partire da $\ell = 0, 1, 2, \dots$ fino a quando risulta soddisfatta la (3.18).

Autovalori per $\ell = 0$

L'autovalore più basso in assoluto, quello dello stato fondamentale, si otterrà per $\ell = 0$, infatti aumentando il numero quantico orbitale il fondo della buca viene sollevato per effetto del potenziale centrifugo e gli autovalori saranno conseguentemente più alti. Dall'Appendice ricaviamo che

$$j_0(z) = \frac{\sin z}{z} \quad \text{e} \quad h_0^{(1)}(z) = -i \frac{e^{iz}}{z}.$$

Sostituendo nella (3.23) troviamo

$$\chi = -k \cot ka. \quad (3.25)$$

Questa è esattamente la stessa equazione già trovata nel caso della buca in una dimensione relativamente alle soluzioni dispari. Si tratta di un risultato atteso, in quanto per $\ell = 0$ il potenziale centrifugo è assente. L'unica differenza è legata al dominio di appartenenza delle soluzioni che è ristretto al semiasse positivo con la condizione che la funzione d'onda radiale si azzeri nell'origine e, nel caso della buca in una dimensione questo accade proprio per le soluzioni dispari. Risolviamo comunque la (3.25), sempre in maniera grafica, ma utilizzando un'altra strada.

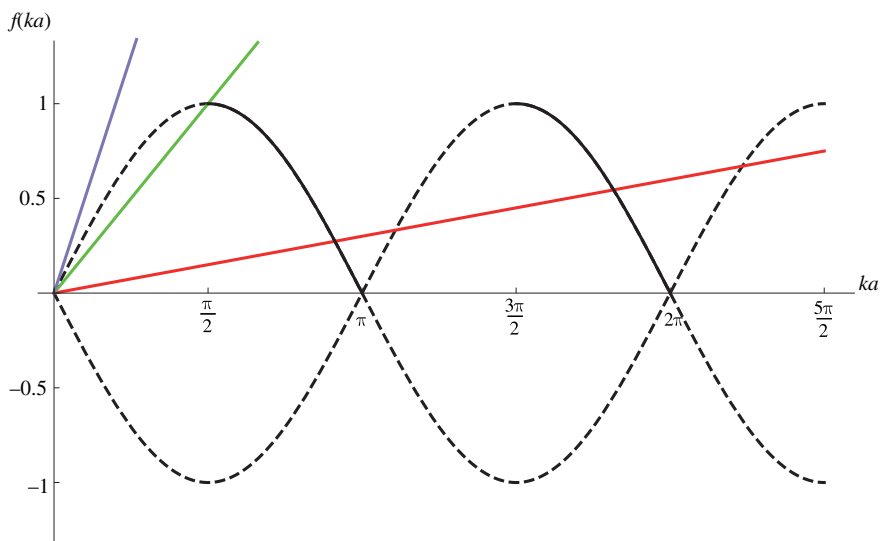


Figura 3.2. Soluzione grafica dell'equazione (3.26). La retta al II membro è riportata per 3 valori differenti del coefficiente angolare: $0.3/\pi$ (rosso), $2/\pi$ (verde), $5/\pi$ (blu)

Sfruttando la (3.24) e la (3.25) abbiamo

$$\sin ka = \pm \sqrt{\frac{1}{1 + \cot^2 ka}} = \pm \sqrt{\frac{1}{1 + \frac{\chi^2}{k^2}}} = \pm \sqrt{\frac{1}{1 + \frac{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2}{k^2}}} = \pm \sqrt{\frac{\hbar^2 k^2}{2mV_0}}$$

che possiamo anche riscrivere nella forma

$$\pm \sin ka = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mV_0 a^2}} ka. \quad (3.26)$$

Gli autovalori dell'energia si otterranno sempre dalla (3.24) in corrispondenza dei valori di ka per i quali le curve del I e del II membro si intersecano. Dovremo considerare il fatto che il II membro è sempre positivo e lo è anche ka . Inoltre, poiché

nella quadratura abbiamo perso l'informazione sul segno della cotangente, ricordiamo che l'equazione (3.25) ci dice che esso deve essere negativo. Bisogna, quindi, considerare solo le intersezioni con i tratti della curva in nero continuo nella figura (3.2). Vediamo che non esistono soluzioni se il coefficiente angolare della retta al II membro ha valori troppo elevati: esso non deve essere superiore a $2/\pi$, cioè

$$\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mV_0a^2}} \leq \frac{2}{\pi} \quad \Leftrightarrow \quad V_0a^2 \geq \frac{\pi^2\hbar^2}{8m}.$$

Concludiamo notando che, a differenza del caso in una dimensione, dove esiste sempre almeno uno stato di parità positiva, in tre dimensioni per poter legare una particella la buca deve essere abbastanza profonda e larga, o, meglio, se il prodotto V_0a^2 non è abbastanza grande. Questo si può intuire pensando al fatto che la funzione d'onda deve andare a zero nell'origine e per grandi r . Il raccordo tra questi due andamenti non può avvenire se la curvatura (la derivata seconda), che, come si vede dalla (3.19) cresce linearmente con V_0 , non è abbastanza grande oppure se la buca non è abbastanza larga.

3.14 Particella in un nucleo

Un nucleo di dimensioni $5 \cdot 10^{-13}$ cm è schematizzato come una buca di potenziale di profondità 10 MeV.

Trovare la minima massa di una particella all'interno del nucleo.

Soluzione

Ricordiamo (vedi problema 3.13) che per una buca sferica di raggio a e profondità V_0 in uno stato di momento angolare $\ell = 0$, gli stati legati si ottengono come soluzioni dell'equazione (3.26)

$$\sin ka = \pm \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mV_0a^2}} ka \quad (\cot ka < 0)$$

dove $k = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar$.

La suddetta equazione ha soluzioni solo se

$$\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mV_0a^2}} < \frac{2}{\pi}$$

$$mc^2 > \frac{\pi^2\hbar^2 c^2}{8V_0a^2}.$$

Nel nostro caso, ponendo $V_0 = 10$ MeV, $a = 5 \cdot 10^{-13}$ cm, si ottiene

$$mc^2 > 192.3 \text{ MeV}.$$

Ricordando che per ottenere stati di momento angolare con $\ell > 0$ occorrono, a massa m fissata, valori più alti di V_0 , possiamo desumere che, se si lascia fisso V_0 , l'esistenza di tali stati necessita di valori di massa più alti di quello trovato per $\ell = 0$.

3.15 Particella in potenziale centrale

Una particella in un potenziale $V(r)$ è descritta dalla funzione d'onda

$$\psi_E(r, \vartheta, \varphi) = A e^{-\frac{r}{a_0}} \quad (a_0 \text{ costante})$$

autostato dell'Hamiltoniano.

- Qual è il contenuto di momento angolare dello stato?
- Supponendo che il potenziale si annulli nel limite $r \rightarrow \infty$, trovare l'autovalore dell'energia considerando in questo limite l'equazione radiale

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] + V(r) \right\} \psi_E(r, \vartheta, \varphi) = E \psi_E(r, \vartheta, \varphi).$$

- Dal valore di E ricavare $V(r)$, utilizzando sempre l'equazione radiale.

Soluzione

- La funzione d'onda non dipende da ϑ e φ , quindi il sistema è in uno stato con $\ell = m = 0$.
- Poiché

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r e^{-\frac{r}{a_0}} &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(1 - \frac{r}{a_0} \right) e^{-\frac{r}{a_0}} = \frac{1}{r} \left(-\frac{1}{a_0} - \frac{1}{a_0} + \frac{r}{a_0^2} \right) e^{-\frac{r}{a_0}} = \\ &= \left[-\frac{2}{a_0} \frac{1}{r} + \frac{1}{a_0^2} \right] e^{-\frac{r}{a_0}}, \end{aligned}$$

sostituendo nell'equazione radiale si ottiene

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{2}{a_0} \frac{1}{r} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{a_0^2} + V(r) = E.$$

Al limite per $r \rightarrow \infty$ troviamo l'autovalore dell'energia:

$$E = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2}.$$

- Sostituendo nell'equazione precedente il valore di E trovato, abbiamo

$$V(r) = -\frac{\hbar^2}{ma_0} \frac{1}{r}.$$

Se a_0 è il raggio di Bohr ($a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$), si ottiene il potenziale dell'atomo d'idrogeno

$$V(r) = -\frac{e^2}{r}.$$

3.16 Particella carica in campo magnetico

L'Hamiltoniano per una particella carica priva di spin in un campo magnetico $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ è

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2,$$

dove e è la carica della particella, $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ è l'impulso coniugato alla posizione $\mathbf{r}$. Dato $\mathbf{A} = (-B_0 y, 0, 0)$, corrispondente a un campo magnetico costante $\mathbf{B} = (0, 0, B_0)$:

- Dimostrare che p_x e p_z sono costanti del moto.
- Trovare i livelli di energia del sistema.

Soluzione

- L'Hamiltoniano del sistema si può scrivere in termini delle componenti dell'impulso come:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \left[\left(p_x + \frac{eB_0}{c} y \right)^2 + p_y^2 + p_z^2 \right].$$

Quindi commuta con tutte le componenti di $\mathbf{p}$ fuorché p_y .

- Per quanto detto possiamo scegliere come set completo di osservabili che commutano $\{\mathcal{H}, p_x, p_z\}$. Detti p_x e p_z gli autovalori degli ultimi due operatori, le autofunzioni sono del tipo

$$\Psi(x, y, z) = e^{i \frac{xp_x + zp_z}{\hbar}} \phi(y),$$

dove $\phi(y)$ deve soddisfare l'equazione agli autovalori

$$\frac{1}{2m} \left[\left(p_x + \frac{eB_0}{c} y \right)^2 - \hbar^2 \frac{d^2}{dy^2} + p_z^2 \right] \phi(y) = E \phi(y),$$

cioè

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{2} m \left(\frac{eB_0}{mc} \right)^2 \left(y + \frac{cp_x}{eB_0} \right)^2 \right] \phi(y) = \left(E - \frac{p_z^2}{2m} \right) \phi(y).$$

Ponendo

$$\omega = \frac{|e|B_0}{mc}, \quad y' = y + \frac{cp_x}{eB_0}, \quad E' = E - \frac{p_z^2}{2m},$$

troviamo l'equazione

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi(y)}{dy^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 y'^2 \phi(y) = E' \phi(y),$$

che è l'equazione agli autovalori per una particella in un potenziale armonico unidimensionale di pulsazione ω i cui autovalori sono

$$E' = E - \frac{p_z^2}{2m} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad \text{con} \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Gli autovalori dell'energia del sistema sono, quindi, dati da

$$E_n = \frac{p_z^2}{2m} + \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad \text{con} \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

3.17 Stati legati dell'atomo idrogenoide

L'atomo idrogenoide è l'atomo in cui sono presenti un nucleo di carica positiva $+Ze$ e un elettrone di carica negativa $-e$. Nel caso dell'atomo d'idrogeno $Z = 1$. Per Z differenti si tratta di atomi ionizzati con un unico elettrone. Il potenziale è, nelle unità di misura di Gauss,

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}. \quad (3.27)$$

Gli stati atomici corrispondono agli stati legati ($E < 0$) per questo potenziale. Introduciamo le grandezze χ legata all'autovalore E ,

$$\chi = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad (3.28)$$

e

$$\lambda = \frac{Ze^2 m}{\chi \hbar^2} = z\alpha \sqrt{\frac{mc^2}{2|E|}} \quad (3.29)$$

dove

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137} \quad (3.30)$$

è la costante di struttura fine.

In termini di questi parametri l'equazione radiale (A.39) si riscrive

$$\frac{d^2}{dr^2} U_{E,\ell}(r) + \left[-\chi^2 + \frac{2\chi\lambda}{r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] U_{E,\ell}(r) = 0. \quad (3.31)$$

Calcolare, risolvendo questa equazione con il metodo di integrazione per serie gli autovalori dell'energia corrispondenti agli stati legati.

Soluzione

Notiamo che il potenziale Coulombiano è meno divergente di r^{-2} nell'origine. Sappiamo che in questi casi l'unica soluzione regolare in $r = 0$ deve avere l'andamento

$$U_{E,\ell}(r) \underset{r \rightarrow 0}{\sim} r^{\ell+1}, \quad (3.32)$$

mentre, come abbiamo visto discutendo il problema della buca sferica (3.13), nel limite $r \rightarrow \infty$, dato che il potenziale va a zero, abbiamo il comportamento limite delle funzioni sferiche di Hankel di I specie, cioè

$$U_{E,\ell}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{-\chi r}. \quad (3.33)$$

Imponiamo la fattorizzazione

$$U_{E,\ell}(r) = r^{\ell+1} e^{-\chi r} u(r) \quad (3.34)$$

dove $u(r)$ è una funzione da determinare che interpola i due andamenti. Sostituendo l'espressione (3.34) e considerato anche il cambiamento di variabile

$$t = 2\chi r \quad (3.35)$$

l'equazione radiale diventa un'equazione per la funzione interpolante $u(t)$:

$$t \frac{d^2}{dt^2} u(t) + (2\ell + 2 - t) \frac{d}{dt} u(t) - (\ell + 1 - \lambda) u(t) = 0. \quad (3.36)$$

Questa equazione è l'equazione Ipergeometrica Confluente di Kummer, della quale si conoscono le soluzioni. Di essa cerchiamo le soluzioni che soddisfano gli andamenti (3.32) e (3.33). Utilizziamo il metodo di integrazione per serie, cioè cerchiamo una soluzione del tipo:

$$u(t) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k t^k. \quad (3.37)$$

Sostituendo nella (3.36), abbiamo

$$\sum_{k=2}^{\infty} k(k-1) a_k t^{k-1} + (2\ell + 2 - t) \sum_{k=1}^{\infty} k a_k t^{k-1} - (\ell + 1 - \lambda) \sum_{k=0}^{\infty} a_k t^k = 0.$$

Ridefinendo l'indice di somma $k-1 \rightarrow k$ nelle prime due sommatorie e separando la seconda sommatoria:

$$\sum_{k=1}^{\infty} (k+1) k a_{k+1} t^k + (2\ell + 2) \sum_{k=0}^{\infty} (k+1) a_{k+1} t^k - \sum_{k=1}^{\infty} k a_k t^k - (\ell + 1 - \lambda) \sum_{k=0}^{\infty} a_k t^k = 0.$$

Notiamo che nel primo e terzo termine, per la presenza del fattore k , l'indice di somma può partire da 0. Questo ci consente di aggregare i termini che hanno gli stessi coefficienti a_k :

$$\sum_{k=0}^{\infty} [(k+1)(k+2\ell+2) a_{k+1} - (\ell+1-\lambda+k) a_k] t^k = 0.$$

Dovrà, quindi, risultare

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} = \frac{\ell+1-\lambda+k}{(k+1)(k+2\ell+2)}. \quad (3.38)$$

Questo rapporto nel limite $k \rightarrow \infty$ si comporta

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} \underset{k \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{k}.$$

Ne consegue che la serie (3.37) ha lo stesso andamento per grandi r di $e^t = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!}$. Se questo si verificasse, l'andamento asintotico della funzione radiale sarebbe:

$$U_{E,\ell}(r) = r^{\ell+1} e^{-\chi r} \sum_{k=0}^{\infty} a_k (2\chi r)^k \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{\chi r}$$

che non è accettabile. Tuttavia, questo non accadrebbe se la serie si troncasse a partire da un certo k , cioè se esistesse un valore n_r di k tale che

$$\lambda = n_r + \ell + 1 \quad \text{con} \quad n_r = 0, 1, 2, \dots$$

n_r , il *numero quantico radiale*, è il grado del polinomio al quale la serie si riduce. Notiamo che anche λ è un intero, essendo somma di interi, e possiamo porre $\lambda = n$:

$$n = n_r + \ell + 1 \quad \text{con} \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.39)$$

Tramite l'equazione (3.29) risulta così determinato lo spettro dell'energia:

$$E_n = -\frac{1}{2} mc^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2}. \quad (3.40)$$

3.18 Atomo d'Idrogeno unidimensionale? Una somiglianza ingannevole

Lo stato di una particella di massa m in una dimensione è descritto dalla funzione d'onda

$$\psi(x) = A \left(\frac{x}{x_0} \right)^n e^{-\frac{x}{x_0}},$$

dove A , n e x_0 sono costanti.

- Usando l'equazione di Schrödinger, trovare il potenziale $V(x)$ e l'energia E per i quali questa funzione d'onda è un'autofunzione (assumere che $V(x) \rightarrow 0$ per $x \rightarrow \infty$).
- Quale connessione si può notare tra questo potenziale e il potenziale radiale effettivo (coulombiano + centrifugo) per un atomo d'idrogeno nello stato di momento angolare orbitale ℓ ?

Soluzione

- Sostituendo $\psi(x)$ nell'equazione di Schrödinger si ottiene:

$$[E - V(x)]\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{n(n-1)}{x^2} - 2\frac{n}{xx_0} + \frac{1}{x_0^2} \right] \psi(x).$$

Nell'ipotesi $V(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0$, si ottiene

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{x_0^2} \quad \text{e quindi} \quad V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{n(n-1)}{x^2} - 2\frac{n}{xx_0} \right].$$

- Il termine $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{n(n-1)}{x^2}$ è l'analogo del potenziale centrifugo $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$ dell'equazione radiale, ma il termine in $\frac{1}{x}$ dipende da n mentre ciò non accade nel potenziale coulombiano $\frac{q^2}{r}$.

3.19 Atomo d'Idrogeno: determinarne lo stato

Di un atomo di idrogeno si sa che:

- a) è in uno stato p con $n = 2$;
- b) lo stato contiene autostati di L_z relativi agli autovalori $+1$ e -1 ;
- c) il valore di aspettazione di L_z è zero;
- d) la probabilità di trovare l'elettrone nel primo quadrante ($0 < \phi < \frac{\pi}{2}$) è del 25%.

Scrivere le possibili funzioni d'onda.

Soluzione

Indichiamo con $|n\ell m\rangle$ il generico autostato comune ad $\mathcal{H}, L^2, L_z$. Le condizioni a) e b) consentono di scrivere lo stato cercato nella forma:

$$|\psi\rangle = \alpha|2, 1, 1\rangle + \beta|2, 1, -1\rangle.$$

Per condizione c):

$$\langle\psi|L_z|\psi\rangle = |\alpha|^2\hbar - |\beta|^2\hbar = 0 \quad \Rightarrow \quad |\alpha|^2 = |\beta|^2.$$

Imponendo la normalizzazione e tenendo in conto che, poiché la fase complessiva di ψ è indeterminata, possiamo fissare α reale e positivo, otteniamo

$$\alpha = |\beta| = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

e, detta δ la fase di β ,

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad \text{e} \quad \beta = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\delta}.$$

La condizione d) richiede il passaggio alle funzioni d'onda. La probabilità di trovare la particella tra ϕ e $\phi + d\phi$ si ottiene integrando sulle altre variabili il modulo quadro della $\psi(r, \theta, \phi) = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle$

$$\begin{aligned} P(\phi)d\phi &= \left| \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\phi} + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\phi+i\delta} \right) \right|^2 d\phi \\ P\left(0 < \phi < \frac{\pi}{2}\right) &= \int_0^{\frac{\pi}{2}} P(\phi)d\phi = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} [1 + \cos(2\phi - \delta)] d\phi = \\ &= \frac{1}{4} + \frac{1}{2\pi} \sin \delta = \frac{1}{4}. \end{aligned} \tag{3.41}$$

Quindi

$$\sin \delta = 0 \quad \Rightarrow \quad \delta = n\pi.$$

Abbiamo quindi due possibili determinazioni dello stato corrispondenti alla scelta di n pari o dispari:

$$|\psi\rangle = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}|2, 1, 1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|2, 1, -1\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}|2, 1, 1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|2, 1, -1\rangle. \end{cases}$$

3.20 Atomo d'Idrogeno: proprietà dello stato fondamentale

La funzione d'onda dello stato fondamentale dell'atomo d'idrogeno è:

$$\psi_{1,0,0} = \sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

dove $a_0 = \hbar^2/me^2$ è il raggio di Bohr.

- Determinare a quale distanza dal nucleo la densità di probabilità di trovare l'elettrone è massima.
- Determinare inoltre il valore d'attesa della posizione dell'elettrone.

Soluzione

Poiché si richiede la probabilità di trovare l'elettrone a fissata distanza dal nucleo (o meglio di trovare la massa ridotta a fissata distanza dal Centro di Massa) indipendentemente dalla direzione, occorre integrare la distribuzione di probabilità su tutto l'angolo solido.

$$P(r)dr = \int d\Omega |\psi_{1,0,0}|^2 r^2 dr = 4\pi |\psi_{1,0,0}|^2 r^2 dr = \frac{4r^2}{a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} dr.$$

- La densità di probabilità di trovare l'elettrone è massima per r soluzione dell'equazione

$$\frac{dP(r)}{dr} = \frac{4}{a_0^3} \left[2r - 2\frac{r^2}{a_0} \right] e^{-\frac{2r}{a_0}} = 0 \quad \text{con} \quad \frac{d^2P(r)}{dr^2} < 0.$$

Quindi il massimo richiesto si ha in $r = a_0$ ($r = 0$ corrisponde ad un minimo).

- Il valore d'attesa della posizione dell'elettrone, usando la formula (A.6), è dato da

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty dr r P(r) = \frac{4}{a_0^3} \int_0^\infty dr r^3 e^{-\frac{2r}{a_0}} = \frac{a_0}{4} \int_0^\infty d\alpha \alpha^3 e^{-\alpha} = \frac{3}{2} a_0.$$

3.21 Atomo d'Idrogeno in campo magnetico esterno

Si consideri un atomo d'idrogeno negli stati $2p$ (trascurando lo spin dell'elettrone). Si consideri inoltre la base degli autostati comuni agli operatori $\mathcal{H}, L^2, L_z$.

- a) Si denotino con $|\psi_+\rangle, |\psi_0\rangle, |\psi_-\rangle$ gli stati normalizzati della base corrispondenti rispettivamente a $m = +1, 0, -1$. Si immerga l'atomo di idrogeno in un campo magnetico esterno $\mathbf{B}$ parallelo all'asse z e sia l'energia di interazione data da

$$W = -\beta \mathbf{B} \cdot \mathbf{L}.$$

Calcolare i nuovi livelli di energia del sistema.

- b) Si consideri lo stato

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}(|\psi_+\rangle + \sqrt{2}|\psi_0\rangle + |\psi_-\rangle).$$

Calcolare $\langle E \rangle$ e $\Delta E^2 = \langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle$ nello stato $|\psi\rangle$.

- c) Nella rappresentazione $|\psi_+\rangle, |\psi_0\rangle, |\psi_-\rangle$, in cui L_z è diagonale, si ha

$$L_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$L_y = \frac{\hbar}{i\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Calcolare i valori medi di L_x e L_y nello stato $|\psi(t)\rangle$.

Soluzione

- a) L'energia dei livelli $2p$ in assenza del campo magnetico è

$$E_2 = -\frac{\mu c^2 \alpha^2}{8}$$

dove μ è la massa ridotta dell'elettrone e α la costante di struttura fine. Il contributo di energia relativo al campo magnetico corrisponde all'operatore

$$\hat{W} = -\beta \hat{B} \hat{L}_z$$

che commuta con il resto dell'Hamiltoniano. Inoltre gli stati considerati sono autostati di $\hat{L}_z$, quindi i nuovi livelli di energia sono

$$E_2^{+1} = -\frac{\mu c^2 \alpha^2}{8} - \beta \hbar B \quad E_2^0 = -\frac{\mu c^2 \alpha^2}{8} \quad E_2^{-1} = -\frac{\mu c^2 \alpha^2}{8} + \beta \hbar B,$$

dove i livelli sono stati indicizzati con il valore del numero quantico m . La presenza del campo magnetico esterno ha, quindi, generato una rottura della degenerazione.

b) Lo stato $|\psi\rangle$ è normalizzato. Si ha quindi:

$$\langle E \rangle = \left(\frac{1}{2}\right)^2 [1^2 E_2^{+1} + (\sqrt{2})^2 E_2^0 + 1^2 E_2^{-1}] = -\frac{\mu c^2 \alpha^2}{8}$$

$$\begin{aligned} \Delta E^2 &= \langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle \\ &= \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \\ &= \frac{1}{4} [(E_2^{+1})^2 + 2(E_2^0)^2 + (E_2^{-1})^2] - \langle E \rangle^2 \\ &= \frac{1}{2} \beta^2 \hbar^2 B^2. \end{aligned}$$

c) Nella rappresentazione considerata il vettore di stato corrisponde alla matrice ad una colonna

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Avremo quindi:

$$\begin{aligned} \langle L_x \rangle &= \frac{1}{2} (1 \ \sqrt{2} \ 1) \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \\ \langle L_y \rangle &= \frac{1}{2} (1 \ \sqrt{2} \ 1) \frac{\hbar}{i\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} = 0. \end{aligned}$$

3.22 Modello molecolare

Per alcune molecole l'energia potenziale può essere modellata con l'espressione

$$V(r) = -2D \left(\frac{a}{r} - \frac{a^2}{2r^2} \right).$$

Determinare i livelli di energia per questa energia potenziale e discutere i risultati nell'ipotesi, valida sovente, $D \gg \frac{\hbar^2}{2ma^2}$.

Soluzione

Introducendo la variabile

$$\rho = \frac{r}{a},$$

e i parametri

$$\kappa^2 = -\frac{2ma^2}{\hbar^2} E \quad \text{e} \quad \gamma^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2} D$$

l'equazione di Schrödinger radiale (A.39) diventa

$$U_\ell''(\rho) + \left[-\kappa^2 + \frac{2\gamma^2}{\rho} - \frac{\gamma^2 + \ell(\ell+1)}{\rho^2} \right] U_\ell(\rho) = 0.$$

L'equazione è simile a quella per l'atomo d'idrogeno, problema 3.17,

$$U_\ell''(r) + \left[-\kappa^2 + \frac{2\varepsilon\lambda}{r} - \frac{\ell'(\ell'+1)}{r^2} \right] U_\ell(r) = 0,$$

a meno delle sostituzioni

$$\lambda = \frac{\gamma^2}{\varepsilon} \quad \text{e} \quad \gamma^2 + \ell(\ell+1) = \ell'(\ell'+1) \Leftrightarrow \ell' = \sqrt{\gamma^2 + \left(\ell + \frac{1}{2}\right)^2} - \frac{1}{2}.$$

Nel caso dell'atomo d'idrogeno la richiesta che la funzione d'onda sia regolare all'infinito porta alla condizione di quantizzazione

$$\ell' + 1 - \lambda = -n_r.$$

Nel nostro caso avremo

$$\sqrt{\gamma^2 + \left(\ell + \frac{1}{2}\right)^2} + \frac{1}{2} - \frac{\gamma^2}{\varepsilon} = -n_r.$$

I livelli di energia degli stati legati sono dati quindi da

$$\begin{aligned} E_{n_r, \ell} &= -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \kappa^2 = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{\gamma^4}{\left[\sqrt{\gamma^2 + \left(\ell + \frac{1}{2}\right)^2} + \frac{1}{2} + n_r \right]^2} = \\ &= -D \frac{1}{\left[\sqrt{1 + \left(\ell + \frac{1}{2}\right)^2 x^2} + \left(\frac{1}{2} + n_r\right)x \right]^2}, \end{aligned}$$

dove

$$x = \frac{1}{\gamma}.$$

Il regime $D \gg \frac{\hbar^2}{2ma^2}$ corrisponde a $\gamma \gg 1$, cioè $x \ll 1$. Possiamo sviluppare l'espressione per i livelli energetici in serie di potenze di x fino al II ordine. Tenendo conto degli sviluppi

$$\begin{aligned} \sqrt{1+x^2} &\approx 1 + \frac{x^2}{2} \\ \left[\frac{1}{1+ax+bx^2} \right]^2 &\approx [1-ax+(a^2-b)x^2]^2 \approx 1-2ax+(3a^2-2b)x^2, \end{aligned}$$

si ottiene

$$E_{n_r, \ell} \approx -D \left[1 - \frac{2(n_r + \frac{1}{2})}{\gamma} - \frac{(\ell + \frac{1}{2})^2}{\gamma^2} + 3 \frac{(n_r + \frac{1}{2})^2}{\gamma^2} \right].$$

È chiaro che questa approssimazione ha senso solo per piccoli valori dei numeri quantici, altrimenti i termini trascurati diventano importanti perché dipendono da potenze di n_r e ℓ . I tre termini possono essere interpretati:

- a) il primo termine costante è legato al valore del minimo del potenziale. Infatti V nel punto di minimo $r = a$ vale $-D$;
- b) il secondo termine è un termine vibrazionale di pulsazione

$$\omega = \sqrt{\frac{2D}{ma^2}}$$

legato al fatto che intorno al minimo il potenziale è approssimabile con un oscillatore armonico;

- c) il terzo e il quarto termine rappresentano l'energia rotazionale proporzionale a

$$\frac{D}{\gamma^2} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} = \frac{\hbar^2}{2I} \text{ dove } I \text{ è il momento d'inerzia del sistema.}$$



4

Spin

4.1 Valore di attesa dello spin totale

Si consideri un sistema di due elettroni in uno stato i cui gli spin hanno componenti z opposte.

Si calcoli il valore di attesa di S^2 , dove $\mathbf{S}$ è lo spin totale, in questo stato.

Soluzione

Supponiamo che il sistema sia nello stato

$$|S_{1,z}, S_{2,z}\rangle = |+, -\rangle.$$

Questo stato contribuisce a due diversi autostati dello spin totale:

$$\begin{aligned} |s=0, m=0\rangle &= \frac{1}{2} (|+, -\rangle - |-, +\rangle) \\ |s=1, m=0\rangle &= \frac{1}{2} (|+, -\rangle + |-, +\rangle) \end{aligned}$$

dove abbiamo indicato con s il numero quantico di S^2 e con m il numero quantico di S_z . Risulta, quindi,

$$|+, -\rangle = \frac{1}{2} (|s=0, m=0\rangle + |s=1, m=0\rangle).$$

Il valore di attesa di S^2 si ottiene dalla media dei valori relativi a ciascun autostato pesata con il modulo quadro dei loro coefficienti.

$$\langle S^2 \rangle = \left| \frac{1}{2} \right|^2 0(0+1)\hbar^2 + \left| \frac{1}{2} \right|^2 1(1+1)\hbar^2 = \hbar^2.$$

4.2 Autostati di una componente dello Spin I

La funzione di spin di una particella di spin $\frac{1}{2}$ ha la seguente forma nella rappresentazione in cui S_z è diagonale

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\alpha} \cos \delta \\ e^{i\beta} \sin \delta \end{pmatrix}.$$

Esiste una direzione $\hat{n}$ dello spazio tale che il risultato della misura della componente dello spin lungo $\hat{n}$ possa essere previsto con certezza?

Soluzione

Notiamo che lo stato è già normalizzato. Dette ϑ e φ le coordinate sferiche angolari che individuano la direzione $\hat{n}$, tale stato deve essere, nella rappresentazione comune ad S^2 ed S_z , autostato della matrice:

$$\begin{aligned} \mathbf{S} \cdot \hat{n} &= \frac{\hbar}{2} \left[\sin \vartheta \cos \varphi \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \sin \vartheta \sin \varphi \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \cos \vartheta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right] = \\ &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \vartheta & \sin \vartheta e^{-i\varphi} \\ \sin \vartheta e^{i\varphi} & -\cos \vartheta \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Gli autovalori di $\mathbf{S} \cdot \hat{n}$, per l'isotropia dello spazio, sono $\pm \frac{\hbar}{2}$, mentre gli autovettori sono:

$$\left| \mathbf{S} \cdot \hat{n} = +\frac{\hbar}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\vartheta}{2} \\ \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix} \quad \left| \mathbf{S} \cdot \hat{n} = -\frac{\hbar}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} \sin \frac{\vartheta}{2} \\ -\cos \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix}$$

La funzione di spin assegnata deve potersi identificare, a meno di un fattore di fase arbitrario, con uno di questi autostati. Abbiamo, quindi, due possibilità

1. $\varphi = \beta - \alpha$, $\delta = \frac{\vartheta}{2}$;
2. $\varphi = \beta - \alpha$, $\delta = \frac{\vartheta + \pi}{2}$.

4.3 Autostati di una componente dello Spin II

Se una particella di spin $\frac{1}{2}$ si trova nello stato con $S_z = \frac{\hbar}{2}$, qual è la probabilità che misurando la componente dello spin lungo la direzione $\hat{n}$ individuata dalle coordinate sferiche angolari ϑ e φ si trovi $\pm \frac{\hbar}{2}$?

Soluzione

Come abbiamo visto nel problema 4.2, gli autovettori di $\mathbf{S} \cdot \hat{n}$ sono:

$$\begin{aligned} \left| \mathbf{S} \cdot \hat{n} = +\frac{\hbar}{2} \right\rangle &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\vartheta}{2} \\ \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix} = \cos \frac{\vartheta}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \left| \mathbf{S} \cdot \hat{n} = -\frac{\hbar}{2} \right\rangle &= \begin{pmatrix} \sin \frac{\vartheta}{2} \\ -\cos \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix} = \sin \frac{\vartheta}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \cos \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Possiamo quindi scrivere che lo stato del sistema prima della misura è dato da

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \cos \frac{\vartheta}{2} \left| \mathbf{S} \cdot \hat{n} = +\frac{\hbar}{2} \right\rangle - \sin \frac{\vartheta}{2} \left| \mathbf{S} \cdot \hat{n} = -\frac{\hbar}{2} \right\rangle$$

per cui le probabilità richieste sono

$$P\left(\mathbf{S} \cdot \hat{n} = +\frac{\hbar}{2}\right) = \cos^2 \frac{\vartheta}{2} \quad \text{e} \quad P\left(\mathbf{S} \cdot \hat{n} = -\frac{\hbar}{2}\right) = \sin^2 \frac{\vartheta}{2}.$$

4.4 Determinazione dello stato di spin I

Un elettrone ha uguale probabilità di avere il proprio spin orientato parallelamente o antiparallelamente all'asse z . Determinare il suo stato quando il valore di attesa di S_x è massimo.

Soluzione

Nella rappresentazione in cui S_z è diagonale, lo stato dell'elettrone è dato da

$$\psi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}.$$

Imponendo la condizione data dal problema e la normalizzazione dello stato, otteniamo che i coefficienti a e b hanno lo stesso modulo, per cui, tenendo conto dell'arbitrarietà della fase complessiva,

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad \text{e} \quad b = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\alpha}$$

e

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\alpha} \end{pmatrix}.$$

Calcoliamo il valore di attesa di S_x

$$\begin{aligned} \langle S_x \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \ e^{-i\alpha}) \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\alpha} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{4} (1 \ e^{-i\alpha}) \begin{pmatrix} e^{i\alpha} \\ 1 \end{pmatrix} = \\ &= \frac{\hbar}{4} (e^{i\alpha} + e^{-i\alpha}) = \frac{\hbar}{2} \cos \alpha \end{aligned}$$

che ha $\frac{\hbar}{2}$ quale massimo valore per $\alpha = 0$, per cui deve essere

$$a = b.$$

Notiamo che il massimo valore di $\langle S_x \rangle$ trovato è pari al suo autovalore massimo; difatti lo stato trovato è l'autostato di S_x corrispondente a questo autovalore.

4.5 Determinazione dello stato di spin II

Un elettrone si trova in una sovrapposizione di autostati di S_z :

$$|\psi\rangle = a|+\rangle + b|-\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

determinare le costanti a e b in modo che i valori di attesa di S_z e di S_y siano rispettivamente 0 e $\frac{\hbar}{2}$.

Soluzione

Nella rappresentazione in cui S_z è diagonale lo stato dell'elettrone è dato da

$$\psi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}.$$

In questo stato i valori di attesa di S_z e di S_y sono dati da

$$\begin{aligned} \langle S_z \rangle &= \frac{\hbar}{2} (a^* \ b^*) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} (|a|^2 - |b|^2) \\ \langle S_y \rangle &= \frac{\hbar}{2} (a^* \ b^*) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} i(a^*b - ab^*) = -\frac{\hbar}{2} 2\Im(ab^*). \end{aligned}$$

Dalla condizione $\langle S_z \rangle = 0$ e dalla condizione di normalizzazione otteniamo che i coefficienti a e b sono uguali in modulo e, ponendo uguale a 0 la fase di a abbiamo

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad \text{e} \quad b = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\alpha}.$$

La fase α è determinata dalla condizione $\langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{2}$:

$$-2\Im(ab^*) = 1 \quad \Rightarrow \quad \sin \alpha = 1 \quad \Rightarrow \quad \alpha = \frac{\pi}{2}.$$

In definitiva:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + i|-\rangle).$$

4.6 Determinazione dello stato di spin III

Una particella di spin $\frac{1}{2}$ si trova in uno stato in cui il valor di attesa di S_x è $\frac{\hbar}{2}\alpha$ e quello di S_y è $\frac{\hbar}{2}\beta$ con α e β compresi tra -1 e 1 .

Mostrare che deve valere la condizione $\alpha^2 + \beta^2 \leq 1$, e che per $\alpha^2 + \beta^2 \leq 1$ il problema ammette due soluzioni, mentre per $\alpha^2 + \beta^2 = 1$ la soluzione è unica. In quest'ultimo caso calcolare la probabilità di trovare lo spin della particella orientato parallelamente o antiparallelamente rispetto all'asse z .

Soluzione

Detti $|\psi\rangle$ lo stato in esame e $|\pm\rangle$ gli autostati di S_z relativi agli autovalori $\pm\hbar/2$, abbiamo

$$|\psi\rangle = a|+\rangle + b|-\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

dove a e b sono due costanti da determinare. In questo stato i valori medi di S_x e di S_y sono

$$\begin{aligned} \langle S_x \rangle &= \frac{\hbar}{2} (a^* \ b^*) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} (a^* b + ab^*) \\ \langle S_y \rangle &= \frac{\hbar}{2} (a^* \ b^*) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} i(a^* b - ab^*). \end{aligned}$$

Possiamo scegliere liberamente le fasi di a e b in modo che

$$a > 0 \quad b = |b| e^{i\vartheta}.$$

Dalla condizione di normalizzazione

$$|a|^2 + |b|^2 = 1 \Rightarrow |b|^2 = 1 - a^2 \Rightarrow b = \sqrt{1 - a^2} e^{i\vartheta}.$$

Le relazioni per i valori medi diventano:

$$\begin{aligned} \frac{2}{\hbar} \langle S_x \rangle &= a 2\Re(b) = 2a\sqrt{1 - a^2} \cos \vartheta \\ \frac{2}{\hbar} \langle S_y \rangle &= -ia 2i\Im(b) = 2a\sqrt{1 - a^2} \sin \vartheta \end{aligned}$$

e, per le condizioni imposte dal problema,

$$\alpha^2 + \beta^2 = \frac{4}{\hbar^2} (\langle S_x \rangle^2 + \langle S_y \rangle^2) = 4a^2(1 - a^2) \quad \text{con } a^2 \leq 1.$$

Il lato destro di questa equazione rappresenta, nella variabile a^2 , una parabola con concavità rivolta verso il basso, simmetrica rispetto all'asse $a^2 = 1/2$, che assume il suo massimo valore in $a^2 = 1/2$, per cui

$$\alpha^2 + \beta^2 \leq 4a^2(1 - a^2)|_{a^2=1/2} = 1.$$

Ogni altro valore di $\alpha^2 + \beta^2 < 1$ corrisponde a due valori di a^2 simmetrici rispetto ad $a^2 = 1/2$.

Nel caso $\alpha^2 + \beta^2 = 1$ abbiamo $a = 1/\sqrt{2} = |b|$, quindi

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\vartheta}|-\rangle.$$

Quindi le probabilità richieste sono entrambi uguali a $1/2$.

4.7 Misure in apparato Stern-Gerlach

Un fascio di atomi di spin $\frac{1}{2}$ che si muove nella direzione dell'asse y viene sottoposto ad una serie di misure da parte di apparati del tipo Stern-Gerlach nel modo seguente:

- La prima misura accetta gli atomi con $s_z = \frac{\hbar}{2}$ e rigetta gli atomi con $s_z = -\frac{\hbar}{2}$.
- La seconda misura accetta gli atomi con $s_n = \frac{\hbar}{2}$ e rigetta gli atomi con $s_n = -\frac{\hbar}{2}$, dove s_n è l'autovalore dell'operatore $\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}$ e $\hat{\mathbf{n}}$ versore disposto nel piano xz ad un angolo ϑ rispetto all'asse z .
- La terza misura accetta gli atomi con $s_z = -\frac{\hbar}{2}$ e rigetta gli atomi con $s_z = \frac{\hbar}{2}$. Qual è l'intensità del fascio finale rispetto a quella del fascio che sopravvive alla prima misura? Come bisogna orientare la direzione $\hat{\mathbf{n}}$ del secondo apparato se si vuole ottenere la massima intensità finale possibile?

Soluzione

Dopo il passaggio nel primo apparato gli atomi sono descritti da un autostato di S_z corrispondente all'autovalore $+\hbar/2$. Utilizzando i risultati dell'esercizio (4.2) tale stato si può scrivere come sovrapposizione di autostati di $\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}$ nella forma

$$\left| S_z = +\frac{\hbar}{2} \right\rangle = c_+ \left| \mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}} = +\frac{\hbar}{2} \right\rangle + c_- \left| \mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}} = -\frac{\hbar}{2} \right\rangle,$$

dove

$$c_+ = \left\langle \mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}} = +\frac{\hbar}{2} \left| S_z = +\frac{\hbar}{2} \right\rangle = \left(\cos \frac{\vartheta}{2} \sin \frac{\vartheta}{2} \right) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \cos \frac{\vartheta}{2}$$

$$c_- = \left\langle \mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}} = -\frac{\hbar}{2} \left| S_z = +\frac{\hbar}{2} \right\rangle = \left(\sin \frac{\vartheta}{2} - \cos \frac{\vartheta}{2} \right) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \sin \frac{\vartheta}{2}.$$

Dopo la seconda misura l'intensità del fascio si sarà ridotta quindi di un fattore $\cos^2 \frac{\vartheta}{2}$, mentre lo stato di ciascun atomo è

$$\left| \mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}} = +\frac{\hbar}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\vartheta}{2} \\ \sin \frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix} = \cos \frac{\vartheta}{2} \left| S_z = +\frac{\hbar}{2} \right\rangle + \sin \frac{\vartheta}{2} \left| S_z = -\frac{\hbar}{2} \right\rangle.$$

La terza misura riduce ulteriormente l'intensità del fascio di un fattore $\sin^2 \frac{\vartheta}{2}$, per cui complessivamente si il rapporto tra l'intensità del fascio finale e quella del fascio che sopravvive alla prima misura è dato da

$$\cos^2 \frac{\vartheta}{2} \sin^2 \frac{\vartheta}{2} = \frac{1}{4} \sin^2 \vartheta.$$

Tale rapporto è massimo per ϑ uguale a $\pi/2$ oppure a $3\pi/2$.

4.8 Autostati di un sistema di fermioni interagenti

Un sistema di tre particelle diverse di spin $\frac{1}{2}$ ha come Hamiltoniano

$$H = V(\sigma_1 \cdot \sigma_2 + \sigma_2 \cdot \sigma_3 + \sigma_3 \cdot \sigma_1),$$

dove V è una costante.

Si determinino gli autovalori di H , la loro degenerazione e i relativi autostati.

Soluzione

Detto $\mathbf{J}$ lo spin totale del sistema ed j il numero quantico relativo, abbiamo

$$\mathcal{H} = V \frac{1}{2} \frac{4}{\hbar^2} [(\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3)^2 - \mathbf{S}_1^2 - \mathbf{S}_2^2 - \mathbf{S}_3^2] = \frac{2V}{\hbar^2} \left[J^2 - \frac{9}{4} \hbar^2 \right].$$

Ricordiamo che nel caso di due particelle di spin $1/2$, se indichiamo con $|j, j_z\rangle$ l'autostato dello spin totale e con $|\pm, \pm\rangle$ gli autostati degli spin delle singole particelle, abbiamo i seguenti possibili stati:

$$j_{12} = 0 \quad |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+, -\rangle - |-, +\rangle)$$

$$j_{12} = 1 \quad \begin{cases} |1, +1\rangle = |+, +\rangle \\ |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+, -\rangle + |-, +\rangle) \\ |1, -1\rangle = |-, -\rangle. \end{cases}$$

Combinando una coppia di particelle con $j_{12} = 0$ con la terza particella di spin $1/2$ si hanno due stati con $j = 1/2$:

$$j_{123} = \frac{1}{2} \quad \begin{cases} |\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+, -, +\rangle - |-, +, +\rangle) \\ |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+, -, -\rangle - |-, +, -\rangle). \end{cases}$$

Utilizziamo i coefficienti di Clebsh-Gordan e combiniamo ora la terza particella di spin $1/2$ con una coppia di particelle con $j_{12} = 1$. Si hanno quattro stati con $j = 3/2$:

$$j_{123} = \frac{3}{2} \quad \begin{cases} \left| \frac{3}{2}, +\frac{3}{2} \right\rangle = |m_{12} = +1, m_3 = +1/2\rangle = |+, +, +\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} |m_{12} = +1, m_3 = -1/2\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |m_{12} = 0, m_3 = +1/2\rangle = \\ = \sqrt{\frac{1}{3}} (|+, +, -\rangle + |+, -, +\rangle + |-, +, +\rangle) \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} |m_{12} = -1, m_3 = +1/2\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |m_{12} = 0, m_3 = -1/2\rangle = \\ = \sqrt{\frac{1}{3}} (|-, -, +\rangle + |+, -, -\rangle + |-, +, -\rangle) \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle = |m_{12} = -1, m_3 = -1/2\rangle = |-, -, -\rangle \end{cases}$$

e due stati con $j = 1/2$:

$$j_{123} = \frac{1}{2} \begin{cases} \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |m_{12} = +1, m_3 = -1/2\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} |m_{12} = 0, m_3 = +1/2\rangle = \\ \quad = \sqrt{\frac{2}{3}} |+, +, -\rangle - \sqrt{\frac{1}{6}} |+, -, +\rangle - \sqrt{\frac{1}{6}} |-, +, +\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} |m_{12} = 0, m_3 = -1/2\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} |m_{12} = -1, m_3 = +1/2\rangle = \\ \quad = \sqrt{\frac{1}{6}} |+, -, -\rangle + \sqrt{\frac{1}{6}} |-, +, -\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} |-, -, +\rangle. \end{cases}$$

Notiamo che abbiamo determinato quattro stati con $j = 1/2$, invece di due. Questo può sembrare sbagliato dato che la degenerazione di $j = 1/2$ dovrebbe essere 2. Tuttavia si può verificare facilmente che gli stati ottenuti dal prodotto tensoriale $j_{12} \otimes j_3 = 0 \otimes \frac{1}{2}$ sono perpendicolari a quelli ottenuti da $j_{12} \otimes j_3 = 1 \otimes \frac{1}{2}$. Ad esempio

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle +, -, + | - \langle -, +, + |) \left(\sqrt{\frac{2}{3}} |+, +, -\rangle - \sqrt{\frac{1}{6}} |+, -, +\rangle - \sqrt{\frac{1}{6}} |-, +, +\rangle \right) = \\ = \frac{1}{2\sqrt{3}} (1 - 1) = 0. \end{aligned}$$

Del resto gli stati indipendenti devono essere 8 dato che siamo partiti da uno spazio vettoriale di dimensione 8 ($j_1 \otimes j_2 \otimes j_3 = \frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2}$).

In definitiva gli autovalori dell'Hamiltoniano sono:

$$j_{123} = \frac{1}{2} \quad E_0 = \frac{2V}{\hbar^2} \left[\frac{3}{4} \hbar^2 - \frac{9}{4} \hbar^2 \right] = -3V \text{ con degenerazione } 4$$

$$j_{123} = \frac{3}{2} \quad E_1 = \frac{2V}{\hbar^2} \left[\frac{15}{4} \hbar^2 - \frac{9}{4} \hbar^2 \right] = +3V \text{ con degenerazione } 4.$$

4.9 Misure di spin su un fermione

Si consideri una particella di spin $\frac{1}{2}$ della quale si misura la somma delle componenti x ed z dello spin $S_x + S_z$. Quali sono i possibili risultati della misura? Se successivamente si misura S_y , qual è la probabilità di trovare il valore $+\frac{\hbar}{2}$?

Soluzione

Osserviamo che

$$S_x + S_z = \sqrt{2} \mathbf{S} \cdot \mathbf{n}$$

dove $\mathbf{n}$ è il versore nella direzione della bisettrice del piano xz ($\vartheta = \pi/4, \varphi = 0$). Poiché, come si è visto nel problema 4.2, gli autovalori di $\mathbf{S} \cdot \mathbf{n}$ sono $\pm \hbar/2$ per qualsiasi $\mathbf{n}$, i possibili risultati della misura sono $\pm \hbar/\sqrt{2}$. Dopo la misura lo spin della

particella si troverà nel piano xz , quindi la probabilità di trovare uno qualsiasi dei due possibili autovalori di S_y sarà uguale ad $1/2$. Infatti, come abbiamo visto in generale nel problema 3.4, in un autostato di una componente del momento angolare le componenti perpendicolari ad essa hanno valore di attesa nullo. Dal fatto che gli autovalori di S_y , come di qualsiasi componente dello spin, sono opposti, segue che le probabilità relative alle due misure sono uguali.

5

Evoluzione temporale

5.1 Sistema a due livelli (I)

L'Hamiltoniano di un sistema quantistico a due livelli può essere scritto come

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}\hbar\omega(|0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|)$$

dove $|0\rangle$ e $|1\rangle$ sono gli autoket ortonormali appartenenti agli autovalori $-\hbar\omega/2$ e $+\hbar\omega/2$ rispettivamente. Si considerino l'operatore lineare $a = |0\rangle\langle 1|$ ed il suo coniugato hermitiano $a^\dagger$.

a) Dimostrare che valgono le seguenti relazioni:

$$\{a, a^\dagger\} = aa^\dagger + a^\dagger a = 1 \quad ; \quad a^2 = a^{\dagger 2} = 0$$

$$[\mathcal{H}, a] = -\hbar\omega a \quad ; \quad [\mathcal{H}, a^\dagger] = +\hbar\omega a^\dagger$$

e che l'operatore $N = aa^\dagger$ ha autovalori 0 ed 1 e che i suoi autoket sono i ket di base. Esprimere l'Hamiltoniano in termini di N e dell'identità I .

- b) Supponendo che il sistema si trovi all'istante iniziale $t = 0$ nell'autostato dell'operatore hermitiano $A = a + a^\dagger$ corrispondente all'autovalore 1, determinare i valori di aspettazione di A e di A^2 e l'indeterminazione $\langle(\Delta A)^2\rangle$ in funzione del tempo t .
- c) Detto $B = -i(a - a^\dagger)$ un altro operatore hermitiano, determinare anche $\langle B \rangle$, $\langle B^2 \rangle$ e $\langle(\Delta B)^2\rangle$ in funzione del tempo. Verificare la relazione di indeterminazione fra A e B .

Soluzione

a) Dall'equazione agli autovalori per $\mathcal{H}$ si ha

$$\mathcal{H}|0\rangle = -\frac{\hbar\omega}{2}|0\rangle \quad \mathcal{H}|1\rangle = +\frac{\hbar\omega}{2}|1\rangle.$$

Tenendo conto del fatto che gli stati $|0\rangle$ e $|1\rangle$ sono un set ortonormale,

$$\begin{aligned} a &= |0\rangle\langle 1| & a^\dagger &= |1\rangle\langle 0| \\ \{a, a^\dagger\} &= aa^\dagger + a^\dagger a = |0\rangle\langle 1|1\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 0|0\rangle\langle 1| = |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| = 1 \\ a^2 &= |0\rangle\langle 1|0\rangle\langle 1| = 0 \\ a^{\dagger 2} &= |1\rangle\langle 0|1\rangle\langle 0| = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [\mathcal{H}, a] &= -\frac{1}{2}\hbar\omega(|0\rangle\langle 0|0\rangle\langle 1| - |1\rangle\langle 1|0\rangle\langle 1| - |0\rangle\langle 1|0\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1|1\rangle\langle 1|) = \\ &= -\hbar\omega|0\rangle\langle 1| = -\hbar\omega a \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [\mathcal{H}, a^\dagger] &= -\frac{1}{2}\hbar\omega(|0\rangle\langle 0|1\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|1\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 0|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 0|1\rangle\langle 1|) = \\ &= \hbar\omega|1\rangle\langle 0| = \hbar\omega a^\dagger \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} N &= aa^\dagger = |0\rangle\langle 1|1\rangle\langle 0| = |0\rangle\langle 0| \\ N|0\rangle &= |0\rangle\langle 0|0\rangle = |0\rangle \Rightarrow |0\rangle \text{ autoket con autovalore } 1 \\ N|1\rangle &= |0\rangle\langle 0|1\rangle = 0 = 0|1\rangle \Rightarrow |1\rangle \text{ autoket con autovalore } 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= -\frac{1}{2}\hbar\omega(|0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1| + |0\rangle\langle 0| - |0\rangle\langle 0|) = -\frac{1}{2}\hbar\omega(2N - I) = \\ &= \hbar\omega\left(\frac{I}{2} - N\right). \end{aligned}$$

b) Consideriamo lo stato

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle).$$

$|\psi\rangle$ è autoket di A corrispondente all'autovalore 1. Infatti

$$A|\psi\rangle = (|0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|)\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |0\rangle + |1\rangle + |1\rangle) = 1 \cdot |\psi\rangle.$$

Al tempo t lo stato $|\psi\rangle$ sarà dato da

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{i\frac{\omega}{2}t}|0\rangle + e^{-i\frac{\omega}{2}t}|1\rangle\right).$$

Notiamo che

$$\begin{aligned} [\mathcal{H}, A] &= [\mathcal{H}, a] + [\mathcal{H}, a^\dagger] = -\hbar\omega(a - a^\dagger) = -i\hbar\omega B \neq 0 \\ [\mathcal{H}, B] &= -i([\mathcal{H}, a] - [\mathcal{H}, a^\dagger]) = i\hbar\omega(a + a^\dagger) = i\hbar\omega A \neq 0. \end{aligned}$$

A e B non commutano con $\mathcal{H}$, quindi i valori di attesa di tali grandezze dipendono dal tempo.

Infatti

$$\begin{aligned}
 \langle A \rangle_\psi &= \frac{1}{2} \left(\langle 0 | e^{-i\frac{\omega}{2}t} + \langle 1 | e^{i\frac{\omega}{2}t} \right) (a + a^\dagger) \left(e^{i\frac{\omega}{2}t} | 0 \rangle + e^{-i\frac{\omega}{2}t} | 1 \rangle \right) = \\
 &= \frac{1}{2} \left(\langle 0 | e^{-i\frac{\omega}{2}t} + \langle 1 | e^{i\frac{\omega}{2}t} \right) \left(e^{i\frac{\omega}{2}t} | 1 \rangle + e^{-i\frac{\omega}{2}t} | 0 \rangle \right) = \\
 &= \frac{1}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) = \cos \omega t \\
 \langle A^2 \rangle_\psi &= \langle (a + a^\dagger)(a + a^\dagger) \rangle_\psi = \langle aa^\dagger + a^\dagger a \rangle_\psi = \\
 &= \langle \{a, a^\dagger\} \rangle_\psi = \langle I \rangle_\psi = 1 \\
 \langle (\Delta A)^2 \rangle_\psi &= \langle A^2 \rangle_\psi - \langle A \rangle_\psi^2 = 1 - \cos^2 \omega t = \sin^2 \omega t.
 \end{aligned}$$

c) In maniera analoga, si ottengono per B le seguenti relazioni:

$$\begin{aligned}
 \langle B \rangle_\psi &= -i\frac{1}{2} \left(\langle 0 | e^{-i\frac{\omega}{2}t} + \langle 1 | e^{i\frac{\omega}{2}t} \right) (a - a^\dagger) \left(e^{i\frac{\omega}{2}t} | 0 \rangle + e^{-i\frac{\omega}{2}t} | 1 \rangle \right) = \\
 &= -i\frac{1}{2} \left(\langle 0 | e^{-i\frac{\omega}{2}t} + \langle 1 | e^{i\frac{\omega}{2}t} \right) \left(e^{-i\frac{\omega}{2}t} | 0 \rangle - e^{+i\frac{\omega}{2}t} | 1 \rangle \right) = \\
 &= -i\frac{1}{2} (e^{-i\omega t} - e^{i\omega t}) = -\sin \omega t \\
 \langle B^2 \rangle_\psi &= \langle i^2 (a - a^\dagger)(a - a^\dagger) \rangle_\psi = -\langle -aa^\dagger - a^\dagger a \rangle_\psi = \\
 &= \langle \{a, a^\dagger\} \rangle_\psi = \langle I \rangle_\psi = 1 \\
 \langle (\Delta B)^2 \rangle_\psi &= \langle B^2 \rangle_\psi - \langle B \rangle_\psi^2 = 1 - \sin^2 \omega t = \cos^2 \omega t.
 \end{aligned}$$

Per quanto riguarda la relazione di indeterminazione tra A e B abbiamo:

$$\Delta A \cdot \Delta B = |\sin \omega t| \cdot |\cos \omega t|.$$

Ricordiamo che, per ogni stato, deve valere

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|.$$

Verifichiamone la validità anche in questo caso:

$$\begin{aligned}
 [A, B] &= -i[a + a^\dagger, a - a^\dagger] = \\
 &= -i([a, a] + [a^\dagger, a] - [a, a^\dagger] - [a^\dagger, a^\dagger]) = \\
 &= -i(a^\dagger a - aa^\dagger - aa^\dagger + a^\dagger a) = \\
 &= 2i(aa^\dagger - a^\dagger a) = 2i(|0\rangle\langle 1|1\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 0|0\rangle\langle 1|) = \\
 &= 2i(|0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|) = -\frac{4i}{\hbar\omega} \mathcal{H} \\
 \langle [A, B] \rangle_\psi &= -\frac{4i}{\hbar\omega} \frac{1}{2} \left(\langle 0 | e^{-i\frac{\omega}{2}t} + \langle 1 | e^{i\frac{\omega}{2}t} \right) \mathcal{H} \left(e^{i\frac{\omega}{2}t} | 0 \rangle + e^{-i\frac{\omega}{2}t} | 1 \rangle \right) = \\
 &= -i \left(\langle 0 | e^{-i\frac{\omega}{2}t} + \langle 1 | e^{i\frac{\omega}{2}t} \right) \left(-e^{i\frac{\omega}{2}t} | 0 \rangle + e^{-i\frac{\omega}{2}t} | 1 \rangle \right) = \\
 &= -i(-1 + 1) = 0.
 \end{aligned}$$

Il principio d'indeterminazione è verificato in quanto

$$|\sin \omega t| \cdot |\cos \omega t| \geq 0.$$

5.2 Sistema a due livelli (II)

Si consideri un sistema a due stati descritto dall'operatore Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = E_0|1\rangle\langle 1| + \sqrt{2}E_0|1\rangle\langle 2| + \sqrt{2}E_0|2\rangle\langle 1|.$$

Se il sistema si trova inizialmente nello stato $|1\rangle$ con quale probabilità si troverà nello stato $|2\rangle$ al tempo t ? Determinare il periodo delle oscillazioni tra gli stati $|1\rangle$ e $|2\rangle$.

Soluzione

Nella rappresentazione della base $|1\rangle, |2\rangle$ l'Hamiltoniano diventa la matrice:

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} E_0 & \sqrt{2}E_0 \\ \sqrt{2}E_0 & 0 \end{pmatrix} = E_0\mathcal{H}' \quad \text{dove} \quad \mathcal{H}' = \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}.$$

Dall'equazione secolare ricaviamo gli autovalori di $\mathcal{H}'$:

$$\det(\mathcal{H}' - \lambda I) = \lambda^2 - \lambda - 2 = 0 \quad \Rightarrow \quad \lambda = -1, 2.$$

A $\lambda = -1$ corrisponde l'autovalore $E_1 = -E_0$ di $\mathcal{H}$ e l'autostato $|E_1\rangle$ dato da:

$$\begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = -1 \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

da cui si ottiene, previa normalizzazione:

$$|E_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{3}}|1\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}|2\rangle.$$

Analogamente a $\lambda = 2$ corrisponde l'autovalore $E_2 = 2E_0$ di $\mathcal{H}$ e l'autostato $|E_2\rangle$ dato da:

$$|E_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{2}{3}}|1\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|2\rangle.$$

Invertendo le relazioni ottenute abbiamo

$$\begin{aligned} |1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}|E_1\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|E_2\rangle \\ |2\rangle &= -\sqrt{\frac{2}{3}}|E_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|E_2\rangle. \end{aligned}$$

Inizialmente il sistema è nello stato

$$|\psi(t=0)\rangle = |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|E_1\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|E_2\rangle$$

mentre all'istante t sarà nello stato

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}e^{i\frac{E_0t}{\hbar}}|E_1\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}e^{-i\frac{2E_0t}{\hbar}}|E_2\rangle = \\ &= \frac{1}{3}e^{i\frac{E_0t}{\hbar}} \left[\left(1 + 2e^{-i\frac{3E_0t}{\hbar}}\right)|1\rangle - \sqrt{2}\left(1 - e^{-i\frac{3E_0t}{\hbar}}\right)|2\rangle \right]. \end{aligned}$$

Le probabilità di trovare al tempo t il sistema in uno dei vettori di base sono

$$P_{|1\rangle}(t) = \frac{1}{9} \left| 1 + 2e^{-i\frac{3E_0 t}{\hbar}} \right|^2 = \frac{1}{9} \left(5 + 4 \cos \frac{3E_0 t}{\hbar} \right)$$

$$P_{|2\rangle}(t) = \frac{2}{9} \left| 1 - e^{-i\frac{3E_0 t}{\hbar}} \right|^2 = \frac{4}{9} \left(1 - \cos \frac{3E_0 t}{\hbar} \right).$$

Le probabilità oscillano con frequenza $\omega = 3E_0/\hbar$. Il periodo richiesto è quindi

$$T = \frac{2\pi}{\omega} = \frac{2\pi\hbar}{3E_0} = \frac{h}{3E_0}.$$

5.3 Sistema a due livelli (III)

Si consideri un sistema a due livelli e si consideri la base composta dai due autoket $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$ dell'Hamiltoniano H_0 , corrispondenti agli autovalori E_1 ed E_2 , rispettivamente,

$$\mathcal{H}_0|\psi_1\rangle = E_1|\psi_1\rangle \quad (5.1)$$

$$\mathcal{H}_0|\psi_2\rangle = E_2|\psi_2\rangle$$

$$\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{i,j} \quad i, j = 1, 2.$$

Si consideri quindi un nuovo sistema con Hamiltoniano $\mathcal{H}_0 + W$, dove il termine di accoppiamento W , nella base $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle\}$, è dato dalla matrice 2x2 W_{ij} con $W_{11} = W_{22} = 0$ e $W_{12} = W_{21} = w$ dove w è una costante reale positiva.

- Determinare come variano le autofunzioni e gli autovalori del sistema per effetto dell'accoppiamento.
- Se all'istante $t = 0$ il sistema, in presenza dell'accoppiamento, si trova con certezza nello stato $|\psi_1\rangle$, in quali istanti (se esistono) il sistema si troverà di nuovo nella stessa condizione?
- Calcolare la probabilità di trovare il sistema nello stato $|\psi_2\rangle$ al tempo t .

Soluzione

- Nella rappresentazione relativa ai vettori di base $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$ abbiamo

$$\mathcal{H}_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} \quad W = \begin{pmatrix} 0 & w \\ w & 0 \end{pmatrix} \quad \mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + W = \begin{pmatrix} E_1 & w \\ w & E_2 \end{pmatrix},$$

dove, per non appesantire la notazione, abbiamo indicato con gli stessi simboli degli operatori e dei ket le matrici ad essi corrispondenti. Gli autovalori di $\mathcal{H}$ si ricavano da $(E_1 - \lambda)(E_2 - \lambda) - w^2 = 0$:

$$\lambda_{\pm} = \frac{E_1 + E_2 \pm \sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4w^2}}{2}.$$

Gli autovettori $|\lambda_{\pm}\rangle$ si ricavano dalle equazioni

$$\mathcal{H}|\lambda_{\pm}\rangle = \lambda_{\pm}|\lambda_{\pm}\rangle.$$

Imponendo la normalizzazione. Si trova facilmente, scegliendo opportunamente le fasi,

$$\begin{aligned} |\lambda_{+}\rangle &\equiv \begin{pmatrix} \langle \psi_1 | \lambda_{+} \rangle \\ \langle \psi_2 | \lambda_{+} \rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{(\lambda_{+} - E_1)^2 + w^2}} \begin{pmatrix} w \\ \lambda_{+} - E_1 \end{pmatrix} \\ |\lambda_{-}\rangle &\equiv \begin{pmatrix} \langle \psi_1 | \lambda_{-} \rangle \\ \langle \psi_2 | \lambda_{-} \rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{(\lambda_{-} - E_1)^2 + w^2}} \begin{pmatrix} w \\ \lambda_{-} - E_1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

- b) Il sistema si troverà con certezza nello stato $|\psi_1\rangle$ quando la probabilità di trovarlo nello stato $|\psi_2\rangle$ è nulla. Questo ci rinvia al quesito successivo.
c) Lo stato al tempo $t > 0$ è

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-i\frac{\mathcal{H}t}{\hbar}} |\psi_1\rangle = \\ &= e^{-i\frac{\lambda_{+}t}{\hbar}} |\lambda_{+}\rangle \langle \lambda_{+} | \psi_1 \rangle + e^{-i\frac{\lambda_{-}t}{\hbar}} |\lambda_{-}\rangle \langle \lambda_{-} | \psi_1 \rangle = \\ &= e^{-i\frac{\lambda_{+}t}{\hbar}} \frac{w}{(\lambda_{+} - E_1)^2 + w^2} \begin{pmatrix} w \\ \lambda_{+} - E_1 \end{pmatrix} + \\ &\quad + e^{-i\frac{\lambda_{-}t}{\hbar}} \frac{w}{(\lambda_{-} - E_1)^2 + w^2} \begin{pmatrix} w \\ \lambda_{-} - E_1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Introducendo le grandezze

$$\Delta = \frac{E_2 - E_1}{2} \quad \Sigma = \frac{E_2 + E_1}{2} \quad \text{e} \quad \alpha = \sqrt{\Delta^2 + w^2},$$

si ottiene

$$\lambda_{\pm} - E_1 = \Delta \pm \alpha \quad \text{e} \quad \lambda_{\pm} = \Sigma \pm \alpha.$$

La probabilità di trovare il sistema nello stato $|\psi_2\rangle$ al tempo t è data dal modulo quadro di $\langle \psi_2 | \psi \rangle$ che, utilizzando le nuove variabili, è dato da

$$\langle \psi_2 | \psi \rangle = w e^{-i\frac{\Sigma t}{\hbar}} (c_1 e^{-i\frac{\alpha t}{\hbar}} + c_2 e^{i\frac{\alpha t}{\hbar}}) = w e^{-i\frac{\Sigma t}{\hbar}} \left[(c_1 + c_2) \cos \frac{\alpha t}{\hbar} - i(c_1 - c_2) \sin \frac{\alpha t}{\hbar} \right]$$

dove

$$c_1 = \frac{\Delta + \alpha}{(\Delta + \alpha)^2 + w^2} \quad c_2 = \frac{\Delta - \alpha}{(\Delta - \alpha)^2 + w^2}.$$

Dopo brevi calcoli si trova

$$c_1 + c_2 = 0 \quad \text{e} \quad c_1 - c_2 = \frac{1}{\alpha},$$

e, quindi,

$$\langle \psi_2 | \psi \rangle = -i \frac{w}{\alpha} e^{-i\frac{\Sigma t}{\hbar}} \sin \frac{\alpha t}{\hbar},$$

in definitiva la risposta al quesito è

$$P(|\psi(t)\rangle = |\psi_2\rangle) = |\langle \psi_2 | \psi \rangle|^2 = \frac{w^2}{\Delta^2 + w^2} \sin^2 \frac{\alpha}{\hbar} t.$$

Questa probabilità è nulla e $|\psi(t)\rangle = |\psi_1\rangle$, come richiesto dal precedente quesito, quando

$$t = \frac{n\pi\hbar}{\alpha} \quad \text{con } n = 0, 1, 2, \dots$$

5.4 Sistema a due livelli (IV)

L'hamiltoniano di un sistema quantistico a due livelli è descritto dal seguente operatore (nelle opportune unità di misura)

$$\mathcal{H}|1\rangle = |1\rangle + \frac{1+i}{\sqrt{2}}|2\rangle, \quad \mathcal{H}|2\rangle = \frac{1-i}{\sqrt{2}}|1\rangle + |2\rangle$$

dove $|1\rangle$ e $|2\rangle$ sono gli autostati normalizzati di un altro operatore hermitiano $\mathcal{A}$:

$$\mathcal{A}|1\rangle = \sqrt{2}|1\rangle, \quad \mathcal{A}|2\rangle = -\sqrt{2}|2\rangle.$$

All'istante $t = 0$ si esegue una misura dell'osservabile associata all'operatore $\mathcal{A}$ e si trova il valore $-\sqrt{2}$.

- Immediatamente dopo si esegue una misura di energia; qual è la probabilità di trovare il sistema nello stato fondamentale?
- Come cambia questa probabilità eseguendo la misura dopo un intervallo finito T ?
- Se non viene fatta alcuna misura di energia, in quali istanti successivi il sistema si troverà con certezza nello stato $|2\rangle$?

Soluzione

Nella rappresentazione data dagli autoket di $\mathcal{A}$ a $\mathcal{H}$ corrisponde la matrice con elementi $\mathcal{H}_{j,k} = \langle j|\mathcal{H}|k\rangle$ data da

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1-i}{\sqrt{2}} \\ \frac{1+i}{\sqrt{2}} & 1 \end{pmatrix}$$

i cui autovalori sono dati da $E_{\pm} = 2, 0$. Gli autovettori sono, rispettivamente,

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1+i}{2} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1+i}{2} \end{pmatrix}.$$

Possiamo quindi scrivere

$$|E_{-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle - \frac{1+i}{2}|2\rangle$$

$$|E_{+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle + \frac{1+i}{2}|2\rangle.$$

Invertendo queste espressioni troviamo

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|E_+\rangle + |E_-\rangle)$$

$$|2\rangle = \frac{1-i}{2}(|E_+\rangle - |E_-\rangle).$$

a) Al tempo $t = 0$ lo stato del sistema è

$$|\psi(0)\rangle = |2\rangle = \frac{1-i}{2}(|E_+\rangle - |E_-\rangle),$$

quindi

$$P(E = E_- = 0, t = 0) = \left| -\frac{1-i}{2} \right|^2 = \frac{1}{2}.$$

b) Al tempo $t = T$, lo stato è diventato

$$\begin{aligned} |\psi(T)\rangle &= e^{-i\frac{\mathcal{H}T}{\hbar}} |\psi(0)\rangle = \frac{1-i}{2} \left(e^{-i\frac{2T}{\hbar}} |E_+\rangle - e^{-i\frac{0T}{\hbar}} |E_-\rangle \right) = \\ &= \frac{1-i}{2} \left(e^{-i\frac{2T}{\hbar}} |E_+\rangle - |E_-\rangle \right) \end{aligned}$$

che comporta

$$P(E = E_- = 0, t = T) = \left| \frac{1-i}{2} \right|^2 = \frac{1}{2}$$

indipendente da T .

c) Perché al tempo t il sistema si trovi con certezza nello stato $|2\rangle$ deve verificarsi:

$$\frac{1-i}{2} \left(e^{-i\frac{2t}{\hbar}} |E_+\rangle - |E_-\rangle \right) = \frac{1-i}{2} (|E_+\rangle - |E_-\rangle)$$

da cui si ricava

$$\frac{2t}{\hbar} = 2n\pi \quad \Rightarrow \quad t = n\pi\hbar \quad \text{con } n = 1, 2, \dots$$

Notare che t ha le dimensioni di $\hbar$ a causa del fatto che $\mathcal{H}$ è adimensionale.

5.5 Particella su un segmento (I)

Una particella, vincolata a muoversi su un segmento di lunghezza L , all'istante $t = 0$ si trova in uno stato in cui una misura di energia può fornire, con uguale probabilità, solo due valori: il valore più basso E_1 e quello immediatamente superiore $E_2 = 4E_1$.

- Scrivere l'espressione della funzione d'onda normalizzata (contenente un parametro arbitrario).
- Determinare tale parametro sapendo che all'istante $t = 0$ il valor di attesa dell'impulso della particella è $\langle p \rangle = \frac{4}{3} \frac{\hbar}{L}$.
- Determinare qual è l'istante di tempo successivo a $t = 0$ in cui il valor di attesa dell'impulso assume per la prima volta il valore zero.

Soluzione

Per questo sistema gli autovalori e le corrispondenti autofunzioni dell'energia sono:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}, \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

a) Lo stato è sovrapposizione di $\psi_1(x)$ e di $\psi_2(x)$

$$\psi(x) = c_1 \psi_1(x) + c_2 \psi_2(x).$$

Poiché le probabilità di trovare E_1 ed E_2 sono uguali abbiamo

$$|c_1|^2 = |c_2|^2.$$

Trascurando una fase complessiva arbitraria, possiamo scrivere:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(x) + e^{i\alpha} \psi_2(x)).$$

b) Calcoliamo il valore di attesa dell'impulso. Come abbiamo visto negli esercizi (1.4) e (2.5), nel caso di un autostato dello spettro discreto esso è nullo. Abbiamo quindi

$$\begin{aligned} \langle p \rangle_{t=0} &= \frac{1}{2} [\langle \psi_1 | p | \psi_1 \rangle + \langle \psi_2 | p | \psi_2 \rangle + e^{i\alpha} \langle \psi_1 | p | \psi_2 \rangle + e^{-i\alpha} \langle \psi_2 | p | \psi_1 \rangle] = \\ &= \frac{1}{2} [e^{i\alpha} I_1 + e^{-i\alpha} I_2] \end{aligned}$$

dove $I_2 = I_1^*$, il quale è dato da

$$\begin{aligned} I_1 &= \frac{2}{L} \frac{\hbar}{i} \int_0^L dx \sin \frac{\pi x}{L} \frac{2\pi}{L} \cos \frac{2\pi x}{L} = \frac{4\hbar}{iL} \int_0^\pi dt \sin t \cos 2t = \\ &= \frac{2\hbar}{iL} \int_{-1}^1 dz (2z^2 - 1) = -\frac{8\hbar}{3iL}. \end{aligned}$$

In definitiva

$$\langle p \rangle_{t=0} = \frac{1}{2} \frac{8\hbar}{3iL} [-e^{i\alpha} + e^{-i\alpha}] = -\frac{8\hbar}{3L} \sin \alpha.$$

Imponendo la condizione richiesta si ottengono due diverse determinazioni di α :

$$\sin \alpha = -\frac{1}{2} \Rightarrow \alpha = \alpha_1 = -\frac{\pi}{6} \quad \text{oppure} \quad \alpha = \alpha_2 = \pi + \frac{\pi}{6}.$$

c) Ad un istante di tempo t successivo avremo

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} \psi_1(x) + e^{i\alpha} e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} \psi_2(x) \right)$$

e il valore di attesa dell'impulso sarà dato da

$$\begin{aligned} \langle p \rangle_t &= \frac{1}{2} \left[e^{i\alpha} e^{-i\frac{E_2 - E_1}{\hbar} t} \langle \psi_1 | p | \psi_2 \rangle + e^{-i\alpha} e^{i\frac{E_2 - E_1}{\hbar} t} \langle \psi_2 | p | \psi_1 \rangle \right] = \\ &= \frac{1}{2} \frac{8\hbar}{3iL} [-e^{i(\alpha - \omega t)} + e^{-i(\alpha - \omega t)}] = -\frac{8\hbar}{3L} \sin(\alpha + \omega t), \end{aligned}$$

dove abbiamo definito

$$\omega = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}.$$

A seconda della determinazione di α , il valor di attesa dell'impulso assumerà per la prima volta il valore zero quando $\omega t = \alpha_1 + \pi$ oppure $\omega t = \alpha_2 - \pi$. Il primo istante in cui il valore di attesa dell'impulso si annulla sarà dato, nei due casi rispettivamente, da

$$t = \frac{5\pi}{6\omega} \quad \text{oppure} \quad t = \frac{\pi}{6\omega}.$$

5.6 Particella su un segmento (II)

Una particella di massa m è confinata sul segmento $0 \leq x \leq a$. Al tempo $t = 0$ la sua funzione d'onda normalizzata è

$$\psi(x, t = 0) = \sqrt{\frac{8}{5a}} \left[1 + \cos \frac{\pi x}{a} \right] \sin \frac{\pi x}{a}.$$

- Quali risultati si possono ottenere da una misura dell'energia?
- Scrivere la funzione d'onda all'istante successivo t .
- Calcolare il valore d'attesa dell'energia del sistema a $t = 0$ e t .
- Calcolare la probabilità di trovare al tempo t la particella nella metà di sinistra del segmento.

Soluzione

Per questo sistema gli autovalori e le corrispondenti autofunzioni dell'energia sono:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}, \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

- Notiamo che la funzione d'onda a $t = 0$ può essere riscritta come combinazione lineare di autofunzioni di $\mathcal{H}$:

$$\psi(x, t = 0) = \sqrt{\frac{8}{5a}} \left[\sin \frac{\pi x}{a} + \frac{1}{2} \sin \frac{2\pi x}{a} \right] = \sqrt{\frac{4}{5}} \psi_1(x) + \sqrt{\frac{1}{5}} \psi_2(x).$$

Poiché la somma dei moduli quadri dei coefficienti è uguale a 1, la funzione d'onda è normalizzata. Essa è una sovrapposizione di $\psi_1(x)$ e $\psi_2(x)$, quindi i valori dell'energia ottenuti da una misura possono essere solo E_1 e E_2 .

- La funzione d'onda al tempo t_0 si ottiene applicando l'operatore di evoluzione

$$\psi(x, t) = e^{-i\frac{\mathcal{H}t}{\hbar}} \psi(x, t = 0) = \sqrt{\frac{4}{5}} \psi_1(x) e^{-i\frac{\hbar\pi^2}{2ma^2}t} + \sqrt{\frac{1}{5}} \psi_2(x) e^{-i\frac{2\hbar\pi^2}{ma^2}t}.$$

c) Il valore d'attesa dell'energia al tempo $t = 0$ è dato da

$$\langle E \rangle_\psi = \frac{4}{5} E_1(x) + \frac{1}{5} E_2(x) = \frac{4}{5} \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2}.$$

Esso resta costante nel corso dell'evoluzione, poiché l'Hamiltoniano non dipende dal tempo.

d) Tenendo conto della proprietà di simmetria delle funzioni d'onda rispetto a $x = \frac{a}{2}$, si ha:

$$\begin{aligned} P\left(x < \frac{a}{2}, t\right) &= \int_0^{\frac{a}{2}} dx |\psi(x, t)|^2 = \\ &= \int_0^{\frac{a}{2}} dx \left[\frac{4}{5} |\psi_1(x)|^2 + \frac{1}{5} |\psi_2(x)|^2 + 2 \frac{2}{5} \Re \left(\psi_1(x) \psi_2(x) e^{-i \frac{E_1 - E_2}{\hbar} t} \right) \right] = \\ &= \frac{1}{2} + \frac{4}{5} \frac{2}{a} \cos \frac{E_1 - E_2}{\hbar} t \int_0^{\frac{a}{2}} dx \sin \frac{\pi x}{a} \sin \frac{2\pi x}{a} = \\ &= \frac{1}{2} + \frac{16}{5\pi} \cos \frac{E_1 - E_2}{\hbar} t \int_0^1 d \sin z \sin^2 z = \frac{1}{2} + \frac{16}{15\pi} \cos \frac{3\pi^2 \hbar}{2ma^2} t. \end{aligned}$$

5.7 Particella su un segmento (III)

Una particella si trova in una buca di potenziale infinitamente profonda

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{se } x < 0 \text{ e } x > a, \\ 0, & \text{se } 0 < x < a. \end{cases}$$

Nello stato descritto dalla funzione d'onda all'istante $t=0$

$$\psi(x, 0) = \begin{cases} 0, & \text{se } x < 0 \text{ e } x > a, \\ Ax(a-x), & \text{se } 0 < x < a, \end{cases}$$

determinare:

- la distribuzione di probabilità per l'energia della particella;
- il valore di attesa dell'energia e la sua incertezza;
- la funzione d'onda al generico istante t .

Soluzione

Per questo sistema gli autovalori e le corrispondenti autofunzioni dell'energia sono:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}, \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

I quesiti posti richiedono che la funzione d'onda sia correttamente normalizzata, quindi determiniamo A :

$$\frac{1}{|A|^2} = \int_0^a x^2 (a-x)^2 dx = a^5 \int_0^1 t^2 (1-t)^2 dt = \frac{a^5}{30} \Rightarrow A = \sqrt{\frac{30}{a^5}}$$

a parte un fattore di fase arbitrario.

- a) La probabilità di trovare la particella nello stato n -simo è data dal modulo quadro di

$$\begin{aligned} c_n &= \langle n | \psi \rangle = \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \sqrt{\frac{30}{a^5}} x(a-x) dx = \frac{4\sqrt{15}}{n^3\pi^3} (1 - \cos n\pi) = \\ &= \frac{4\sqrt{15}}{n^3\pi^3} (1 - (-1)^n). \end{aligned}$$

Poiché la funzione d'onda è simmetrica rispetto a $x = a/2$, essa ha solo componenti che hanno la stessa proprietà, le autofunzioni con n dispari.

- b) Il valore di attesa dell'energia è dato da

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle = \int_0^a \psi^*(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \psi(x) dx = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{30}{a^5} \int_0^a x(a-x)(-2) dx = \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{60}{a^2} \int_0^1 t(1-t) dt = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{10}{a^2}. \end{aligned}$$

Per ottenere la dispersione, calcoliamo prima il valor di attesa di E^2 :

$$\begin{aligned} \langle E^2 \rangle &= \langle \psi | \mathcal{H} \mathcal{H} | \psi \rangle = \int_0^a \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \right|^2 dx = \\ &= \frac{\hbar^4}{4m^2} \frac{30}{a^5} 4a = \frac{\hbar^4}{m^2} \frac{30}{a^4} \\ \Delta E &= \sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar^4}{m^2 a^4} (30 - 25)} = \sqrt{5} \frac{\hbar^2}{ma^2}. \end{aligned}$$

- c) Per conoscere la funzione d'onda all'istante t applichiamo l'operatore di evoluzione:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= e^{-i\frac{\mathcal{H}t}{\hbar}} \psi(x, t=0) = \\ &= \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} = \\ &= \sum_n \sqrt{\frac{30}{a}} \frac{8}{(2n+1)^3\pi^3} \sin \frac{(2n+1)\pi x}{a} \exp \left\{ -i \frac{\hbar\pi^2(2n+1)^2}{2ma^2} t \right\}. \end{aligned}$$

5.8 Oscillatore Armonico (I)

Considerare un oscillatore armonico di massa m con energia potenziale

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

che si trova all'istante $t = 0$ in uno stato determinato dalle seguenti condizioni:

- a) Ogni misura di energia dà con certezza valori che soddisfano la relazione

$$\hbar\omega < E < 3\hbar\omega.$$

b) Il valore di attesa dell'energia è

$$\langle E \rangle = \frac{11}{6} \hbar \omega.$$

c) Il valore di attesa della coordinata è:

$$\langle x \rangle = -\sqrt{\frac{8\hbar}{9m\omega}}.$$

Identificare tale stato. Determinare poi in quali istanti il valor medio della coordinata è positivo e massimo.

Soluzione

Ricordiamo la soluzioni per l'equazione agli autovalori per l'Hamiltoniano dell'oscillatore armonico:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad ; \quad \hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle.$$

Imponiamo ora le condizioni del problema:

a) I possibili valori di energia misurati sono

$$E_1 = \frac{3}{2} \hbar \omega \quad \text{e} \quad E_2 = \frac{5}{2} \hbar \omega.$$

Lo stato del sistema è quindi

$$|\psi\rangle = c_1|1\rangle + c_2|2\rangle \quad \text{con} \quad |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1.$$

b) L'energia media è data da:

$$\langle E \rangle_\psi = |c_1|^2 E_1 + |c_2|^2 E_2 = \frac{1}{2} \hbar \omega (3|c_1|^2 + 5|c_2|^2) = \frac{11}{6} \hbar \omega.$$

Questa condizione, insieme alla precedente, comporta

$$|c_1|^2 = \frac{2}{3} \quad \text{e} \quad |c_2|^2 = \frac{1}{3}.$$

La fase di uno dei coefficienti può essere fissata arbitrariamente, quindi

$$c_1 = \sqrt{\frac{2}{3}} \quad \text{e} \quad c_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} e^{i\delta}.$$

c) Utilizzando le note proprietà degli operatori di creazione e distruzione (A.15) riportate in appendice, abbiamo

$$\begin{aligned} \langle x \rangle_\psi &= (c_1^* \langle 1| + c_2^* \langle 2|) \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^+) (c_1|1\rangle + c_2|2\rangle) = \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (c_1^* \langle 1| + c_2^* \langle 2|) (\sqrt{2}c_2|1\rangle + \sqrt{2}c_1|2\rangle) = \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} (c_1^* c_2 + c_2^* c_1) = -\sqrt{\frac{8\hbar}{9m\omega}}. \end{aligned}$$

Quindi

$$c_1^* c_2 + c_2^* c_1 = -\frac{2\sqrt{2}}{3}.$$

Sostituendo le espressioni per c_1 e c_2 si ottiene:

$$\cos \delta = -1 \quad \Rightarrow \quad \delta = \pi \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} c_1 = \sqrt{\frac{2}{3}} \\ c_2 = -\frac{1}{\sqrt{3}}. \end{cases}$$

In conclusione

$$|\psi\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|1\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}|2\rangle.$$

Al tempo t , applicando il propagatore allo stato $|\psi\rangle$,

$$|\psi(t)\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}e^{-i\frac{3}{2}\omega t}|1\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}e^{-i\frac{5}{2}\omega t}|2\rangle.$$

Infine determiniamo il valor di attesa di x al tempo t :

$$\begin{aligned} \langle x(t) \rangle_\psi &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}(c_1^*(t)c_2(t) + c_2^*(t)c_1(t)) = \\ &= -\frac{4}{3}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \cos \omega t. \end{aligned}$$

Si ha quindi:

$$\begin{aligned} \langle x(t) \rangle_\psi &> 0 \quad \text{se } t \in \left(\frac{(4n+1)\pi}{2\omega}, \frac{(4n+3)\pi}{2\omega} \right) \quad \text{per } n = 0, 1, 2, \dots \\ \langle x(t) \rangle_\psi &= \max_t \langle x(t) \rangle_\psi \quad \text{se } t = \frac{(2n+1)\pi}{\omega} \quad \text{per } n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned}$$

5.9 Oscillatore Armonico (II)

Una particella di massa m si muove in un potenziale armonico di pulsazione ω . Il suo stato all'istante $t = 0$ è descritto dalla funzione

$$\psi(x, 0) = A \left(x^2 + 2\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}x \right) e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}.$$

Si determinino l'espressione della funzione d'onda in un successivo istante $t > 0$ e il valor di attesa dell'energia.

Soluzione

Notiamo che la funzione d'onda è il prodotto del termine esponenziale presente nelle autofunzioni dell'oscillatore armonico per un polinomio di II grado. Quindi essa deve essere una combinazione lineare delle prime tre autofunzioni.

$$\psi(x, 0) = c_0\phi_0(x) + c_1\phi_1(x) + c_2\phi_2(x).$$

Esse sono (A.16):

$$\begin{aligned}\phi_0(x) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \\ \phi_1(x) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{2} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \\ \phi_2(x) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{2m\omega}{\hbar} x^2 - 1\right) e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}.\end{aligned}$$

Deve quindi risultare

$$A \left(x^2 + 2\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} x \right) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \left[c_0 + c_1 \sqrt{2} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x + c_2 \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{2m\omega}{\hbar} x^2 - 1\right) \right].$$

Applicando il principio di identità dei polinomi ricaviamo

$$\begin{aligned}c_0 &= A \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{-\frac{1}{4}} \frac{\hbar}{2m\omega} \\ c_1 &= A \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{-\frac{1}{4}} \frac{\hbar\sqrt{2}}{m\omega} \\ c_2 &= A \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{-\frac{1}{4}} \frac{\hbar}{\sqrt{2}m\omega}.\end{aligned}$$

Determiniamo A in modo che ψ sia normalizzata. Poiché le ϕ_n lo sono già, deve risultare

$$\sum_{n=0}^2 |c_n|^2 = 1,$$

da cui si ottiene facilmente, ponendo uguale a zero la fase arbitraria,

$$A = \sqrt{\frac{4}{11}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{m\omega}{\hbar}$$

e, conseguentemente,

$$c_0 = \frac{1}{\sqrt{11}} \quad c_1 = \sqrt{\frac{8}{11}} \quad c_2 = \sqrt{\frac{2}{11}}.$$

La funzione d'onda al tempo t è quindi

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{11}} \phi_0(x) e^{-i\frac{1}{2}\omega t} + \sqrt{\frac{8}{11}} \phi_1(x) e^{-i\frac{3}{2}\omega t} + \sqrt{\frac{2}{11}} \phi_2(x) e^{-i\frac{5}{2}\omega t}.$$

L'energia media, dato che l'hamiltoniano non dipende dal tempo, è costante e uguale a

$$\langle E \rangle = |c_0|^2 E_0 + |c_1|^2 E_1 + |c_2|^2 E_2 = \frac{1}{11} \frac{1}{2} \hbar\omega + \frac{8}{11} \frac{3}{2} \hbar\omega + \frac{2}{11} \frac{5}{2} \hbar\omega = \frac{35}{22} \hbar\omega.$$

5.10 Oscillatore Armonico (III)

Un oscillatore armonico di massa m e pulsazione ω si trova in uno stato tale che il valore di attesa dell'energia è:

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \frac{3}{2} \hbar \omega,$$

lo scarto quadratico medio è dato da

$$\langle (\mathcal{H} - \langle \mathcal{H} \rangle)^2 \rangle = \frac{1}{2} (\hbar \omega)^2,$$

ed, inoltre, una misura dell'energia *non* può dare un risultato maggiore di $3\hbar\omega$.

- Quali risultati si possono ottenere facendo una misura dell'energia e con quali probabilità?
- Scrivere il più generale vettore di stato compatibile con le informazioni suddette.
- Sapendo che all'istante $t = 0$ il valore di attesa dell'operatore di posizione x è il massimo possibile, determinarne il valore ad un istante t successivo.

Soluzione

- Essendo $E \leq 3\hbar\omega$ i risultati di una misura dell'energia possono essere

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega \quad E_1 = \frac{3}{2} \hbar \omega \quad E_2 = \frac{5}{2} \hbar \omega$$

corrispondenti ai primi tre autoket dell'energia. Lo stato dell'oscillatore è quindi

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle + c|2\rangle, \quad \text{con } |a|^2 + |b|^2 + |c|^2 = 1.$$

I coefficienti a, b e c sono inoltre soggetti alle condizioni imposte dal problema

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \left[\frac{1}{2} |a|^2 + \frac{3}{2} |b|^2 + \frac{5}{2} |c|^2 \right] \hbar \omega = \frac{3}{2} \hbar \omega$$

e

$$\begin{aligned} \langle (\mathcal{H} - \langle \mathcal{H} \rangle)^2 \rangle &= \langle \mathcal{H}^2 \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2 = \\ &= \left[\frac{1}{4} |a|^2 + \frac{9}{4} |b|^2 + \frac{25}{4} |c|^2 \right] \hbar^2 \omega^2 - \frac{9}{4} \hbar^2 \omega^2 = \\ &= \frac{1}{2} \hbar^2 \omega^2. \end{aligned}$$

Queste tre condizioni consentono di determinare i moduli quadri dei tre coefficienti e, quindi, le probabilità richieste:

$$P\left(E = \frac{1}{2} \hbar \omega\right) = |a|^2 = \frac{1}{4}; \quad P\left(E = \frac{3}{2} \hbar \omega\right) = |b|^2 = \frac{1}{2}; \quad P\left(E = \frac{5}{2} \hbar \omega\right) = |c|^2 = \frac{1}{4}.$$

- Ponendo uguale a 0 la fase di a , possiamo scrivere:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2} |0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\beta} |1\rangle + \frac{1}{2} e^{i\gamma} |2\rangle.$$

c) Utilizzando le formule (A.14, A.15), si ricava:

$$\begin{aligned}
 X|\psi\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[b|0\rangle + (a + \sqrt{2}c)|1\rangle + \sqrt{2}b|2\rangle + \sqrt{3}c|3\rangle \right] \\
 \langle X \rangle &= \langle \psi | X | \psi \rangle = \\
 &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[a^*b + b^*(a + \sqrt{2}c) + \sqrt{2}c^*b \right] = \\
 &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[2\Re(a^*b) + 2\sqrt{2}\Re(b^*c) \right] = \\
 &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \cos\beta + \cos(\gamma - \beta) \right].
 \end{aligned}$$

Poiché β e γ sono indipendenti, $\langle X \rangle$ assume il massimo valore

$$\langle X \rangle_{\max} = \frac{2 + \sqrt{2}}{2} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

per

$$\cos\beta = \cos(\gamma - \beta) = 1 \quad \text{cioè per } \beta = \gamma = 0.$$

Lo stato richiesto è quindi:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle + \frac{1}{2}|2\rangle,$$

che, al tempo $t > 0$ sarà dato da

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{2}e^{-i\frac{1}{2}\omega t}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\frac{3}{2}\omega t}|1\rangle + \frac{1}{2}e^{-i\frac{5}{2}\omega t}|2\rangle.$$

Ripetendo il calcolo già fatto per $\langle X \rangle$ a $t = 0$ si ottiene

$$\langle X(t) \rangle = \frac{2 + \sqrt{2}}{2} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \cos \omega t.$$

5.11 Fermione in campo magnetico (I)

All'istante $t = 0$ una particella di spin $\frac{1}{2}$, momento magnetico $\mu = g\mathbf{S}$ e massa infinita si trova in uno stato nel quale la probabilità di trovare il valore $\hbar/2$ facendo una misura di S_z è $2/3$, e i valori di attesa di S_x e S_y sono uguali e entrambi positivi. La particella è immersa in un campo magnetico costante $\mathbf{B}$ parallelo all'asse y .

- Scrivere il vettore di stato all'istante $t = 0$ e determinare il valore di attesa comune di S_x e S_y .
- Calcolare il valore massimo e minimo della probabilità di trovare il valore $\hbar/2$ in una misura di S_z durante l'evoluzione temporale del sistema.

Soluzione

a) L'Hamiltoniano del sistema è dato da

$$\mathcal{H} = -g\mathbf{S} \cdot \mathbf{B} = -gBS_y.$$

A parte un fattore di fase complessivo arbitrario, lo stato del sistema all'istante iniziale può essere scritto in termini degli autostati di S_z nella forma

$$|\psi(0)\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|+\rangle + e^{i\alpha}\sqrt{\frac{1}{3}}|-\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}\begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ e^{i\alpha} \end{pmatrix}.$$

I valori medi di S_x e S_y sono dati da

$$\begin{aligned} \frac{2}{\hbar}\langle S_x \rangle &= \frac{1}{3}(\sqrt{2}e^{-i\alpha})\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ e^{i\alpha} \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{2}}{3}(e^{i\alpha} + e^{-i\alpha}) = \frac{2\sqrt{2}}{3}\cos\alpha \\ \frac{2}{\hbar}\langle S_y \rangle &= \frac{1}{3}(\sqrt{2}e^{-i\alpha})\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ e^{i\alpha} \end{pmatrix} = i\frac{\sqrt{2}}{3}(-e^{i\alpha} + e^{-i\alpha}) = \frac{2\sqrt{2}}{3}\sin\alpha \end{aligned}$$

$$\langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle \Rightarrow \sin\alpha = \cos\alpha \Rightarrow \alpha = \frac{\pi}{4}$$

dovendo essere $\langle S_x \rangle$ e $\langle S_y \rangle$ positivi. In definitiva lo stato a $t = 0$ è

$$|\psi(0)\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\left(|+\rangle + \frac{1+i}{2}|-\rangle\right)$$

e il valore di attesa di S_x e S_y è

$$\langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{2}\frac{2\sqrt{2}}{3}\cos\frac{\pi}{4} = \frac{\hbar}{3}.$$

b) All'istante $t > 0$

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{\mathcal{H}t}{\hbar}}|\psi(0)\rangle = e^{i\omega\sigma_y t}\sqrt{\frac{2}{3}}\begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1+i}{2} \end{pmatrix}$$

dove abbiamo introdotto la grandezza $\omega = gB/2$. Applicando la nota proprietà delle matrici di Pauli (A.68), si ottiene

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= (I\cos\omega t + i\sigma_y\sin\omega t)\sqrt{\frac{2}{3}}\begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1+i}{2} \end{pmatrix} = \\ &= \sqrt{\frac{2}{3}}\begin{pmatrix} \cos\omega t & \sin\omega t \\ -\sin\omega t & \cos\omega t \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1+i}{2} \end{pmatrix} = \\ &= \sqrt{\frac{2}{3}}\begin{pmatrix} \cos\omega t + \frac{1+i}{2}\sin\omega t \\ \frac{1+i}{2}\cos\omega t - \sin\omega t \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

La probabilità di trovare il valore $\hbar/2$ in una misura di S_z è data dal modulo quadro della relativa componente:

$$\begin{aligned} P\left(S_z = +\frac{\hbar}{2}\right) &= \frac{2}{3} \left| \cos \omega t + \frac{1+i}{2} \sin \omega t \right|^2 = \\ &= \frac{2}{3} \left(\cos^2 \omega t + \frac{1}{2} \sin^2 \omega t + \sin \omega t \cos \omega t \right). \end{aligned}$$

Il punto di massimo si ottiene imponendo la condizione:

$$\frac{dP}{dt} = \frac{2}{3} \omega \left(\cos 2\omega t - \frac{\sin 2\omega t}{2} \right) = 0 \quad \Rightarrow \quad \tan 2\omega t = 2.$$

Questa equazione ha due soluzioni. La prima

$$t = \frac{1}{2\omega} [\arctan 2 + (2n+1)\pi]$$

corrisponde al punto di massimo cercato. Esiste poi un'altra soluzione,

$$t = \frac{1}{2\omega} (\arctan 2 + 2n\pi),$$

ma corrisponde ad un punto di minimo, perché la derivata seconda è ivi negativa.

5.12 Fermione in campo magnetico (II)

Una particella di massa infinita e spin $\frac{1}{2}$ si trova all'istante $t = 0$ in uno stato in cui la probabilità di osservare la componente dello spin lungo la direzione positiva dell'asse z è $\frac{1}{4}$ e lungo la direzione negativa è $\frac{3}{4}$. Questa informazione determina lo stato a meno di un parametro.

La particella è sottoposta ad un campo magnetico $\vec{B}$ costante e uniforme diretto lungo l'asse x .

- Scrivere l'espressione dello stato iniziale (includendo un parametro indeterminato).
- Scrivere l'Hamiltoniano del sistema (l'operatore momento magnetico della particella è $\mu = g\mathbf{S}$).
- Scrivere l'espressione dello stato (sempre contenente un parametro indeterminato) in funzione del tempo.
- Determinare per quali valori del parametro accade che la funzione d'onda a un certo istante di tempo si riduce a un autostato di σ_z e trovare a quali tempi ciò accade.

Soluzione

- A parte un fattore di fase complessivo arbitrario, lo stato del sistema all'istante iniziale può essere scritto in termini degli autostati di S_z nella forma

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{2} |+\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2} e^{i\alpha} |-\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} e^{i\alpha} \end{pmatrix}.$$

b) L'Hamiltoniano del sistema è dato da

$$\mathcal{H} = -g\mathbf{S} \cdot \mathbf{B} = -gBS_x = -\hbar\omega\sigma_x \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

dove

$$\omega = \frac{gB}{2}.$$

Gli autovalori e i corrispondenti autovettori di $\mathcal{H}$ sono

$$\begin{aligned} E_1 = -\hbar\omega \quad |1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + |-\rangle) \\ E_2 = \hbar\omega \quad |2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle - |-\rangle). \end{aligned}$$

c) All'istante $t > 0$

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-i\frac{\mathcal{H}t}{\hbar}} |\psi(0)\rangle = e^{i\omega t} |1\rangle \langle 1 | \psi(0)\rangle + e^{-i\omega t} |2\rangle \langle 2 | \psi(0)\rangle = \\ &= \frac{e^{i\omega t}}{2\sqrt{2}} \left(1 + \sqrt{3}e^{i\alpha} \right) \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + |-\rangle) + \\ &\quad + \frac{e^{-i\omega t}}{2\sqrt{2}} \left(1 - \sqrt{3}e^{i\alpha} \right) \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle - |-\rangle) = \\ &= \frac{1}{2} \left[\cos \omega t + i\sqrt{3}e^{i\alpha} \sin \omega t \right] |+\rangle + \frac{1}{2} \left[i \sin \omega t + \sqrt{3}e^{i\alpha} \cos \omega t \right] |-\rangle. \end{aligned}$$

d) Supponiamo che al tempo $t = T$ sia $|\psi(T)\rangle = |+\rangle$. Deve risultare:

$$\begin{aligned} i \sin \omega T + \sqrt{3}e^{i\alpha} \cos \omega T &= 0 \\ \sin \omega T - \sqrt{3}e^{i(\alpha+\pi/2)} \cos \omega T &= 0 \\ \tan \omega T &= \sqrt{3}e^{i(\alpha+\pi/2)}. \end{aligned}$$

Poiché ωT deve essere reale, deve risultare

$$\alpha + \pi/2 = 0, \pi \quad \Rightarrow \quad \alpha = -\pi/2, \pi/2.$$

Nei due casi avremo:

$$\begin{aligned} \alpha = -\pi/2 \quad \Rightarrow \quad T &= \frac{1}{\omega} \arctan \sqrt{3} = \frac{\pi}{\omega} \left(n + \frac{1}{3} \right), \quad n = 0, 1, \dots \\ \alpha = \pi/2 \quad \Rightarrow \quad T &= \frac{1}{\omega} \arctan(-\sqrt{3}) = \frac{\pi}{\omega} \left(n - \frac{1}{3} \right), \quad n = 1, 2, \dots \end{aligned}$$

dove si è tenuto conto del fatto che $T > 0$.

5.13 Fermione in campo magnetico (III)

L'Hamiltoniano di una particella di spin $\frac{1}{2}$ sia

$$\mathcal{H} = -g\mathbf{S} \cdot \mathbf{B}$$

dove $\mathbf{S}$ è lo spin e $\mathbf{B}$ è un campo magnetico diretto lungo l'asse z .

Determinare:

- La forma esplicita in funzione di $\mathbf{S}$ e $\mathbf{B}$ dell'operatore $\dot{\mathbf{S}}$.
- Gli autostati di $(\dot{\mathbf{S}})_y$ e i corrispondenti autovalori.
- L'evoluzione temporale di uno stato che coincida al tempo $t = 0$ con uno dei suddetti autostati e il valore di attesa dell'Hamiltoniano.

Soluzione

- L'equazione di evoluzione per l'operatore $\mathbf{S}$ è

$$\dot{\mathbf{S}} = \frac{d\mathbf{S}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, \mathbf{S}] = -\frac{igB}{\hbar} [S_z, \mathbf{S}]$$

(poiché $\mathbf{S}$ non dipende esplicitamente dal tempo, $\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial t} = 0$). Esplicitando per ciascuna componente:

$$\begin{aligned}\dot{S}_x &= -\frac{igB}{\hbar} [S_z, S_x] = gBS_y \\ \dot{S}_y &= -\frac{igB}{\hbar} [S_z, S_y] = -gBS_x \\ \dot{S}_z &= -\frac{igB}{\hbar} [S_z, S_z] = 0,\end{aligned}$$

dove abbiamo usato $\mathbf{S} = \hbar/2\boldsymbol{\sigma}$ e le relazioni di commutazione per le matrici di Pauli (A.65).

- Gli autovalori di $(\dot{\mathbf{S}})_y$ sono gli autovalori di $-\frac{gB\hbar}{2}\sigma_x$, cioè

$$\lambda_1 = -\hbar\omega \quad \lambda_2 = \hbar\omega \quad \text{dove} \quad \omega = \frac{gB}{2}.$$

Gli autostati sono gli stessi di σ_x , cioè, nella base di σ_z

$$|\lambda_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad |\lambda_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

- Supponiamo che al tempo $t = 0$ il sistema sia nello stato

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right].$$

Al tempo $t > 0$ esso sarà nello stato

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{\mathcal{H}t}{\hbar}} |\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[e^{-i\omega t} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + e^{i\omega t} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} \end{pmatrix}.$$

Il valore di attesa dell'energia, poiché l'Hamiltoniano non dipende dal tempo, è costante e può essere calcolato in $t = 0$:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle_\psi &= -gB \langle \psi(0) | S_z | \psi(0) \rangle \\ &= -\frac{gB}{2} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= -\frac{gB\hbar}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = 0. \end{aligned}$$

5.14 Fermione in campo magnetico (IV)

Una particella di massa infinita e di spin $\frac{1}{2}$ con momento magnetico $\mu = g\mathbf{S}$, dove $\mathbf{S}$ è lo spin, è posta in un campo magnetico costante diretto lungo l'asse x . All'istante $t = 0$, si misura $S_z = \frac{\hbar}{2}$. Trovare le probabilità per un qualsiasi istante successivo che la particella venga trovata con $S_y = \pm \frac{\hbar}{2}$.

Soluzione

L'Hamiltoniano del sistema, trascurando il termine cinetico, è

$$\mathcal{H} = -g\mathbf{S} \cdot \mathbf{B} = -\frac{gB\hbar}{2} \sigma_x = -\hbar\omega \sigma_x \quad \text{dove} \quad \omega = \frac{gB}{2}.$$

Risolviamo il problema usando l'equazione di Schrödinger per l'evoluzione del generico stato:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} + \hbar\omega \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = 0.$$

Da essa si ricava

$$\begin{cases} i\frac{da_1}{dt} + \omega a_2 = 0 \\ i\frac{da_2}{dt} + \omega a_1 = 0 \end{cases} \Rightarrow \frac{d^2 a_{1,2}}{dt^2} + \omega^2 a_{1,2} = 0,$$

le cui soluzioni sono

$$a_{1,2}(t) = A_{1,2} e^{i\omega t} + B_{1,2} e^{-i\omega t}.$$

All'istante $t = 0$ lo stato è autostato di S_z con autovalore $+\hbar/2$, quindi

$$a_1(0) = 1 \text{ e } a_2(0) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad A_1 + B_1 = 1 \text{ e } A_2 + B_2 = 0.$$

Imponendo queste condizioni nell'equazione di Schrödinger si ha

$$\begin{aligned} i\frac{da_1}{dt} \Big|_{t=0} &= -\omega A_1 + \omega B_1 = -\omega a_2 \Big|_{t=0} = 0 \\ i\frac{da_2}{dt} \Big|_{t=0} &= -\omega A_2 + \omega B_2 = -\omega a_1 \Big|_{t=0} = -\omega. \end{aligned}$$

Abbiamo complessivamente 4 equazioni

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = 1 \\ A_1 - B_1 = 0 \\ A_2 + B_2 = 0 \\ A_2 - B_2 = 1 \end{cases}$$

che hanno soluzione

$$A_1 = B_1 = A_2 = -B_2 = \frac{1}{2}.$$

Sostituendo nell'equazione per $a_{1,2}$ troviamo

$$\psi(t) = \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \omega t \\ i \sin \omega t \end{pmatrix}$$

che è normalizzato. Gli autostati di S_y sono

$$\left| S_y = +\frac{\hbar}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \quad \left| S_y = -\frac{\hbar}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

e le probabilità richieste

$$\begin{aligned} P\left(S_y = +\frac{\hbar}{2}\right) &= \left| \left\langle S_y = +\frac{\hbar}{2} \left| \psi(t) \right\rangle \right|^2 = \frac{1}{2} \left| (1 - i) \begin{pmatrix} \cos \omega t \\ i \sin \omega t \end{pmatrix} \right|^2 = \\ &= \frac{1}{2} (\cos \omega t + \sin \omega t)^2 = \frac{1}{2} (1 + \sin 2\omega t), \\ P\left(S_y = -\frac{\hbar}{2}\right) &= \left| \left\langle S_y = -\frac{\hbar}{2} \left| \psi(t) \right\rangle \right|^2 = \frac{1}{2} \left| (1 + i) \begin{pmatrix} \cos \omega t \\ i \sin \omega t \end{pmatrix} \right|^2 = \\ &= \frac{1}{2} (\cos \omega t - \sin \omega t)^2 = \frac{1}{2} (1 - \sin 2\omega t). \end{aligned}$$

È facile verificare, come controllo, che la loro somma vale 1.

5.15 Fermione in campo magnetico (V)

Una particella di spin $1/2$ si trova al tempo $t = 0$ nello stato con spin $+1/2$ lungo l'asse z . Essa è soggetta ad una interazione magnetica del tipo

$$\mathcal{H} = \frac{A}{\sqrt{2}} (\sigma_x + \sigma_y)$$

con A costante e σ_x e σ_y matrici di Pauli. Si calcoli dopo quanto tempo la componente lungo l'asse z dello spin è $-\hbar/2$.

Soluzione

Detto $\hat{n}$ il versore

$$\hat{n} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0 \right)$$

e ϑ il vettore

$$\vartheta = \frac{At}{\hbar} \hat{n}$$

l'operatore di evoluzione per questo sistema si può scrivere come

$$e^{-i\frac{\mathcal{H}t}{\hbar}} = e^{-i\vartheta \cdot \sigma} = \mathbb{I} \cos \vartheta - i(\mathbf{n} \cdot \sigma) \sin \vartheta$$

dove abbiamo utilizzato la (A.68). Pertanto lo stato al tempo t sarà dato da

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-i\frac{\mathcal{H}t}{\hbar}} = \left(\mathbb{I} \cos \frac{At}{\hbar} - \frac{i(\sigma_x + \sigma_y)}{\sqrt{2}} \sin \frac{At}{\hbar} \right) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \\ &= \cos \frac{At}{\hbar} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{i}{\sqrt{2}} \sin \frac{At}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 \\ 1+i \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Perché al tempo t sopravviva solo la componente con $S_z = -\frac{\hbar}{2}$ deve risultare $\cos \frac{At}{\hbar} = 0$. Questo accade per la prima volta all'istante

$$t = \frac{\pi\hbar}{A}.$$

5.16 Fermione in campo magnetico (VI)

Una particella di spin $\frac{1}{2}$, con momento magnetico $\mu = g\mathbf{S}$ e massa infinita, è posta in un campo magnetico uniforme e costante $\mathbf{B}_0$ diretto lungo l'asse z . Durante l'intervallo $0 < t < T$ viene applicato anche un campo magnetico uniforme e costante $\mathbf{B}_1$ diretto lungo l'asse x , cosicché il sistema si troverà ancora in un campo magnetico uniforme e costante $\mathbf{B} = \mathbf{B}_0 + \mathbf{B}_1$. Per $t < 0$ il sistema è nell'autostato di S_z corrispondente all'autovalore $+\frac{\hbar}{2}$.

- A $t = 0^+$ quali saranno le ampiezze di probabilità di trovare il sistema con componente dello spin lungo la direzione di $\mathbf{B}$ pari a $\pm\frac{\hbar}{2}$?
- Come evolvono nel tempo gli autostati dell'energia nell'intervallo $0 < t < T$?
- Con quale probabilità osserveremo il sistema al tempo $t = T$ nell'autostato di S_z corrispondente all'autovalore $-\frac{\hbar}{2}$?

Soluzione

L'Hamiltoniano del sistema, per $t < 0$, è

$$\mathcal{H} = -g\mathbf{S} \cdot \mathbf{B}_0 = -\frac{gB_0\hbar}{2}\sigma_z = -\hbar\omega_0\sigma_z \quad \text{dove} \quad \omega_0 = \frac{gB_0}{2}.$$

Nell'intervallo tra 0 e T l'Hamiltoniano diventa:

$$\mathcal{H} = -g\mathbf{S} \cdot \mathbf{B} = -\frac{g\hbar}{2}(B_0\sigma_z + B_1\sigma_x) = -\frac{g\hbar}{2} \begin{pmatrix} B_0 & B_1 \\ B_1 & -B_0 \end{pmatrix} = -\hbar\omega \begin{pmatrix} \cos \vartheta & \sin \vartheta \\ \sin \vartheta & -\cos \vartheta \end{pmatrix},$$

$$\text{dove} \quad \omega = \frac{gB}{2}, \quad B = \sqrt{B_0^2 + B_1^2} \quad \text{e} \quad \vartheta = \arctan \frac{B_1}{B_0}.$$

Questo Hamiltoniano è proporzionale alla componente dello spin nella direzione $\hat{n}$ fissata dall'angolo ϑ , che è data da

$$\mathbf{S} \cdot \hat{n} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \vartheta & \sin \vartheta \\ \sin \vartheta & -\cos \vartheta \end{pmatrix}.$$

$\mathbf{S} \cdot \hat{n}$ ha autovalori $\pm \frac{\hbar}{2}$ e autostati (vedi problema 4.2):

$$|\chi_+\rangle = \left| \mathbf{S} \cdot \hat{n} = +\frac{\hbar}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\vartheta}{2} \\ \sin \frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix} \quad |\chi_-\rangle = \left| \mathbf{S} \cdot \hat{n} = -\frac{\hbar}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\vartheta}{2} \\ \cos \frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix}.$$

- a) Lo stato del sistema al tempo $t = 0$ può essere espresso in termini degli autostati di $\mathbf{S} \cdot \hat{n}$

$$|\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = c_+ |\chi_+\rangle + c_- |\chi_-\rangle$$

c_+ e c_- sono proprio le ampiezze cercate:

$$c_+ = \langle \chi_+ | \psi(0) \rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\vartheta}{2} & \sin \frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \cos \frac{\vartheta}{2}$$

$$c_- = \langle \chi_- | \psi(0) \rangle = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\vartheta}{2} & \cos \frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = -\sin \frac{\vartheta}{2}.$$

- b) Come si è detto,

$$\mathcal{H} = -g\mathbf{S} \cdot \mathbf{B} = -gB\mathbf{S} \cdot \hat{n}$$

perciò i suoi autoket sono $|\chi_+\rangle$ e $|\chi_-\rangle$ e gli autovalori sono

$$E_{\pm} = -gB \left(\pm \frac{\hbar}{2} \right) = \mp \hbar \omega.$$

Quindi nell'intervallo di tempo tra $t = 0$ e $t = T$ l'evoluzione degli autostati è data da

$$|\chi_{\pm}(t)\rangle = e^{-i\frac{E_{\pm}t}{\hbar}} |\chi_{\pm}(0)\rangle = e^{i\omega t} |\chi_{\pm}(0)\rangle.$$

- c) Al tempo T lo stato del sistema è descritto da

$$\begin{aligned} |\psi(T)\rangle &= c_+ e^{i\omega T} |\chi_+\rangle + c_- e^{-i\omega T} |\chi_-\rangle = \\ &= \cos \frac{\vartheta}{2} e^{i\omega T} \begin{pmatrix} \cos \frac{\vartheta}{2} \\ \sin \frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix} - \sin \frac{\vartheta}{2} e^{-i\omega T} \begin{pmatrix} -\sin \frac{\vartheta}{2} \\ \cos \frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\vartheta}{2} e^{i\omega T} + \sin^2 \frac{\vartheta}{2} e^{-i\omega T} \\ \cos \frac{\vartheta}{2} \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\omega T} - \sin \frac{\vartheta}{2} \cos \frac{\vartheta}{2} e^{-i\omega T} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

La probabilità cercata è

$$\begin{aligned} P(S_z = -\hbar/2) &= |\langle S_z = -\hbar/2 | \psi(T) \rangle|^2 = \\ &= \left| \cos \frac{\vartheta}{2} \sin \frac{\vartheta}{2} (e^{i\omega T} - e^{-i\omega T}) \right|^2 = |i \sin \vartheta \sin \omega T|^2 = \sin^2 \vartheta \sin^2 \omega T. \end{aligned}$$

5.17 Rotatore piano

Un rotatore piano è un sistema rigido di due particelle che può ruotare liberamente in un piano. Indicando con I il suo momento d'inerzia, determinare, nel sistema relativo:

- gli autovalori dell'energia e le rispettive autofunzioni;
- i possibili valori del momento angolare, la loro probabilità ed il valore di attesa del momento angolare nello stato descritto dalla funzione d'onda

$$\psi(\varphi) = N \cos^2 \varphi;$$

- l'evoluzione temporale dello stato ψ .

Soluzione

- L'Hamiltoniano del sistema è

$$\mathcal{H} = \frac{L^2}{2I} = \frac{L_z^2}{2I} = -\frac{\hbar^2}{2I} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

dove abbiamo assunto che il piano di rotazione sia il piano xy . Autovalori e autofunzioni dei $\mathcal{H}$ sono

$$E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2I} \quad \psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Gli autovalori sono doppiamente degeneri per ogni m fuorché per $m = 0$.

- Fissiamo la costante N mediante la normalizzazione.

$$\begin{aligned} 1 &= |N|^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \cos^4 \varphi = |N|^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \left[\frac{3}{8} + \frac{1}{2} \cos 2\varphi + \frac{1}{8} \cos 4\varphi \right] = \\ &= |N|^2 \left[\frac{3}{8} 2\pi + 0 + 0 \right] \quad \Rightarrow \quad |N|^2 = \frac{4}{3\pi} \quad \Rightarrow \quad N = \frac{2}{\sqrt{3\pi}}, \end{aligned}$$

a parte un fattore di fase arbitrario. La funzione d'onda è sovrapposizione di due autostati dell'Hamiltoniano. Infatti

$$\begin{aligned} \psi(\varphi) &= \frac{2}{\sqrt{3\pi}} \cos^2 \varphi = \frac{1}{2\sqrt{3\pi}} (e^{2i\varphi} + e^{-2i\varphi} + 2) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}} \psi_2(\varphi) + \frac{1}{\sqrt{6}} \psi_{-2}(\varphi) + \sqrt{\frac{2}{3}} \psi_0(\varphi). \end{aligned}$$

Tenendo conto del fatto che le autofunzioni di $\mathcal{H}$ sono anche autofunzioni di L_z , le probabilità richieste sono date da

$$P(L_z = 0) = \frac{2}{3} \quad P(L_z = 2) = \frac{1}{6} \quad P(L_z = -2) = \frac{1}{6},$$

e il valore di attesa del momento angolare da

$$\langle L_z \rangle = \frac{2}{3} \cdot 0 + \frac{1}{6} \cdot 2 + \frac{1}{6} \cdot (-2) = 0.$$

c) Lo stato al tempo $t > 0$ è descritto dalla funzione d'onda

$$\begin{aligned}\psi(\varphi, t) &= \frac{1}{\sqrt{6}} \psi_2(\varphi) e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} + \frac{1}{\sqrt{6}} \psi_{-2}(\varphi) e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} + \sqrt{\frac{2}{3}} \psi_0(\varphi) e^{-i\frac{E_0 t}{\hbar}} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{3\pi}} \left(\cos 2\varphi e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} + 1 \right).\end{aligned}$$

5.18 Rotatore in campo magnetico (I)

L'Hamiltoniano di un rotatore isotropo in un campo magnetico uniforme è dato da

$$H = \frac{L^2}{2I} + \alpha L_z$$

con α costante. Il suo stato è descritto al tempo $t=0$ dalla funzione d'onda

$$\psi(\vartheta, \phi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta \sin 2\phi.$$

Si determini l'espressione della funzione d'onda ad un successivo istante t .

Soluzione

Le autofunzioni dell'Hamiltoniano sono le Armoniche sferiche e gli autovalori sono

$$\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2I} + \alpha\hbar m, \quad \ell = 0, 1, 2, \dots, \quad m = 0, \pm 1, \dots$$

La funzione d'onda che rappresenta lo stato iniziale può essere scritta, per la (A.37), come:

$$\psi(\vartheta, \phi, t=0) = \frac{1}{2i} \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2(\theta) (e^{2i\phi} - e^{-2i\phi}) = \frac{1}{2i} (Y_2^2(\vartheta, \phi) - Y_2^{-2}(\vartheta, \phi)).$$

Ad un successivo istante t avremo:

$$\begin{aligned}\psi(\vartheta, \phi, t) &= e^{-i\frac{\mathcal{H}t}{\hbar}} \psi((\vartheta, \phi), t=0) = \\ &= \frac{1}{2i} \left(Y_2^2(\vartheta, \phi) e^{-i[\frac{6\hbar}{2I} + 2\alpha]t} - Y_2^{-2}(\vartheta, \phi) e^{-i[\frac{6\hbar}{2I} - 2\alpha]t} \right).\end{aligned}$$

5.19 Rotatore in campo magnetico (II)

L'Hamiltoniano di un rotatore isotropo in un campo magnetico uniforme è dato da

$$\mathcal{H} = \frac{L^2}{2I} + \alpha L_z.$$

All'istante $t = 0$ la sua funzione d'onda è

$$\psi(\vartheta, \phi, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} [Y_1^{+1}(\vartheta, \phi) + Y_1^{-1}(\vartheta, \phi)].$$

- 1) Qual'è la sua funzione d'onda al tempo t ?
- 2) Determinare l'istante t in cui la funzione d'onda è proporzionale a

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (Y_1^{+1}(\vartheta, \phi) - Y_1^{-1}(\vartheta, \phi)).$$

Soluzione

Il sistema è lo stesso considerato nell'esercizio 5.18.

All'istante $t > 0$ avremo:

$$\begin{aligned} \psi(\vartheta, \phi, t) &= e^{-i\frac{\mathcal{H}t}{\hbar}} \psi(\vartheta, \phi, t=0) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [Y_1^{+1}(\vartheta, \phi) e^{-i[\frac{\hbar}{I} + \alpha]t} + Y_1^{-1}(\vartheta, \phi) e^{-i[\frac{\hbar}{I} - \alpha]t}]. \end{aligned}$$

Per rispondere alla seconda domanda imponiamo che il rapporto tra i coefficienti delle due armoniche sia -1

$$\frac{e^{-i[\frac{\hbar}{I} - \alpha]t}}{e^{-i[\frac{\hbar}{I} + \alpha]t}} = e^{-2i\alpha t} = -1 \quad \Rightarrow \quad 2\alpha t = (2n+1)\pi \quad \Rightarrow \quad t = \frac{(2n+1)\pi}{2\alpha}.$$

5.20 Misura su un atomo d'idrogeno

Al tempo $t=0$ lo stato di un atomo d'idrogeno è descritto dalla funzione d'onda

$$\psi(\mathbf{r}, t=0) = \frac{1}{\sqrt{10}} (2\psi_{1,0,0} + \psi_{2,1,0} + \sqrt{2}\psi_{2,1,1} + \sqrt{3}\psi_{2,1,-1}).$$

dove le $\psi_{n,\ell,m}$ sono le autofunzioni dell'Hamiltoniano relative ai numeri quantici n, ℓ, m . Ignorando lo spin si determini:

- a) il valore di attesa dell'energia;
- b) l'espressione della funzione d'onda ad un successivo istante t ;
- c) la probabilità di trovare al tempo t il sistema nello stato con $\ell = 1, m = 1$.

Soluzione

- a) Detti $c_{n,\ell,m}$ i coefficienti dello sviluppo della funzione d'onda in autofunzioni dell'Hamiltoniano

$$\psi(\mathbf{r}, t=0) = \sum_{n,\ell,m} c_{n,\ell,m} \psi_{n,\ell,m},$$

poiché si verifica

$$\sum_{n,\ell,m} |c_{n,\ell,m}|^2 = \frac{1}{10} (4 + 1 + 2 + 3) = 1,$$

la funzione d'onda è normalizzata. Pertanto l'energia media è data da

$$\begin{aligned}\langle E \rangle &= \langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle = \sum_{n,\ell,m} |c_{n,\ell,m}|^2 E_n = \frac{1}{10} [4E_1 + (1+2+3)E_2] = \\ &= \frac{11}{20} E_1 = -\frac{11}{20} \frac{1}{2} m_e c^2 \alpha^2 = -\frac{11 \cdot 0.51}{40 \cdot 137^2} eV = -7.47 eV,\end{aligned}$$

essendo $E_2 = \frac{E_1}{4}$ e $m_e = 0.51 \frac{eV}{c^2}$.

b) All'istante t la funzione d'onda è

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r}, t) &= e^{-i\frac{\mathcal{H}t}{\hbar}} \psi(\mathbf{r}, t=0) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{10}} \left(2\psi_{1,0,0} e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} + \left[\psi_{2,1,0} + \sqrt{2}\psi_{2,1,1} + \sqrt{3}\psi_{2,1,-1} \right] e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} \right).\end{aligned}$$

c) Indicando la probabilità richiesta con P_{n11} abbiamo

$$\begin{aligned}P_{n,1,1}(t) &= |\langle n, 1, 1 | \psi(t) \rangle|^2 = |\langle n, 1, 1 | e^{-i\frac{\mathcal{H}t}{\hbar}} | \psi(0) \rangle|^2 = \\ &= \left| \langle n, 1, 1 | \frac{1}{\sqrt{10}} \left(2|1, 0, 0\rangle e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} + \left[|2, 1, 0\rangle + \sqrt{2}|2, 1, 1\rangle + \sqrt{3}|2, 1, -1\rangle \right] e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} \right) \right|^2 = \\ &= \left| \delta_{n,2} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{10}} e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} \right|^2 = \frac{1}{5} \delta_{n,2}.\end{aligned}$$

6

Teoria Perturbativa indipendente dal tempo

6.1 Particella su un segmento: perturbazione quadrata

Una particella di massa m è vincolata a muoversi su un segmento in presenza di una piccola buca di potenziale data da

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{se } x < 0 \text{ e } x > L, \\ -V_0, & \text{se } 0 < x < \frac{L}{2}, \\ 0 & \text{se } \frac{L}{2} < x < L. \end{cases}$$

Trattare la piccola buca (vedi figura 6.2) tra 0 e $\frac{L}{2}$ come una perturbazione rispetto al "normale" pozzo di potenziale e calcolare gli autovalori dell'energia al prim'ordine.

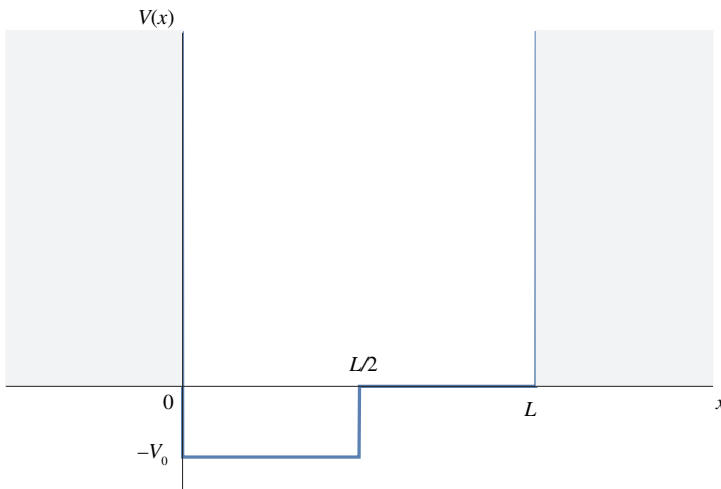


Figura 6.1. Pozzo di potenziale modificato da una buca

Soluzione

In assenza di perturbazione i livelli di energia e le relative autofunzioni sono:

$$E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}, \quad \psi_n^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}, \quad n = 1, 2, \dots$$

La correzione del prim'ordine ai livelli di energia è data da

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= \int_0^L dx \psi_n^*(x) H_1(x) \psi_n(x) = \\ &= \frac{2}{L} \int_0^{\frac{L}{2}} dx \sin^2 \frac{n\pi x}{L} (-V_0) = \\ &= -\frac{V_0}{L} \int_0^{\frac{L}{2}} dx \left[1 - \cos \frac{2n\pi x}{L} \right] = -\frac{V_0}{2}. \end{aligned}$$

La correzione è la stessa per tutti i livelli.

6.2 Particella su un segmento: perturbazione lineare

Utilizzando la teoria perturbativa al primo ordine, calcolare i livelli di energia per una buca quadrata infinita unidimensionale di larghezza L il cui fondo è stato reso obliquo come mostrato in figura 6.2.

Soluzione

La perturbazione è data da

$$\mathcal{H}_1 = \frac{V_0}{L} x \quad \text{per } 0 \leq x \leq L.$$

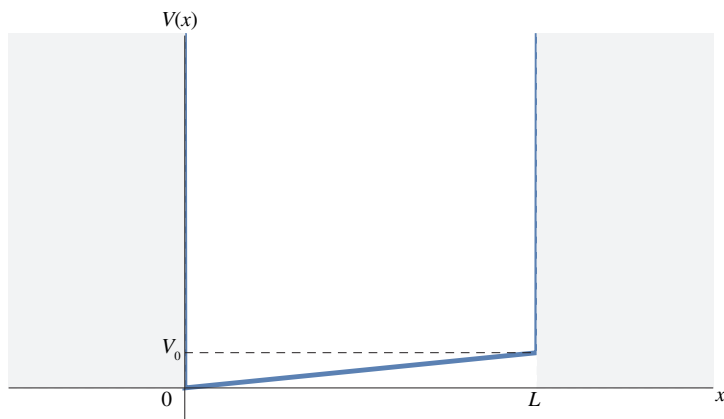


Figura 6.2. Pozzo di potenziale modificato da una retta

Autovalori e autofunzioni imperturbati sono

$$E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}, \quad \psi_n^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}, \quad n = 1, 2, \dots$$

La correzione al I ordine ai livelli è data da

$$E_n^{(1)} = \frac{V_0}{L} \frac{2}{L} \int_0^L dx x \sin^2 \frac{n\pi x}{L} = \frac{2V_0}{n^2 \pi^2} \int_0^{n\pi} dz z \sin^2 z = \frac{V_0}{2}.$$

La correzione è la stessa per tutti i livelli. Avremo quindi

$$E_n^{(0)} + E_n^{(1)} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} + \frac{V_0}{2}, \quad \forall n = 1, 2, \dots$$

6.3 Particella su un segmento: correzione sinusoidale

Una particella di massa m si trova in un pozzo di potenziale a pareti infinite. Il fondo viene modificato da

$$V(x) = 0 \quad \text{per } 0 < x < L$$

a

$$V'(x) = V_0 \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \quad \text{per } 0 < x < L.$$

Calcolare le correzioni al I ordine in V_0 a tutti i livelli energetici.

Soluzione

In assenza di perturbazione gli autovalori e le corrispondenti autofunzioni dell'energia sono:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}, \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

La correzione del prim'ordine ai livelli di energia è data da

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= \int_0^L dx \psi_n^*(x) V'(x) \psi_n(x) = \\ &= \frac{2V_0}{L} \int_0^L dx \sin^2 \frac{n\pi x}{L} \sin \frac{\pi x}{L} = \\ &= \frac{2V_0}{\pi} \left[\frac{1}{2} \int_0^\pi d\alpha \sin \alpha - \frac{1}{2} \int_0^\pi d\alpha \cos 2n\alpha \sin \alpha \right] = \\ &= \frac{2V_0}{\pi} \left\{ 1 - \frac{1}{2} \int_0^\pi d\alpha \frac{1}{2} [\sin(1+2n)\alpha + \sin(1-2n)\alpha] \right\} = \\ &= \frac{2V_0}{\pi} \left[1 - \frac{1}{4} \left(\frac{2}{1+2n} + \frac{2}{1-2n} \right) \right] = \\ &= \frac{8V_0 n^2}{\pi(4n^2 - 1)}. \end{aligned}$$

6.4 Particella su un segmento in presenza di potenziale δ

Una particella di massa m è immersa in una buca infinita di potenziale di larghezza a in una dimensione:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } 0 \leq x \leq L. \\ \infty, & \text{altrove.} \end{cases}$$

Essa è soggetta ad una perturbazione data dal potenziale

$$W(x) = L\omega_0 \delta\left(x - \frac{L}{2}\right),$$

dove ω_0 è una costante reale.

- Calcolare al prim'ordine in w_0 le modificazioni ai livelli di energia della particella apportate da $W(x)$.
- Risolvere il problema esattamente, mostrando che i valori dell'energia sono dati da una delle due equazioni:

$$\sin(kL/2) = 0$$

oppure

$$\tan(kL/2) = -\frac{\hbar^2 k}{mL\omega_0}.$$

Discutere i risultati ottenuti in funzione del segno e della grandezza di ω_0 . Fare vedere che, nel limite $\omega_0 \rightarrow 0$, si ritrovano i risultati del punto a).

Soluzione

- In assenza di perturbazione gli autovalori e le corrispondenti autofunzioni dell'energia sono:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}, \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

La correzione del prim'ordine ai livelli di energia è data da

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= \int_0^L dx \psi_n^*(x) W(x) \psi_n(x) = \\ &= \frac{2}{L} L\omega_0 \int_0^L dx \sin^2 \frac{n\pi x}{L} \delta\left(x - \frac{L}{2}\right) = \\ &= 2\omega_0 \sin^2 \frac{n\pi}{2} = \begin{cases} 0 & \text{per } n \text{ pari,} \\ 2\omega_0 & \text{per } n \text{ dispari.} \end{cases} \end{aligned}$$

- Per trovare la soluzione esatta, imponiamo che la funzione d'onda, escludendo il punto $x = L/2$, abbia la forma di una soluzione per una particella libera che si annulli in $x = 0$ e $x = L$.

$$\psi(x) = \begin{cases} A \sin kx & \text{per } 0 \leq x \leq L/2, \\ B \sin k(L-x) & \text{per } L/2 \leq x \leq L. \end{cases}$$

La continuità della funzione d'onda comporta che

$$\psi\left(\frac{L}{2}^{-}\right) = \psi\left(\frac{L}{2}^{+}\right) \Rightarrow A \sin \frac{kL}{2} = B \sin \frac{kL}{2}$$

cioè

$$A = B \quad \text{oppure} \quad A \neq B \text{ e } \sin \frac{kL}{2} = 0.$$

Invece la derivata prima deve essere discontinua per la presenza della δ nel potenziale, vedi (2.21):

$$\psi'\left(\frac{L}{2}^{+}\right) - \psi'\left(\frac{L}{2}^{-}\right) = \frac{2m}{\hbar^2} L \omega_0 \psi\left(\frac{L}{2}\right).$$

Imponendo le due condizioni possiamo distinguere due casi:

1. caso $A \neq B$ e $\sin \frac{kL}{2} = 0$. Quest'ultima relazione comporta che

$$\frac{kL}{2} = n\pi \quad n = 0, 1, \dots \Rightarrow k = \frac{2n\pi}{L}.$$

Quindi, anche nel calcolo esatto, ritroviamo la parte di spettro del pozzo di potenziale corrispondente alle autofunzioni dispari rispetto a $x = L/2$. Le stesse autofunzioni non sono modificate dalla perturbazione. Infatti, dalla condizione su ψ' si ha

$$-Ak \cos \frac{kL}{2} - Bk \cos \frac{kL}{2} = 0 \Rightarrow A = -B.$$

La funzione d'onda per $L/2 \leq x \leq L$ è data da

$$\begin{aligned} \psi(x) &= -A \sin k(L-x) = A \sin k(x-L) = \\ &= A \sin kx \cos kL - A \cos kx \sin kL = A \sin kx, \end{aligned}$$

essendo $\cos kL = 1$ e $\sin kL = 0$. Possiamo dire che, poiché si tratta di funzioni d'onda che si azzerano in $x = L/2$, esse non sentono la presenza del nuovo termine di potenziale che solo in tale punto è non nullo.

2. caso $A = B$, che corrisponde a funzioni d'onda pari rispetto a $x = L/2$. Dalla condizione su ψ' si ha

$$-Ak \cos \frac{kL}{2} - Ak \cos \frac{kL}{2} = \frac{2m}{\hbar^2} L \omega_0 A \sin \frac{kL}{2} \Rightarrow \tan \frac{kL}{2} = -\frac{\hbar^2 k}{mL \omega_0}.$$

Per trovare questa parte dello spettro risolviamo graficamente questa equazione cercando le intersezioni tra le due curve

$$y = \tan \frac{kL}{2} \quad \text{e} \quad y = -\frac{\hbar^2 k}{mL \omega_0} = -\frac{2\hbar^2}{mL^2 \omega_0} \frac{kL}{2}.$$

In figura 6.3 vediamo le soluzioni per due valori di segno opposto di ω_0 . Quando $\omega_0 \rightarrow 0$ le soluzioni tendono ai valori (segnati con un cerchietto in figura)

$$\frac{kL}{2} = (2j+1) \frac{\pi}{2} \Rightarrow k = \frac{(2j+1)\pi}{L}, \quad \text{con } j = 0, 1, \dots$$

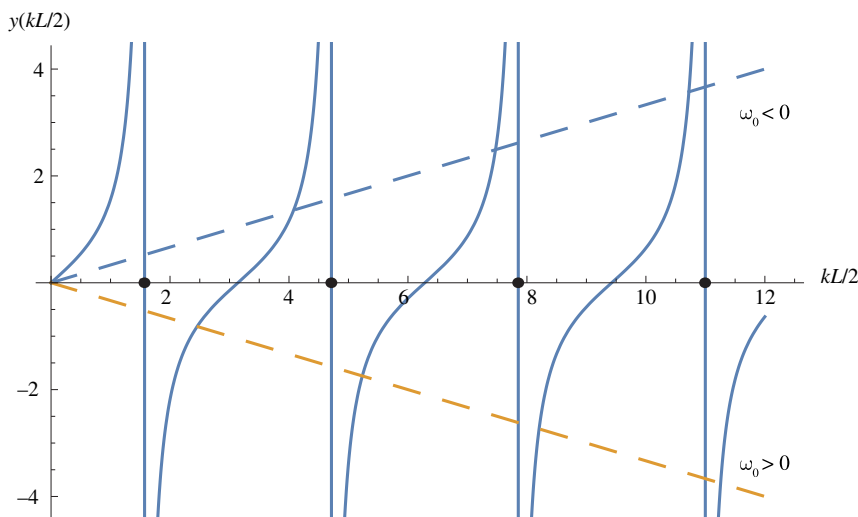


Figura 6.3. Soluzione grafica dell'equazione per i livelli di energia corrispondenti ad autofunzioni simmetriche. Le rette tratteggiate corrispondono a due diversi valori di ω_0

cioè

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}, \quad n = 1, 3, 5, \dots$$

Si riottengono cioè gli autovalori con n dispari del caso imperturbato. Notiamo che la soluzione che nel limite $\omega_0 \rightarrow 0^-$ corrisponde a $k = \pi/L$ compare solo se

$$\frac{2\hbar^2}{mL^2|\omega_0|} > 1 \quad \Rightarrow \quad |\omega_0| < \frac{2\hbar^2}{mL^2}.$$

6.5 Particella in un quadrato: accoppiamento tra i gradi di libertà

Si calcolino autofunzioni e autovalori dell'energia per una particella di massa m confinata in un quadrato di lato L :

$$0 \leq x \leq L \quad 0 \leq y \leq L.$$

Introdotta poi una perturbazione $\mathcal{H}^1 = Cxy$, si trovino le correzioni al I ordine per il livello fondamentale ed il primo livello eccitato.

Soluzione

Lo spazio delle funzioni d'onda è il prodotto tensoriale degli spazi relativi a due pozzi di potenziale secondo due direzioni normali. Autovalori e autofunzioni imperturbati

sono dati da:

$$\begin{aligned}\psi_{k,n}(x,y) &= \psi_k(x) \psi_n(y) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{k\pi x}{L} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi y}{L} \\ E_{k,n}^0 &= E_k^0 + E_n^0 = \frac{\pi^2 \hbar^2 (k^2 + n^2)}{2mL^2} \\ n &= 1, 2, \dots\end{aligned}$$

Per calcolare gli effetti della perturbazione sono necessari i seguenti elementi di matrice:

$$\begin{aligned}(\psi_1(x), x \psi_1(x)) &= \frac{2}{L} \int_0^L dx x \sin^2 \frac{\pi x}{L} = \frac{L}{\pi^2} \int_0^\pi dx x (1 - \cos 2x) = \frac{L}{2} \\ (\psi_2(x), x \psi_2(x)) &= \frac{2}{L} \int_0^L dx x \sin^2 \frac{2\pi x}{L} = \frac{2}{L} \frac{L^2}{\pi^2} \int_0^{2\pi} dx x \sin^2 x = \frac{L}{2} \\ (\psi_1(x), x \psi_2(x)) &= \frac{2}{L} \int_0^L dx x \sin \frac{\pi x}{L} \sin \frac{2\pi x}{L} = \frac{2}{L} \frac{L^2}{\pi^2} \int_0^\pi dx x \sin x \sin 2x = \\ &= \frac{4L}{\pi^2} \int_0^\pi dx x \sin^2 x \cos x = \frac{1}{3} \frac{4L}{\pi^2} \int_0^\pi d \cos x (1 - \cos^2 x) = \\ &= -\frac{16}{9} \frac{L}{\pi^2}.\end{aligned}$$

Per lo stato fondamentale, che è non degenerare, abbiamo:

$$E_{1,1}^1 = (\psi_{1,1}(x,y), Cxy \psi_{1,1}(x,y)) = C (\psi_1(x), x \psi_1(x))^2 = \frac{CL^2}{4}.$$

Per il secondo livello siamo in presenza di degenerazione tra gli stati $\psi_{1,2}$ e $\psi_{2,1}$. Occorre diagonalizzare la matrice

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B & A \end{pmatrix}$$

dove

$$A = (\psi_{1,2}(x,y), Cxy \psi_{1,2}(x,y)) = C (\psi_1(x), x \psi_1(x)) (\psi_2(y), y \psi_2(y)) = \frac{CL^2}{4}$$

$$B = (\psi_{1,2}(x,y), Cxy \psi_{2,1}(x,y)) = C (\psi_1(x), x \psi_2(x))^2 = \frac{256CL^2}{81\pi^4}.$$

Gli autovalori $A \pm B$ danno le correzioni al primo stato eccitato:

$$E_{1,2}^1 = CL^2 \left(\frac{1}{4} \pm \frac{256}{81\pi^4} \right).$$

6.6 Particella su una circonferenza in presenza di perturbazione

Una particella di massa m è libera di muoversi su una circonferenza di raggio R . Viene applicato un potenziale

$$V(\theta) = V_0 \sin \theta \cos \theta,$$

dove θ è la posizione angolare sulla circonferenza. Individuate le funzioni d'onda del sistema imperturbato che diagonalizzano la matrice corrispondente a V , calcolare i livelli di energia al secondo ordine perturbativo.

Soluzione

L'Hamiltoniano contiene il solo termine cinetico di rotazione intorno al centro della circonferenza. Imponendo la condizione di periodicità sulla funzione d'onda, si trova:

$$E_n = \frac{n^2 \hbar^2}{2mR^2}, \quad \psi_n(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{in\theta}, \quad \text{con } n = 0, \pm 1, \dots$$

Il livello fondamentale è non degenero mentre tutti gli altri sono doppiamente degeneri. Per il calcolo delle correzioni valutiamo prima gli elementi di matrice della perturbazione.

$$\begin{aligned} \langle n|V|m\rangle &= \frac{V_0}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta e^{i(m-n)\theta} \sin \theta \cos \theta = \\ &= \frac{V_0}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\theta e^{i(m-n)\theta} \sin 2\theta = \\ &= \frac{V_0}{8i\pi} \left[\int_0^{2\pi} d\theta e^{i(m-n+2)\theta} - \int_0^{2\pi} d\theta e^{i(m-n-2)\theta} \right] = \\ &= \frac{V_0}{4i} [\delta_{m,n-2} - \delta_{m,n+2}]. \end{aligned} \quad (6.1)$$

Calcoliamo prima le correzioni al I e II ordine all'energia dello stato fondamentale:

$$E_0^{(1)} = \langle 0|V|0\rangle = 0,$$

$$E_0^{(2)} = \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle n|V|0\rangle|^2}{E_0 - E_n} = \frac{V_0^2}{16} \left[\frac{1}{E_0 - E_2} + \frac{1}{E_0 - E_{-2}} \right] = -\frac{V_0^2 m R^2}{16 \hbar^2}.$$

Passiamo ora a calcolare le correzioni al I ordine per gli autovalori degeneri. Occorre diagonalizzare la matrice che rappresenta V nel sottospazio a 2 dimensioni sotteso da ciascun autovalore. Dall'espressione per $\langle n|V|m\rangle$ si comprende immediatamente che solo nel caso $n = 1$ si ha una matrice non nulla:

$$\begin{pmatrix} \langle +1|V|+1\rangle & \langle +1|V|-1\rangle \\ \langle -1|V|+1\rangle & \langle -1|V|-1\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{V_0}{4i} \\ -\frac{V_0}{4i} & 0 \end{pmatrix}$$

che ha autovalori

$$E_1^{(1,+)} = \frac{V_0}{4}, \quad E_1^{(1,-)} = -\frac{V_0}{4}$$

e corrispondenti autostati

$$|\psi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|-1\rangle + |1\rangle) \quad |\psi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle - |-1\rangle).$$

Gli autovalori sono le correzioni al I ordine per il livello $n = 1$. Per tutti gli altri livelli, come si è detto, le matrici e quindi le correzioni sono nulle.

Per quanto riguarda le correzioni al II ordine, consideriamo prima quelle relative al primo livello usando, per $n = \pm 1$, la base costituita da $|\psi_+\rangle$ e $|\psi_-\rangle$. Tenendo conto del fatto che, per $n \neq 1$,

$$\langle \psi_+ | V | n \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle -1 | V | n \rangle - i \langle 1 | V | n \rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{V_0}{4t} (\delta_{n,-3} - \delta_{n,1} - i \delta_{n,-1} + i \delta_{n,3}),$$

mentre ovviamente nella nuova base $\langle \psi_+ | V | \psi_- \rangle = 0$, si ottiene

$$\begin{aligned} E_1^{(2,+)} &= \sum_{n \neq \pm 1} \frac{|\langle \psi_+ | V | n \rangle|^2}{E_1 - E_n} = \frac{V_0^2}{32} \left[\frac{1}{E_1 - E_3} + \frac{1}{E_1 - E_{-3}} \right] = \\ &= \frac{2mV_0^2 R^2}{16\hbar^2} \frac{1}{1-9} = -\frac{mV_0^2 R^2}{64\hbar^2}. \end{aligned}$$

Lo stesso risultato si ha per $E_1^{(2,-)}$ in quanto i coefficienti dello sviluppo di $|\psi_-\rangle$ e di $|\psi_+\rangle$ nella vecchia base hanno lo stesso modulo.

Per $m \neq \pm 1$ non occorre diagonalizzare le matrici nei sottospazi degeneri perché gli elementi non diagonali, per la (6.1), sono tutti nulli. Si ha quindi

$$\begin{aligned} E_m^{(2)} &= \sum_{n \neq m} \frac{|\langle n | V | m \rangle|^2}{E_m - E_n} = \frac{V_0^2}{16} \left[\frac{1}{E_m - E_{m+2}} + \frac{1}{E_m - E_{m-2}} \right] = \\ &= -\frac{mV_0^2 R^2}{4\hbar^2} \frac{1}{m^2 - 4}. \end{aligned}$$

6.7 Due particelle debolmente interagenti su una circonferenza

Due particelle di massa m sono vincolate a stare su una circonferenza di raggio R . Si calcolino i livelli energetici e si scrivano le autofunzioni.

Si supponga poi di accendere un'interazione tra le particelle con potenziale

$$V = V_0 \cos(\phi_1 - \phi_2),$$

dove ϕ_1 e ϕ_2 sono le coordinate angolari che identificano la posizione delle due particelle sulla circonferenza.

- Si scriva l'equazione di Schrödinger usando le variabili $\alpha = \frac{\phi_1 + \phi_2}{2}$ e $\beta = \phi_1 - \phi_2$ e si mostri la sua separazione nelle nuove variabili determinando le proprietà di periodicità della funzione d'onda nelle nuove variabili.
- Si calcoli, infine, perturbativamente al primo ordine le correzioni agli autovalori dell'energia.

Soluzione

- Poiché l'Hamiltoniano si può scrivere nella forma

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 \quad \text{dove} \quad \mathcal{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2mR^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi_i^2},$$

l'equazione di Schrödinger si separa nelle due variabili ϕ_1 e ϕ_2 . Le funzioni d'onda devono soddisfare la condizione di periodicità in queste variabili: $\psi(\phi_i + 2\pi) = \psi(\phi_i)$. Le autofunzioni e gli autovalori di $\mathcal{H}$ sono quindi:

$$\psi_{k,l}(\phi_1, \phi_2) = \psi_k(\phi_1) \psi_l(\phi_2) \quad E_{k,l} = E_k + E_l$$

dove

$$\psi_n(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{in\phi} \quad E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{2mR^2} \quad n = 0, \pm 1, \dots$$

In presenza del potenziale $V = V_0 \cos(\phi_1 - \phi_2)$ l'equazione di Schrödinger non è più separabile nelle variabili ϕ_1 e ϕ_2 .

Introducendo, invece, le nuove variabili

$$\alpha = \frac{\phi_1 + \phi_2}{2} \quad \text{e} \quad \beta = \phi_1 - \phi_2,$$

l'Hamiltoniano si separa in due termini dipendenti da una sola variabile:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{CM} + \mathcal{H}_r$$

dove

$$\mathcal{H}_{CM} = -\frac{\hbar^2}{2MR^2} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} \quad \text{e} \quad \mathcal{H}_r = -\frac{\hbar^2}{2\mu R^2} \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} + V(\beta).$$

$\mathcal{H}_{CM}$ corrisponde al moto circolare libero del "Centro di massa" con massa $M = 2m$ e posizione angolare $\alpha \in [0, 2\pi]$ mentre $\mathcal{H}_r$ corrisponde al moto della massa ridotta $\mu = m/2$ in presenza del potenziale $V(\beta)$ con $\beta \in [0, 2\pi]$.

In assenza di $V(\beta)$ abbiamo le autofunzioni

$$\Psi_{k,l}(\alpha, \beta) = \Psi_k(\alpha) \Phi_l(\beta) \quad \text{relative agli autovalori} \quad E_{k,l} = \frac{\hbar^2 k^2}{2MR^2} + \frac{\hbar^2 l^2}{2\mu R^2}$$

con

$$\Psi_n(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{in\phi} \quad \Phi_n(\beta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{in\beta} \quad n = 0, \pm 1, \dots$$

b) La perturbazione attiene al solo Hamiltoniano $\mathcal{H}_r$. Notiamo che, poiché

$$\langle \Phi_k | V | \Phi_{-k} \rangle = \frac{V_0}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-ik\beta} \cos \beta e^{-ik\beta} d\beta = 0 \quad \forall k,$$

sia la correzione allo stato fondamentale (non degenera) che le correzioni agli stati eccitati (doppiamente degeneri) sono nulle; in quest'ultimo caso, infatti, le matrici da diagonalizzare hanno elementi tutti nulli.

6.8 Rotatore carico in campo elettrico

Un rotatore piano è un sistema costituito da due particelle rigidamente connesse che ruota in un piano.

- Sia m la massa ridotta delle due particelle e a la loro distanza. Determinare autovalori e autofunzioni dell'energia.
- Supporre che, essendo le particelle cariche, il sistema abbia momento di dipolo elettrico $\mathbf{d}$ e che sia immerso in un debole campo elettrico uniforme $\mathbf{E}$ nel piano di rotazione. Considerando l'interazione con il campo elettrico come perturbazione, valutare la prima correzione non nulla ai livelli di energia.

Soluzione

- Detto $I = ma^2$ il momento d'inerzia, l'Hamiltoniano è dato dal puro termine cinetico:

$$\mathcal{H} = \frac{L^2}{2I} = \frac{L_z^2}{2I} = -\frac{\hbar^2}{2I} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

dove abbiamo assunto che il piano di moto sia il piano xy e φ la coordinata angolare in tale piano. Autovalori e autofunzioni dei $\mathcal{H}$ sono

$$E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2I} \quad \psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Gli autovalori sono doppiamente degeneri per ogni m fuorché per $m = 0$.

- La perturbazione è data, supponendo il campo elettrico $\mathbf{E}$ diretto lungo l'asse x , da

$$\mathcal{H}' = -dE \cos \varphi.$$

Premettiamo il calcolo del generico elemento di matrice di $\cos \varphi$ nella base di $\mathcal{H}$:

$$\begin{aligned} \langle n | \cos \varphi | m \rangle &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi e^{i(m-n)\varphi} \frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2} = \\ &= \frac{1}{4\pi} \left[\int_0^{2\pi} d\varphi e^{i(m-n+1)\varphi} + \int_0^{2\pi} d\varphi e^{i(m-n-1)\varphi} \right] = \\ &= \frac{1}{2} [\delta_{m,n-1} + \delta_{m,n+1}]. \end{aligned}$$

Sia nel caso di $n^2 = 0$ (assenza di degenerazione) che nel caso $n^2 \neq 0$ le correzioni dell'energia al I ordine sono nulle perché tutti gli elementi di matrice lo sono; ad esempio :

$$E_{n,-n}^{(1)} = -dE \langle n | \cos \varphi | -n \rangle = -dE [\delta_{-n,n-1} + \delta_{-n,n+1}] = 0 \quad \forall n = 0, \pm 1, \dots$$

Occorre quindi calcolare la correzione al II ordine:

$$\begin{aligned}
 E_n^{(2)} &= (dE)^2 \sum_{m \neq n} \frac{|\langle n | \cos \varphi | m \rangle|^2}{E_n - E_m} = \\
 &= \frac{(dE)^2}{4} \left[\frac{1}{E_n - E_{n-1}} + \frac{1}{E_n - E_{n+1}} \right] = \\
 &= \frac{(dE)^2}{4} \frac{2I}{\hbar^2} \left[\frac{1}{n^2 - (n-1)^2} + \frac{1}{n^2 - (n+1)^2} \right] = \\
 &= I \left(\frac{dE}{\hbar} \right)^2 \frac{1}{4n^2 - 1}.
 \end{aligned}$$

Notiamo che la correzione al II ordine può essere calcolata senza tener conto della degenerazione, poiché nei termini della sommatoria in cui si annulla il denominatore, che sono quelli con $m = -n$, sono nulli anche i numeratori.

Notiamo, infine, che, dato che $E_n^{(2)}$ dipende ancora da n^2 , la degenerazione non viene eliminata.

6.9 Rotatore piano: correzioni dovute alla forza peso

Un corpo di massa m è vincolato, in un piano verticale, a ruotare intorno ad asse orizzontale mediante un'asta di massa trascurabile e lunghezza l . Trattando la forza peso in maniera perturbativa, si calcolino le correzioni al II ordine per i livelli di energia.

Soluzione

La soluzione è analoga a quella del problema (6.8). L'Hamiltoniano imperturbato contiene solo energia cinetica

$$\mathcal{H}_0 = \mathcal{T} = \frac{L_z^2}{2I} = -\frac{\hbar^2}{2I} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

dove $I = ml^2$ è il momento d'inerzia e ϕ è l'angolo di rotazione intorno all'asse z che identifichiamo con l'asse di rotazione. Ponendo $\phi = 0$ l'angolo relativo alla posizione più bassa e fissando lo zero dell'energia potenziale a $\phi = \pi/2$, la perturbazione può essere scritta come

$$\mathcal{H}_1(\phi) = -mgl \cos \phi.$$

Le autofunzioni di $\mathcal{H}_0$ sono le autofunzioni di L_z :

$$\psi_n(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{in\phi}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

e corrispondono agli autovalori

$$E_n^0 = \frac{n^2 \hbar^2}{2I}$$

doppiamente degeneri per $n \neq 0$.

Calcoliamo prima gli elementi di matrice

$$\begin{aligned}
 \langle n | \mathcal{H}_1 | k \rangle &= -\frac{mgl}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi e^{-in\phi} \cos \phi e^{ik\phi} = \\
 &= -\frac{mgl}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi e^{i(k-n)\phi} \frac{e^{i\phi} + e^{-i\phi}}{2} = \\
 &= -\frac{mgl}{2} (\delta_{k,n+1} + \delta_{k,n-1}) .
 \end{aligned}$$

La correzione al I ordine risulta quindi nulla

$$E_n^1 = 0$$

in quanto è nulla la correzione per lo stato fondamentale, l'unico non degenero, mentre per gli altri stati le matrici da diagonalizzare hanno elementi tutti nulli.

Le correzioni al II ordine possono essere calcolate dalla teoria non degenera in quanto, per la presenza delle δ negli elementi di matrice, contribuiscono solo termini con denominatori diversi da zero.

$$\begin{aligned}
 E_n^2 &= \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m | \mathcal{H}_1 | n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \\
 &= \left(\frac{mgl}{2} \right)^2 \left[\frac{1}{E_n^{(0)} - E_{n+1}^{(0)}} + \frac{1}{E_n^{(0)} - E_{n-1}^{(0)}} \right] = \\
 &= \frac{m^3 g^2 l^4}{\hbar^2} \frac{1}{4n^2 - 1} .
 \end{aligned}$$

6.10 Oscillatore armonico: correzione anarmonica

Si aggiunga al potenziale elastico l'interazione

$$\mathcal{H}^1 = \lambda x^4 .$$

Calcolare lo spostamento dei livelli di energia al I ordine perturbativo.

Soluzione

Per il calcolo possiamo utilizzare il risultato dell'esercizio 2.19:

$$E_n^1 = \langle n^{(0)} | \mathcal{H}^1 | n^{(0)} \rangle = \lambda \langle n^{(0)} | x^4 | n^{(0)} \rangle = \frac{3\hbar^2 \lambda}{4m^2 \omega^2} [2n^2 + 2n + 1] .$$

Notiamo che l'approssimazione al I ordine è giustificata solo per i livelli più bassi poiché, per quanto λ sia piccolo, la correzione cresce con n^2 .

6.11 Oscillatore armonico: correzione cubica

Determinare, mediante la teoria perturbativa, gli autovalori dell'energia all'ordine A^2 per una particella di massa m che si muove lungo l'asse x sotto l'azione del potenziale

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 + Ax^3.$$

Soluzione

Essendo nota la soluzione per il potenziale armonico, possiamo scrivere

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 \quad \text{dove} \quad \mathcal{H}_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 \quad \text{e} \quad \mathcal{H}_1 = Ax^3$$

e considerare $\mathcal{H}_1$ come perturbazione.

Utilizzando le formule (A.13, A.15), si trova facilmente

$$\begin{aligned} \langle m|x^3|n\rangle &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2} \langle m|(a+a^\dagger)^3|n\rangle = \\ &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2} \left\{ \sqrt{n(n-1)(n-2)} \delta_{m,n-3} + 3\sqrt{n^3} \delta_{m,n-1} + \right. \\ &\quad \left. + 3\sqrt{(n+1)^3} \delta_{m,n+1} + \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)} \delta_{m,n+3} \right\}. \end{aligned}$$

La correzione al I ordine per il livello imperturbato n -simo

$$E_n^{(0)} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$$

è data da (A.69)

$$E_n^{(1)} = A \langle n|x^3|n\rangle = 0.$$

La correzione al II ordine è data da (A.70)

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= A^2 \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m|x^3|n\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = A^2 \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^3 \frac{1}{\hbar\omega} \left\{ \frac{n(n-1)(n-2)}{3} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{(n+1)(n+2)(n+3)}{-3} + 9\frac{(n+1)^3}{-1} + 9n^3 \right\} = \\ &= -\frac{\hbar^2 A^2}{8m^3 \omega^4} (30n^2 + 30n + 11). \end{aligned}$$

6.12 Oscillatore armonico: correzione relativistica

Una particella di massa m si muove in un potenziale armonico

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2.$$

L'energia cinetica $T = \frac{p^2}{2m}$ può essere considerata come un'approssimazione per velocità piccole rispetto a c dell'espressione relativistica:

$$T = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}.$$

Determinare, mediante la teoria perturbativa, la correzione ai livelli di energia all'ordine $\frac{1}{c^2}$.

Soluzione

Sviluppando in serie l'espressione per l'energia cinetica relativistica abbiamo

$$T = mc^2 \sqrt{1 + \frac{p^2}{m^2 c^2}} \simeq mc^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2}$$

dove abbiamo trascurato i termini di ordine superiore a $(\frac{p}{c})^4$. Il primo termine è l'energia a riposo contribuisce solo a ridefinire la costante arbitraria additiva dell'energia. In questa approssimazione all'Hamiltoniano dell'oscillatore armonico si aggiunge il termine di perturbazione

$$\mathcal{H}_1 = -\frac{p^4}{8m^3 c^2}.$$

Per calcolare le modifiche ai livelli all'ordine $\frac{1}{c^2}$ usiamo la teoria perturbativa al I ordine in $\mathcal{H}_1$. Dobbiamo, quindi, calcolare gli elementi diagonali della matrice di p^4 nella base dell'energia dell'oscillatore armonico. Questo si può fare usando l'espressione per p in termini degli operatori di creazione e distruzione oppure mediante le funzioni d'onda nella rappresentazione della posizione. Seguiremo un'altra strada riportandoci al calcolo già fatto degli elementi di matrice di x^2 e x^4 (vedi problemi 2.18 e 2.19). $\mathcal{H}_1$ può essere riscritto nella forma

$$\mathcal{H}_1 = -\frac{1}{2mc^2} \left(\frac{p^2}{2m} \right) = -\frac{1}{2mc^2} \left(\mathcal{H}_0 - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right)^2.$$

Gli elementi richiesti sono dati da

$$\begin{aligned} \langle n | \mathcal{H}_1 | n \rangle &= -\frac{1}{2mc^2} \left(\langle n | \mathcal{H}_0^2 | n \rangle - \frac{1}{2} m \omega^2 \langle n | \mathcal{H}_0 x^2 | n \rangle - \frac{1}{2} m \omega^2 \langle n | x^2 \mathcal{H}_0 | n \rangle + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{4} m^2 \omega^4 \langle n | x^4 | n \rangle \right) = \\ &= -\frac{1}{2mc^2} \left(E_n^2 - m \omega^2 E_n \langle n | x^2 | n \rangle + \frac{1}{4} m^2 \omega^4 \langle n | x^4 | n \rangle \right) = \\ &= -\frac{1}{2mc^2} \left[E_n^2 - m \omega^2 E_n \frac{E_n}{m \omega^2} + \frac{1}{4} m^2 \omega^4 \frac{3 \hbar^2}{4 m^2 \omega^2} (2n^2 + 2n + 1) \right] = \\ &= -\frac{3 \hbar^2 \omega^2}{32 mc^2} (2n^2 + 2n + 1). \end{aligned}$$

6.13 Oscillatore armonico anisotropo

Un oscillatore armonico tridimensionale ha una costante elastica k' lungo l'asse z leggermente diversa dalle costanti k lungo gli assi x e y , cioè la sua energia potenziale è

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2}k(x^2 + y^2) + \frac{1}{2}k'z^2.$$

Si scriva la funzione d'onda dello stato fondamentale. Notare che essa non rappresenta uno stato di momento angolare definito. Perché?

Al prim'ordine in $(k - k')$ quali sono gli stati di momento angolare diverso da 0 presenti nello stato fondamentale?

Soluzione

Lo spazio delle funzioni d'onda è il prodotto tensoriale degli spazi relativi a tre oscillatori disposti lungo i tre assi. Ponendo

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad \text{e} \quad \sqrt{\frac{k'}{m}}$$

e, utilizzando l'espressione A.16 per le autofunzioni dell'Oscillatore Armonico, si ottiene

$$\begin{aligned} \psi_{0,0,0}(x, y, z) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{m\omega'}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2+y^2)} e^{-\frac{m\omega'}{2\hbar}z^2} = \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{m\omega'}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2+y^2+z^2)} e^{-\frac{m(\omega'-\omega)}{2\hbar}z^2} = \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{m\omega'}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(r^2)} e^{-\frac{m(\omega'-\omega)}{2\hbar}r^2 \cos^2 \theta}. \end{aligned}$$

La dipendenza esponenziale da $\cos^2 \theta$ segnala la presenza di contributi da tutte le autofunzioni di $\mathcal{L}^2$. ψ non dipende invece da ϕ , quindi è autofunzione di $\mathcal{L}_z$ corrispondente all'autovalore nullo.

Per il calcolo perturbativo poniamo

$$V(x, y, z) = V_0(x, y, z) + V_1(z)$$

dove

$$V_0(x, y, z) = V(r) = \frac{1}{2}kr^2 \quad \text{e} \quad V_1(z) = \frac{1}{2}(k' - k)z^2.$$

Al I ordine si hanno, tenendo conto delle proprietà di fattorizzazione delle funzioni d'onda e dell'esercizio 2.18, i seguenti risultati:

$$E_0^1 = \langle 000 | V_1 | 000 \rangle = \frac{1}{2}(k' - k) \int dz z^2 |\psi_0(z)|^2 = \frac{1}{2}(k' - k) \langle z^2 \rangle_0 = \frac{\hbar}{4} \frac{k' - k}{\sqrt{km}}.$$

Poiché

$$\langle j | z^2 | 0 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} [\sqrt{2} \delta_{j,2} + \delta_{j,0}],$$

abbiamo

$$|0^1\rangle = \sum_{m \neq 0} \frac{\langle m|V_1|0\rangle}{E_0 - E_m} |m\rangle = \frac{1}{2} (k' - k) \left[\frac{\sqrt{2}\hbar}{2m\omega} \frac{1}{2\hbar\omega} |2\rangle \right] = \frac{k' - k}{4\sqrt{2}k} |2\rangle$$

e, infine,

$$\begin{aligned} \psi'_0(x, y, z) &= \psi_0(x) \psi_0(y) \left[\psi_0(z) + \frac{k' - k}{4\sqrt{2}k} \psi_2(z) \right] = \\ &= \psi_0(x, y, z) \left[1 - \frac{1}{2\sqrt{2}} (4z^2 - 1) \frac{k' - k}{4\sqrt{2}k} \right], \end{aligned}$$

dove si è tenuto conto del fatto che, per le (A.16, A.20),

$$\psi_2(z) = \psi_0(z) \left[-\frac{1}{2\sqrt{2}} (4z^2 - 1) \right].$$

Poiché $z^2 = r^2 \cos^2 \theta$, alla funzione d'onda al I ordine contribuiscono gli stati di momento angolare con $\ell = 0, 2$, come si evince dalle (A.36).

6.14 Oscillatore armonico carico in campo elettrico

Considerare una particella di massa m e carica q in presenza di forza elastica e campo elettrico costante:

$$V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 - q\mathcal{E}x.$$

Calcolare in teoria perturbativa le correzioni prodotte dalla presenza del campo elettrico ai livelli di energia al I e II ordine e ai corrispondenti autoket al I ordine. Confrontare i risultati con la soluzione esatta.

Soluzione

Detto

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 \quad \text{dove} \quad \mathcal{H}_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \quad \text{e} \quad \mathcal{H}_1 = -q\mathcal{E}x,$$

l'Hamiltoniano del sistema, possiamo calcolare immediatamente la correzione al I ordine ai livelli energetici utilizzando il risultato per $\langle x \rangle_n$ trovato nell'esercizio 2.17:

$$E_n^1 = 0 \quad \forall n \in N.$$

Calcoliamo ora la correzione a I ordine per i ket, utilizzando sempre i risultati dell'esercizio 2.17:

$$\begin{aligned} |n\rangle &= |n^0\rangle - q\mathcal{E} \sum_{m \neq n} \frac{\langle m^0|x|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0} |m^0\rangle = \\ &= |n^0\rangle - q\mathcal{E} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[\frac{\sqrt{n}|(n-1)^0\rangle}{\hbar\omega(n-n+1)} + \frac{\sqrt{n+1}|(n+1)^0\rangle}{\hbar\omega(n-n-1)} \right] = \\ &= |n^0\rangle + q\mathcal{E} \sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega^3}} \left[\sqrt{n+1}|(n+1)^0\rangle - \sqrt{n}|(n-1)^0\rangle \right]. \end{aligned}$$

L'effetto della perturbazione al I ordine è quindi quello di miscelare ciascuno stato stazionario con gli stati adiacenti.

La correzione al II ordine ai livelli dell'energia è data da:

$$E_n^2 = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^0 | \mathcal{H}^1 | n^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} = q^2 \mathcal{E}^2 \frac{\hbar}{2m\omega} \left[\frac{n+1}{-\hbar\omega} + \frac{n}{\hbar\omega} \right] = -\frac{q^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2}.$$

Questo problema può essere risolto esattamente, consentendo così una verifica dei risultati perturbativi. Infatti

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 - q\mathcal{E}x = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \left(x - \frac{q\mathcal{E}}{m\omega^2} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{q^2 \mathcal{E}^2}{m\omega^2}.$$

L'Hamiltoniano descrive quindi un oscillatore armonico la cui posizione di riposo è traslata in $x = \frac{q\mathcal{E}}{m\omega^2}$ e la cui energia è variata del valore costante $-\frac{1}{2} \frac{q^2 \mathcal{E}^2}{m\omega^2}$. La traslazione della posizione non influisce sullo spettro che deriva solo dall'algebra dei commutatori:

$$\left[x - \frac{q\mathcal{E}}{m\omega^2}, p \right] = [x, p] = i\hbar.$$

A causa della ridefinizione dell'energia potenziale lo spettro è dato da:

$$E_n = E_n^0 - \frac{q^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2}.$$

Pertanto il risultato trovato al II ordine in teoria perturbativa è il risultato esatto.

6.15 Oscillatore armonico: secondo potenziale armonico I

Si aggiunga al potenziale elastico l'interazione

$$V(x) = \frac{1}{2} m\alpha^2 x^2.$$

Calcolare lo spostamento dei livelli di energia al primo e secondo ordine perturbativo. Paragonare il risultato con il valore esatto.

Soluzione

Calcoliamo preliminarmente gli elementi di matrice della perturbazione nella base data dagli autostati imperturbati dell'energia. Utilizzando le formule (A.14, A.13), si ottiene facilmente

$$\langle n | x^2 | m \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \left[\sqrt{n(n-1)} \delta_{n,m+2} + \sqrt{(n+1)(n+2)} \delta_{n,m-2} + (2n+1) \delta_{n,m} \right].$$

La correzione al I ordine al livello n -simo è data da

$$E_n^1 = \langle n | V | n \rangle = \frac{1}{2} m\alpha^2 \frac{\hbar}{2m\omega} (2n+1) = \frac{1}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar\alpha^2}{\omega}.$$

La correzione al II ordine è invece

$$\begin{aligned}
 E_n^2 &= \sum_{m \neq n} \frac{|\langle n|V|m \rangle|^2}{(n-m)\hbar\omega} = \\
 &= \left(\frac{\hbar\alpha^2}{4\omega} \right)^2 \left[\frac{n(n-1)}{2\hbar\omega} + \frac{(n+1)(n+2)}{-2\hbar\omega} \right] = \\
 &= -\frac{\hbar\alpha^4}{8\omega^3} \left(n + \frac{1}{2} \right).
 \end{aligned}$$

Il risultato esatto si ottiene considerando un oscillatore di pulsazione

$$\omega' = \sqrt{\omega^2 + \alpha^2}$$

i cui livelli di energia sono

$$\begin{aligned}
 E_n &= \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \sqrt{\omega^2 + \alpha^2} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{\omega^2}} = \\
 &= \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \left[1 + \frac{1}{2} \frac{\alpha^2}{\omega^2} - \frac{1}{8} \left(\frac{\alpha^2}{\omega^2} \right)^2 + \dots \right].
 \end{aligned}$$

I termini della serie perturbativa che abbiamo calcolato coincidono con lo sviluppo di Mc Laurin nel parametro α^2/ω^2 fino al II ordine.

6.16 Oscillatore armonico: secondo potenziale armonico II

Risolvere il problema 6.15 nello spazio delle funzioni d'onda.

Soluzione

Le autofunzioni dell'Hamiltoniano imperturbato sono date dalle (A.16)

$$\phi_n(x) = c_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi) \quad \text{con} \quad c_n = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \quad \text{e} \quad \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

dove H_n è il polinomio di Hermite n -simo normalizzato secondo la (A.18), per la quale

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi H_n^2(\xi) = \sqrt{\pi} 2^n n! \quad (6.2)$$

Per ottenere le correzioni in teoria perturbativa, occorre calcolare gli elementi di matrice del potenziale, e, quindi, gli elementi di matrice di x^2 , nella base imperturbata.

Essi possono essere calcolati ricorrendo alla relazione di ricorrenza dei polinomi di Hermite (A.19) e a qualche passaggio algebrico

$$\begin{aligned}
 \langle n|x^2|m\rangle &= c_n c_m \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_m(\xi) x^2 = \\
 &= \frac{1}{4} c_n c_m \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{-3/2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_m(\xi) 4\xi^2 = \\
 &= \frac{1}{4} c_n c_m \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{-3/2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi e^{-\xi^2} \left[H_{n+1}(\xi) H_{m+1}(\xi) + \right. \\
 &\quad \left. + 4nm H_{n-1}(\xi) H_{m-1}(\xi) + 2m H_{n+1}(\xi) H_{m-1}(\xi) + \right. \\
 &\quad \left. + 2n H_{n-1}(\xi) H_{m+1}(\xi) \right] = \\
 &= \frac{1}{4\sqrt{2^n n! 2^m m!}} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{-3/2} \left[\sqrt{\pi} 2^{n+1} (n+1)! \delta_{n,m} + \right. \\
 &\quad \left. + 4n^2 \sqrt{\pi} 2^{n-1} (n-1)! \delta_{n,m} + 2m \sqrt{\pi} 2^{n+1} (n+1)! \delta_{n+2,m} + \right. \\
 &\quad \left. + 2n \sqrt{\pi} 2^{n-1} (n-1)! \delta_{n-2,m} \right] = \\
 &= \frac{1}{2} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{-1} \left[(2n+1) \delta_{n,m} + \sqrt{n+1(n+2)} \delta_{n+2,m} + \sqrt{n(n-1)} \delta_{n-2,m} \right].
 \end{aligned}$$

Il risultato trovato per gli elementi di matrice è, ovviamente, lo stesso trovato tramite la tecnica degli operatori di creazione e distruzione; quindi, sono le stesse le correzioni dovute alla perturbazione.

6.17 Oscillatore armonico piano: correzione lineare e quadratica

Un oscillatore armonico piano ha come Hamiltoniano

$$\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2} m\omega^2 (x^2 + y^2).$$

- Si dica quali sono i livelli energetici e la loro degenerazione.
- Se si aggiunge ad H_0 una perturbazione $V_1 = \epsilon x$ si calcolino perturbativamente le correzioni ai livelli al primo e al secondo ordine.
- Se si aggiunge ad H_0 una perturbazione $V_2 = \epsilon x^2$ si calcolino perturbativamente le correzioni ai livelli al primo e al secondo ordine.
- Si confrontino i risultati ottenuti in b) e c) con i rispettivi risultati esatti.

Soluzione

- Lo spazio di Hilbert è il prodotto tensoriale degli spazi relativi a due oscillatori di ugual frequenza disposti lungo gli assi x e y .

Quindi lo spettro dell'energia è dato da

$$E_n = \hbar\omega(n+1),$$

dove n è la somma di due interi n_x e n_y . La degenerazione è pari a $n+1$.

b) La perturbazione esiste solo nella direzione x :

$$E_{n_x}^1 = \varepsilon \langle n_x | x | n_x \rangle = 0$$

$$E_{n_x}^2 = -\frac{\varepsilon^2}{2m\omega^2}$$

dove abbiamo usato i risultati dell'esercizio 6.14. In definitiva la perturbazione è la stessa per tutti i livelli

$$E_n^2 = \hbar\omega(n+1) - \frac{\varepsilon^2}{2m\omega^2}.$$

c) Utilizzando i risultati dell'esercizio 6.15 troviamo:

$$E_{n_x}^1 = \frac{\hbar\varepsilon}{m\omega} \left(n_x + \frac{1}{2} \right)$$

$$E_{n_x}^2 = -\frac{\hbar\varepsilon^2}{2m^2\omega^3} \left(n_x + \frac{1}{2} \right).$$

In definitiva, al II ordine abbiamo

$$E_{n_x, n_y} = \hbar\omega(n_x + n_y + 1) + \frac{\hbar\varepsilon}{m\omega} \left(n_x + \frac{1}{2} \right) - \frac{\hbar\varepsilon^2}{4m\omega^3} \left(n_x + \frac{1}{2} \right) =$$

$$= \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + \frac{\varepsilon}{m\omega^2} - \frac{\varepsilon^2}{2m^2\omega^4} \right) \left(n_x + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega \left(n_y + \frac{1}{2} \right).$$

Non si ha degenerazione a meno di particolari valori di ε .

d) Nel caso della perturbazione V_1 sappiamo che la teoria perturbativa al II ordine coincide con il risultato esatto. Nel caso della perturbazione V_2 possiamo scrivere:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2} m\omega^2 (x^2 + y^2) + \varepsilon x^2 =$$

$$= \frac{1}{2m} p_x^2 + \frac{1}{2} m\omega'^2 x^2 + \frac{1}{2m} p_y^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 y^2$$

dove

$$\omega'^2 = \omega^2 + \frac{2\varepsilon}{m}.$$

Avremo quindi

$$E_{n_x, n_y} = \hbar\omega' \left(n_x + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega \left(n_y + \frac{1}{2} \right) =$$

$$= \hbar\omega \sqrt{1 + \frac{2\varepsilon}{m\omega^2}} \left(n_x + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega \left(n_y + \frac{1}{2} \right) =$$

$$= \hbar\omega \left[1 + \frac{\varepsilon}{m\omega^2} - \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon}{m\omega^2} \right)^2 + O(\varepsilon^2) \right] \left(n_x + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega \left(n_y + \frac{1}{2} \right).$$

La serie perturbativa al II ordine coincide pertanto con lo sviluppo di McLaurin in ε del risultato esatto.

6.18 Oscillatori armonici accoppiati

Si considerino due oscillatori armonici unidimensionali di uguale massa m e costante elastica k . Essi interagiscono tramite un'energia potenziale

$$\mathcal{H}_1 = \alpha x_1 x_2,$$

dove x_1 e x_2 sono le posizioni dei due oscillatori.

- Determinare autovalori e autostati. (Suggerimento: separare il moto del centro di massa da quello della coordinata relativa).
- Nell'ipotesi in cui $\alpha \ll k$, calcolare al più basso ordine perturbativo non nullo le energie dei livelli.
- Confrontare i due risultati.

Soluzione

- L'Hamiltoniano del sistema è

$$\mathcal{H} = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2} k x_1^2 + \frac{1}{2} k x_2^2 + \alpha x_1 x_2.$$

Introducendo le variabili suggerite:

$$X = \frac{x_1 + x_2}{2} \quad \text{e} \quad x = x_1 - x_2$$

l'Hamiltoniano diventa:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{CM} + \mathcal{H}_r$$

dove, detti P e p gli impulsi coniugati alle nuove variabili, $M = 2m$ la massa totale e $\mu = m/2$ la massa ridotta,

$$\mathcal{H}_{CM} = \frac{P^2}{2M} + (k + \alpha)X^2 \quad \text{e} \quad \mathcal{H}_r = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{4}(k - \alpha)x^2.$$

Il sistema presenta quindi un Hamiltoniano somma di due termini relativi a due moti oscillatori, uno di costante elastica $2(k + \alpha)$ per il centro di massa e uno di costante elastica $(k - \alpha)/2$ per il moto relativo. L'equazione di Schrödinger è dunque separabile nelle nuove variabili. Notiamo che questa separazione ha senso nell'ipotesi $\alpha \ll k$, altrimenti il moto relativo avrebbe un'energia potenziale non limitata inferiormente.

Lo spettro dell'energia è dato quindi da

$$E_{n_T, n_r} = E_{n_T} + E_{n_r} = \hbar \omega_T \left(n_T + \frac{1}{2} \right) + \hbar \omega_r \left(n_r + \frac{1}{2} \right)$$

dove si è posto, detta ω la pulsazione dei due oscillatori in assenza di interazione,

$$\begin{aligned} \omega_T &= \sqrt{\frac{2(k + \alpha)}{M}} = \sqrt{\frac{k + \alpha}{m}} = \sqrt{\frac{k}{m}} \sqrt{1 + \frac{\alpha}{k}} = \omega \sqrt{1 + \frac{\alpha}{m\omega^2}} \\ \omega_r &= \sqrt{\frac{k - \alpha}{2\mu}} = \sqrt{\frac{k - \alpha}{m}} = \sqrt{\frac{k}{m}} \sqrt{1 - \frac{\alpha}{k}} = \omega \sqrt{1 - \frac{\alpha}{m\omega^2}}. \end{aligned}$$

- b) Le correzioni perturbative possono essere calcolate utilizzando sia le vecchie coordinate x_1 e x_2 che le nuove X e x . Usiamo queste ultime.

In assenza di interazione i due oscillatori relativi al centro di massa e alla coordinata relativa, hanno la stessa pulsazione ω . Quindi i livelli di energia sono

$$E_n = \hbar\omega(n+1) \quad \text{dove} \quad n = n_T + n_r = 0, 1, \dots$$

Ciascun livello n ha degenerazione pari a $n+1$.

Nelle nuove coordinate il potenziale di interazione, che costituisce la perturbazione, diventa:

$$\mathcal{H}^1 = \alpha x_1 x_2 = \alpha \frac{2X+x}{2} \frac{2X-x}{2} = \alpha \left(X^2 - \frac{x^2}{4} \right).$$

Al I ordine in teoria perturbativa dobbiamo calcolare, per ogni valore di n , gli autovalori della matrice della perturbazione nel sottospazio dei ket $|n\rangle = |j, n-j\rangle = |j\rangle_X |n-j\rangle_x$, dove gli indici j e k vanno da 0 a n . Usando i risultati dell'esercizio 2.18 abbiamo:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{j,k}^1 &= \alpha \langle j, n-j | x_1 x_2 | k, n-k \rangle = \\ &= \alpha \langle j, n-j | \left(X^2 - \frac{x^2}{4} \right) | k, n-k \rangle = \\ &= \alpha \left[\langle j | X^2 | k \rangle \delta_{j,k} - \frac{1}{4} \langle n-j | x^2 | n-k \rangle \delta_{j,k} \right] = \\ &= \alpha \left[\langle k | X^2 | k \rangle \delta_{j,k} - \frac{1}{4} \langle n-k | x^2 | n-k \rangle \delta_{j,k} \right] = \\ &= \alpha \left[\frac{\hbar}{2M\omega} (2k+1) - \frac{1}{4} \frac{\hbar}{2\mu\omega} (2(n-k)+1) \right] \delta_{j,k} = \\ &= \frac{\alpha\hbar}{2m\omega} (2k-n) \delta_{j,k}. \end{aligned}$$

La matrice è quindi diagonale e gli $n+1$ autovalori sono il prodotto di $\frac{\alpha\hbar}{4m\omega}$ per

$$-n, 2-n, 4-n, \dots, n-4, n-2, n$$

- c) Sviluppando in serie di potenze di $\alpha/k = \alpha/m\omega^2$ le espressioni per ω_T e ω_r e trascurando gli ordini superiori al secondo abbiamo

$$\begin{aligned} \omega_T &= \omega \left[1 + \frac{1}{2} \frac{\alpha}{m\omega^2} - \frac{1}{8} \left(\frac{\alpha}{m\omega^2} \right)^2 \right] \\ \omega_r &= \omega \left[1 - \frac{1}{2} \frac{\alpha}{m\omega^2} - \frac{1}{8} \left(\frac{\alpha}{m\omega^2} \right)^2 \right]. \end{aligned}$$

Possiamo quindi approssimare lo spettro dell'energia totale con l'espressione

$$E_{N_T, n_r} = \hbar\omega(n_T + n_r + 1) + \frac{1}{2} \frac{\alpha\hbar}{m\omega} (n_T - n_r) - \frac{\hbar\omega}{8} \left(\frac{\alpha}{m\omega^2} \right)^2 (n_T + n_r + 1),$$

e, ponendo $n_T + n_r = n$,

$$E_{n,n_T} = \hbar\omega(n+1) + \frac{1}{2} \frac{\alpha\hbar}{m\omega} (2n_T - n) + O(\alpha^2), \quad \text{con } n_T = 0, 1, \dots, n.$$

Il termine del I ordine in α coincide con il risultato trovato in teoria perturbativa al I ordine, perché la loro differenza $2n_T - n$ assume proprio i valori $-n, 2 - n, 4 - n, \dots, n - 4, n - 2, n$.

6.19 Oscillatore armonico piano: accoppiamento tra i due gradi di libertà

Una particella di massa m si muove nel piano xy soggetta ad un potenziale armonico di pulsazione ω :

$$\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2).$$

Si introduca la perturbazione

$$\mathcal{H}_1(x, y) = 2\lambda xy.$$

- Si risolva il problema degli autovalori e degli autostati di $\mathcal{H}_0$.
- Si calcoli la correzione al livello fondamentale dovuta a $\mathcal{H}_1$ in teoria perturbativa al I e II ordine.
- Si calcoli la correzione al primo e al secondo livello eccitato dovuta a $\mathcal{H}_1$ in teoria perturbativa al I ordine.

Soluzione

Il problema è risolto esattamente nell'esercizio 6.18.

- Con ovvia assegnazione di simboli possiamo scrivere

$$\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_0^x + \mathcal{H}_0^y.$$

Quindi gli autovalori sono dati da

$$E_n^0 = \hbar\omega(n+1) \quad \text{dove } n = n_x + n_y \quad \text{con } n_{x,y} = 0, 1, 2, \dots$$

e i relativi autostati, detti $|n_x\rangle$ e $|n_y\rangle$ gli autostati dell'oscillatore armonico unidimensionale per ciascuna delle due direzioni, da

$$|n^0\rangle = |n_x\rangle |n_y\rangle.$$

- Lo stato fondamentale è dato da

$$|0^0\rangle = |0_x\rangle |0_y\rangle.$$

La correzione al I ordine è

$$E_0^1 = \langle 0^0 | 2\lambda xy | 0^0 \rangle = 2\lambda \langle 0 | x | 0 \rangle^2 = 2\lambda \left(\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle 0 | 1 \rangle \right)^2 = 0$$

dove abbiamo usato le (A.14, A.15).

Al II ordine si ha, tenendo conto della (A.70):

$$\begin{aligned} E_0^2 &= 4\lambda^2 \sum_{m \neq 0} \frac{|\langle 0^0 | xy | m^0 \rangle|^2}{(0-m)\hbar\omega} = \\ &= 4\lambda^2 \sum_{(n_x, n_y) \neq (0,0)} \frac{|\langle 0 | x | n_x \rangle \langle 0 | y | n_y \rangle|^2}{(-n_x - n_y)\hbar\omega} = \\ &= \frac{4\lambda^2}{\hbar\omega} \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 \frac{1}{-2} = -\frac{\lambda^2 \hbar}{2m^2 \omega^3}. \end{aligned}$$

- c) Il primo e il secondo livello eccitato sono degeneri; le correzioni sono quindi gli autovalori della matrice rappresentativa della perturbazione nel sottospazio relativo al livello, matrice che indichiamo sempre con il simbolo $\mathcal{H}_1$.

Per il primo livello eccitato, doppiamente degenere, si ha:

$$\mathcal{H}_1 = \begin{pmatrix} \langle 10 | \mathcal{H}_1 | 10 \rangle & \langle 10 | \mathcal{H}_1 | 01 \rangle \\ \langle 01 | \mathcal{H}_1 | 10 \rangle & \langle 01 | \mathcal{H}_1 | 01 \rangle \end{pmatrix} = 2\lambda \begin{pmatrix} 0 & \frac{\hbar}{2m\omega} \\ \frac{\hbar}{2m\omega} & 0 \end{pmatrix}$$

i cui autovalori sono $\pm \frac{\lambda \hbar}{m\omega}$.

Il secondo livello eccitato è tre volte degenere, con autostati

$$|20\rangle, |11\rangle, |02\rangle,$$

quindi la matrice da diagonalizzare è:

$$\mathcal{H}_1 = \begin{pmatrix} \langle 20 | \mathcal{H}_1 | 20 \rangle & \langle 20 | \mathcal{H}_1 | 11 \rangle & \langle 20 | \mathcal{H}_1 | 02 \rangle \\ \langle 11 | \mathcal{H}_1 | 20 \rangle & \langle 11 | \mathcal{H}_1 | 11 \rangle & \langle 11 | \mathcal{H}_1 | 02 \rangle \\ \langle 02 | \mathcal{H}_1 | 20 \rangle & \langle 02 | \mathcal{H}_1 | 11 \rangle & \langle 02 | \mathcal{H}_1 | 02 \rangle \end{pmatrix} = \frac{\lambda \hbar}{m\omega} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

i cui autovalori sono 0 e $\pm \frac{2\lambda \hbar}{m\omega}$.

6.20 Pendolo: correzione anarmonica alle piccole oscillazioni

Considerare un pendolo di massa m e lunghezza l che oscilla in un piano verticale.

- Trovare i livelli di energia nell'approssimazione delle piccole oscillazioni.
- Tenendo conto dell'approssimazione successiva a quella delle piccole oscillazioni, trovare le correzioni al primo ordine perturbativo ai livelli di energia.

Soluzione

Detto θ l'angolo di deviazione rispetto alla verticale, l'hamiltoniano del pendolo è dato da

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} ml^2 \dot{\theta}^2 + mgl(1 - \cos \theta).$$

Sviluppando l'energia potenziale in serie di potenze intorno a $\theta = 0$, si ha

$$V(\theta) = mgl \left(\frac{\theta^2}{2} - \frac{\theta^4}{24} + O(\theta^5) \right).$$

- a) Nel limite di piccole oscillazioni l'hamiltoniano è approssimato da quello di un oscillatore armonico

$$\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2} ml^2 \dot{\theta}^2 + \frac{1}{2} mgl\theta^2 = \frac{1}{2} \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2,$$

dove abbiamo introdotto lo spostamento $q = l\theta$ rispetto alla posizione di riposo e la pulsazione $\omega = \sqrt{\frac{g}{l}}$. Lo spettro dell'energia è dato quindi da

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

- b) Al II ordine in θ l'energia potenziale è

$$V = mgl \left(\frac{\theta^2}{2} - \frac{\theta^4}{24} \right) = \frac{1}{2} m\omega^2 q^2 - \frac{1}{24} \frac{mg}{l^3} q^4.$$

Per trovare le correzioni al primo ordine perturbativo ai livelli di energia, ricordiamo che (2.19)

$$\langle q^4 \rangle_j = \frac{3\hbar^2}{4m^2\omega^2} (2j^2 + 2j + 1).$$

In definitiva le correzioni sono date da

$$E_n^1 = \langle n | \mathcal{H}_1 | n \rangle = -\frac{1}{32} \frac{g\hbar^2}{ml^3\omega^2} (2j^2 + 2j + 1).$$

6.21 Rottura della degenerazione in sistema a due stati

L'Hamiltoniano per un sistema a due stati ha la forma

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{H}_1 = \begin{pmatrix} a & \lambda \Delta \\ \lambda \Delta & b \end{pmatrix} \quad (\lambda > 0).$$

- a) Risolvere il problema agli autovalori dell'energia esattamente determinando autovettori ed autovalori.

- b) Assumendo $\lambda|\Delta| \ll |a-b|$, risolvere lo stesso problema con la teoria perturbativa fino al primo ordine negli autovettori e fino al secondo ordine negli autovalori.
- c) Assumendo che, in assenza di perturbazione, i livelli di energia siano quasi degeneri,

$$|a-b| \ll \lambda|\Delta|$$

mostrare che i risultati ottenuti in a) sono simili a quelli che si otterrebbero applicando la teoria perturbativa degenere ($a=b$).

Soluzione

Si vede immediatamente che autovettori ed autovalori di

$$\mathcal{H}_0 = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix}$$

sono dati da

$$\begin{aligned} |1^0\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ corrispondente a } E_1 = a, \\ |2^0\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ corrispondente a } E_2 = b. \end{aligned}$$

- a) Gli autovalori di $\mathcal{H}$ sono dati dall'equazione secolare

$$\begin{aligned} (a-\omega)(b-\omega) - \lambda^2\Delta^2 &= 0 \\ \omega_{\pm} &= \frac{a+b}{2} \pm \sqrt{\frac{(a-b)^2}{4} + \lambda^2\Delta^2}. \end{aligned}$$

Gli autovettori corrispondenti si ottengono risolvendo i due sistemi omogenei

$$\begin{pmatrix} a & \lambda\Delta \\ \lambda\Delta & b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \omega_{\pm} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

e imponendo la normalizzazione. Si ottiene così l'equazione

$$\begin{aligned} a\alpha + \lambda\Delta\beta &= \omega_{\pm}\alpha \\ \beta &= \frac{\omega_{\pm}-a}{\lambda\Delta}\alpha \\ |\psi_{\pm}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{\lambda^2\Delta^2 + (\omega_{\pm}-a)^2}} \begin{pmatrix} \lambda\Delta \\ \omega_{\pm}-a \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

- b) Calcoliamo le correzioni al primo ordine agli autovalori:

$$\begin{aligned} E_1^1 &= \lambda \langle 1^0 | H_1 | 1^0 \rangle = \lambda\Delta \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \\ E_2^1 &= \lambda \langle 2^0 | H_1 | 2^0 \rangle = \lambda\Delta \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0. \end{aligned}$$

Calcoliamo le correzioni agli autostati al I ordine:

$$\begin{aligned} |1^1\rangle &= |1^0\rangle + \lambda \frac{\langle 2^0 | \mathcal{H}_1 | 1^0 \rangle}{E_1^0 - E_2^0} |2^0\rangle = |1^0\rangle + \lambda \frac{\Delta}{a-b} |2^0\rangle \\ |2^1\rangle &= |2^0\rangle + \lambda \frac{\langle 1^0 | \mathcal{H}_1 | 2^0 \rangle}{E_2^0 - E_1^0} |1^0\rangle = |2^0\rangle - \lambda \frac{\Delta}{a-b} |1^0\rangle. \end{aligned}$$

Calcoliamo le correzioni al secondo ordine agli autovalori:

$$\begin{aligned} E_1^2 &= \frac{|\langle 1^0 | \lambda \mathcal{H}_1 | 2^0 \rangle|^2}{E_2^0 - E_1^0} = \lambda^2 \frac{\Delta^2}{a-b} \\ E_2^2 &= \frac{|\langle 2^0 | \lambda \mathcal{H}_1 | 1^0 \rangle|^2}{E_1^0 - E_2^0} = -\lambda^2 \frac{\Delta^2}{a-b}. \end{aligned}$$

Notiamo che, ovviamente, questi risultati coincidono con il termine del II ordine dello sviluppo in serie in λ degli autovalori esatti. Infatti

$$\begin{aligned} \omega_{\pm} &= \frac{a+b}{2} \pm \frac{a-b}{2} \sqrt{1 + \frac{4\lambda^2 \Delta^2}{(a-b)^2}} = \frac{a+b}{2} \pm \frac{a-b}{2} \left(1 + \frac{2\lambda^2 \Delta^2}{(a-b)^2} \right) = \\ &= \begin{cases} a + \frac{\lambda^2 \Delta^2}{a-b}, \\ b - \frac{\lambda^2 \Delta^2}{a-b}. \end{cases} \end{aligned}$$

c) Applichiamo la teoria perturbativa degenere nel caso ($a = b$). Occorre diagonalizzare la perturbazione.

$$\det \begin{pmatrix} -E^1 & \lambda \Delta \\ \lambda \Delta & -E^{(1)} \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow E^1 \pm \lambda \Delta.$$

Per confrontare questo risultato con quello esatto, notiamo che se

$$|a-b| \ll \lambda |\Delta|$$

ha senso lo sviluppo in serie:

$$\begin{aligned} \omega_{\pm} &= \frac{a+b}{2} \pm \lambda \Delta \sqrt{1 + \frac{(a-b)^2}{4\lambda^2 \Delta^2}} = \frac{a+b}{2} \pm \lambda \Delta \pm \frac{1}{8} \frac{(a-b)^2}{\lambda^2 \Delta^2} + \dots = \\ &= a \pm \lambda \Delta + O\left(\frac{(a-b)^2}{\lambda^2 \Delta^2}\right) \end{aligned}$$

che coincide con il risultato precedente a meno di correzioni al II ordine nel parametro di sviluppo.

6.22 Fermione massivo in campo magnetico

Si consideri l'Hamiltoniano di una particella di spin 1/2 immersa in un campo magnetico $\vec{B}$ uniforme e costante che si ottiene trascurando il termine cinetico:

$$\mathcal{H} = -\mu \hbar \vec{B} \cdot \vec{\sigma}$$

Si consideri il caso in cui $\vec{B}$ giace sul piano xz con

$$\varepsilon = \frac{B_x}{B_z} \ll 1.$$

- a) Si determinino con il formalismo della teoria delle perturbazioni gli autovalori di $\mathcal{H}$ fino all'ordine ε^2 incluso, e gli autostati fino all'ordine ε .
- b) Si determini poi la soluzione esatta per gli autovalori e gli autovettori.

Soluzione

a) Abbiamo

$$\mathbf{B} = (\varepsilon B_z, 0, B_z)$$

e

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 \quad \text{dove} \quad \mathcal{H}_0 = -\mu\hbar B_z \sigma_z \quad \text{e} \quad \mathcal{H}_1 = -\varepsilon\mu\hbar B_z \sigma_x.$$

Consideriamo la parte imperturbata dell'Hamiltoniano. $\mathcal{H}_0$ è proporzionale a σ_z , quindi i suoi autovalori sono

$$E_-^0 = -\mu\hbar B_z \quad \text{corrispondente all'autostato} \quad |-\rangle = |\sigma_z = +1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$E_+^0 = +\mu\hbar B_z \quad \text{corrispondente all'autostato} \quad |+\rangle = |\sigma_z = -1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Consideriamo $\mathcal{H}_1$ come perturbazione. Nella rappresentazione di $\mathcal{H}_0$ essa è data dalla matrice

$$\mathcal{H}_1 = \begin{pmatrix} \langle -|\mathcal{H}_1|-\rangle & \langle -|\mathcal{H}_1|+\rangle \\ \langle +|\mathcal{H}_1|-\rangle & \langle +|\mathcal{H}_1|+\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\varepsilon\mu\hbar B_z \\ -\varepsilon\mu\hbar B_z & 0 \end{pmatrix}.$$

Si vede immediatamente che le correzioni al I ordine agli autovalori sono nulle. Le correzioni al I ordine agli autostati sono date da

$$|n^1\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m^0|\mathcal{H}_1|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0} |m^0\rangle$$

cioè

$$|E_-^1\rangle = -\frac{1}{2\mu\hbar B_z} (-\mu\hbar B_z \varepsilon) |E_+\rangle = +\frac{\varepsilon}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$|E_+^1\rangle = +\frac{1}{2\mu\hbar B_z} (-\mu\hbar B_z \varepsilon) |E_-\rangle = -\frac{\varepsilon}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Le correzioni al II ordine agli autovalori sono date da

$$E_n^2 = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^0|\mathcal{H}_1|n^0\rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0}$$

cioè

$$E_-^2 = -\frac{\mu\hbar B_z \varepsilon^2}{2} \quad E_+^2 = +\frac{\mu\hbar B_z \varepsilon^2}{2}.$$

b) Risolviamo ora esattamente il problema degli autovalori per

$$\mathcal{H} = -\mu\hbar B_z \Lambda \quad \text{dove} \quad \Lambda = \begin{pmatrix} 1 & \varepsilon \\ \varepsilon & -1 \end{pmatrix}.$$

Gli autovalori di Λ sono $\lambda_{1,2} = \pm\sqrt{1+\varepsilon^2}$ per cui quelli di $\mathcal{H}$ sono:

$$E_{1,2} = \mp\mu\hbar B_z \sqrt{1+\varepsilon^2},$$

che, se sviluppati in serie di potenze di ε , coincidono fino al second'ordine con i risultati trovati in teoria perturbativa.

Gli autovettori di $\mathcal{H}$ sono gli stessi di Λ e sono della forma:

$$|E_{1,2}\rangle = \alpha_{1,2} \begin{pmatrix} 1 + \lambda_{1,2} \\ \varepsilon \end{pmatrix}$$

dove $\alpha_{1,2}$ è un opportuna costante di normalizzazione.

6.23 Decadimento β in atomo idrogenoide

Trovare al I ordine in teoria delle perturbazioni le variazioni dei livelli energetici di un atomo idrogenoide prodotte dall'aumento di una unità nella carica del nucleo, dovuta, ad esempio, a un decadimento β .

Usando il risultato esatto, discutere la validità dell'approssimazione usata.

Soluzione

Ricordiamo che lo spettro dell'energia dell'atomo idrogenoide di numero atomico Z è dato (vedi problema 3.17) da

$$E_n^0 = -\frac{1}{2}mc^2Z^2\alpha^2\frac{1}{n^2}$$

dove $n = 1, 2, \dots$ e $\alpha = e^2/\hbar c$ è la costante di struttura fine. Per effetto dell'aumento di carica l'energia potenziale risulta modificata:

$$\mathcal{V} = -\frac{(Z+1)e^2}{r} = -\frac{Ze^2}{r} - \frac{e^2}{r} = \mathcal{V}_0 + \mathcal{V}_1.$$

La correzione al I ordine è data quindi da

$$E_n^1 = \langle n^0 | \mathcal{V}_1 | n^0 \rangle = -e^2 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{n^0}.$$

Utilizzando il risultato del Teorema del Viriale, $\langle \mathcal{T} \rangle = -\langle \mathcal{V} \rangle / 2$, (vedi es. 1.10) abbiamo

$$E_n^0 = \langle \mathcal{T} + \mathcal{V} \rangle_{n^0} = \frac{1}{2} \langle \mathcal{V} \rangle_{n^0} = -\frac{1}{2}Ze^2 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{n^0}$$

e, quindi,

$$E_n^1 = \frac{2E_n^0}{Z}.$$

Confrontando questo risultato con quello esatto,

$$E_n = -\frac{1}{2}mc^2(Z+1)^2\alpha^2\frac{1}{n^2} = -\frac{1}{2}mc^2\alpha^2\frac{1}{n^2}(Z^2+2Z+1) = E_n^0 + E_n^1 - \frac{1}{2}mc^2\alpha^2\frac{1}{n^2},$$

si vede che si tratta di una buona approssimazione se $Z \gg 1$.

6.24 Effetto Stark

Sperimentalmente si nota che, quando un atomo d'idrogeno viene posto in un campo elettrico sufficientemente intenso, le righe dello spettro elettromagnetico di emissione o di assorbimento si dividono in componenti vicine. Questo fenomeno prende il nome di Effetto Stark e viene attribuito alla rottura della degenerazione dovuta all'interazione tra campo elettrico e momento di dipolo elettrico dell'atomo.

Considerare un atomo d'idrogeno in presenza di un campo elettrico costante $\mathcal{E}$ diretto lungo l'asse z , che dà origine ad una interazione

$$\mathcal{H}_1 = e\mathcal{E} \cdot \mathbf{r} = e\mathcal{E} r \cos \theta.$$

Determinare le correzioni perturbative al prim'ordine per i primi due livelli di energia indotte dal campo elettrico esterno.

Soluzione

Ricordiamo che spettro e autofunzioni dell'Hamiltoniano dell'atomo d'idrogeno in assenza di campi esterni sono dati da

$$E_n = -\frac{1}{2}mc^2\frac{\alpha^2}{n^2} \quad \psi_{n,\ell,m}(\mathbf{r}) = R_{n,\ell}(r)Y_{\ell,m}(\theta, \phi) \quad (6.3)$$

dove

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \quad \text{e} \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

sono la costante di struttura fine e il raggio di Bohr. In termini dei polinomi di Laguerre e delle funzioni di Legendre, le autofunzioni sono date da

$$\psi_{n,\ell,m}(\mathbf{r}) = N_{n,\ell} r^\ell e^{-\frac{r}{na_0}} L_{n-\ell-1}^{2\ell+1} \left(\frac{2r}{na_0} \right) P_\ell^m(\cos \theta) e^{im\phi}. \quad (6.4)$$

Stato fondamentale

La correzione al I ordine è data da

$$E_1^1 = e \langle 1, 0, 0 | \mathbf{r} | 1, 0, 0 \rangle \cdot \mathcal{E}$$

che esprime la correzione in termini del prodotto scalare del campo elettrico per il valore medio della coordinata relativa nello stato non perturbato. In termini delle autofunzioni abbiamo

$$E_1^1 = e \mathcal{E} \cdot \int d\mathbf{r} |\psi_{1,0,0}(\mathbf{r})|^2 \mathbf{r}.$$

Questa quantità è nulla, anzi possiamo dire in generale che è nullo qualsiasi termine del tipo

$$\langle n, \ell, m | \mathbf{r} | n, \ell, m \rangle = \int d\mathbf{r} |\psi_{n,\ell,m}(\mathbf{r})|^2 \mathbf{r}.$$

Infatti le $\psi_{n,\ell,m}$, che sono date dal prodotto di una funzione di r per una Armonica sferica, hanno la parità di quest'ultima, cioè $(-1)^\ell$. Il loro modulo quadro è sempre pari e l'integrale è nullo, essendo l'integrale su tutto lo spazio di una funzione di parità negativa. Quindi non vi è correzione al I ordine per l'energia dello stato fondamentale.

Primo stato eccitato

La moltiplicazione delle linee è dovuta al fatto che la degenerazione dei livelli per $n > 1$ non sopravvive alla presenza del campo elettrico esterno.

Consideriamo il livello $n = 2$. In assenza del campo elettrico abbiamo quattro autofunzioni (A.58) che corrispondono allo stesso autovalore $E_2 = \frac{E_1}{4}$, alle quali associamo 4 ket come segue:

$$|1\rangle \rightarrow \psi_{2,0,0}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} a_0^{-\frac{3}{2}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} \quad (6.5)$$

$$|2\rangle \rightarrow \psi_{2,1,0}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} a_0^{-\frac{3}{2}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \cos \theta \quad (6.6)$$

$$|3\rangle \rightarrow \psi_{2,1,1}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{8\sqrt{2\pi}} a_0^{-\frac{3}{2}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \sin \theta e^{i\phi} \quad (6.7)$$

$$|4\rangle \rightarrow \psi_{2,1,-1}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{8\sqrt{2\pi}} a_0^{-\frac{3}{2}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \sin \theta e^{-i\phi}. \quad (6.8)$$

Come si è visto le correzioni al I ordine sono date dagli autovalori della matrice di $\mathcal{H}_1$ nel sottospazio relativo al E_1 . Possiamo utilizzare la numerazione degli stati per indicare gli elementi di questa matrice:

$$(\mathcal{H}_1)_{k,j} = \langle k | \mathcal{H}_1 | j \rangle \quad \text{con } k, j = 1, 2, 3, 4.$$

Come abbiamo visto gli elementi di matrice diagonali sono nulli per motivi di parità. Inoltre, poiché vale la (3.15), trovata nel problema 3.10,

$$\Delta m = m' - m = 0 \quad \text{e} \quad \Delta \ell = \ell' - \ell = \pm 1, \quad (6.9)$$

tutti gli elementi di matrice relativi a autoket con differenti autovalori di L_z sono nulli. Pertanto la matrice diventa

$$(\mathcal{H}_1)_{m,j} = \begin{pmatrix} 0 & \langle 1 | \mathcal{H}_1 | 2 \rangle & 0 & 0 \\ \langle 2 | \mathcal{H}_1 | 1 \rangle & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

dove abbiamo indicato gli unici elementi diversi da zero. Due degli autovalori sono nulli e le altre due correzioni si ottengono dagli autovalori del primo blocco 2×2 della matrice

$$\begin{pmatrix} 0 & \langle 1|\mathcal{H}_1|2\rangle \\ \langle 2|\mathcal{H}_1|1\rangle & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.10)$$

Poiché la matrice è hermitiana, gli elementi di matrice non nulli sono complessi coniugati, anzi uguali, essendo reali, Calcoliamoli:

$$\begin{aligned} \langle 1|\mathcal{H}_1|2\rangle &= e\mathcal{E} \int r^2 dr d\cos\theta d\phi \psi_{2,0,0}(r, \theta, \phi) r \cos\theta \psi_{2,1,0}(r, \theta, \phi) = \\ &= \frac{e\mathcal{E}}{16 \cdot 2\pi} a_0^{-3} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d\cos\theta \cos^2\theta \int_0^\infty dr r^3 \frac{r}{a_0} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{a_0}} = \\ &= \frac{e\mathcal{E}}{24} a_0 \int_0^\infty dx x^4 (2-x) e^{-x} = \\ &= -3 e\mathcal{E} a_0. \end{aligned}$$

Per l'ultimo passaggio abbiamo utilizzato l'integrale (A.6).

La matrice (6.10), è, dunque, data da

$$\begin{pmatrix} 0 & -3e\mathcal{E}a_0 \\ -3e\mathcal{E}a_0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Si trova facilmente che i suoi autovalori sono

$$\begin{aligned} 3e\mathcal{E}a_0 &\text{ corrispondente all'autovettore } \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \\ -3e\mathcal{E}a_0 &\text{ corrispondente all'autovettore } \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Riassumendo i risultati, il livello E_2 , 4-volte degenero con autoket $|2, 0, 0\rangle$, $|2, 1, 0\rangle$, $|2, 1, 1\rangle$ e $|2, 1, -1\rangle$, al I ordine perturbativo si separa in 3 livelli:

$$\begin{aligned} E_2 + 3e\mathcal{E}a_0 &\text{ non degenero corrispondente all'autoket } \frac{1}{\sqrt{2}} (|2, 0, 0\rangle - |2, 1, 0\rangle) \\ E_2 &\text{ 2 volte degenero corrispondente agli autoket } |2, 1, 1\rangle, |2, 1, -1\rangle \\ E_2 - 3e\mathcal{E}a_0 &\text{ non degenero corrispondente all'autoket } \frac{1}{\sqrt{2}} (|2, 0, 0\rangle + |2, 1, 0\rangle). \end{aligned}$$

6.25 Idrogeno: correzioni relativistiche

L'espressione correntemente usata per l'energia cinetica $T = \frac{p^2}{2m}$ può essere considerata come un'approssimazione per velocità piccole rispetto alla velocità della luce c dell'espressione relativistica:

$$T = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}.$$

Sviluppando questa espressione in serie di potenze in $\frac{p}{c}$, abbiamo

$$T = mc^2 \sqrt{1 + \frac{p^2}{m^2 c^2}} \simeq mc^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2}$$

dove sono stati trascurati i termini di ordine superiore a $(\frac{p}{c})^4$. Il primo termine di energia a riposo contribuisce solo a ridefinire la costante arbitraria relativa all'energia.

Utilizzando i risultati (il primo dei quali si ottiene facilmente dal problema 1.9)

$$\begin{aligned}\left\langle \frac{e^2}{r} \right\rangle_{n,\ell,m} &= -2E_n^0 \\ \left\langle \frac{e^4}{r^2} \right\rangle_{n,\ell,m} &= 4(E_n^0)^2 \frac{n}{\ell + \frac{1}{2}},\end{aligned}$$

calcolare gli effetti perturbativi al I ordine sullo spettro dell'energia dovuti a

$$\mathcal{H}_1 = -\frac{p^4}{8m^3c^2}. \quad (6.11)$$

Soluzione

Notiamo che, poiché

$$p^4 = 4m^2 \left(\mathcal{H}_0 + \frac{e^2}{r} \right)^2$$

commuta con L^2 e L_z , la teoria perturbativa si riduce a quella non degenere, nel senso che le matrici di $\mathcal{H}_1$ sono diagonali. Le correzioni al prim'ordine dell'energia sono date, quindi, da

$$\begin{aligned}E_T^1 &= -\frac{1}{8m^3c^2} \langle n, \ell, m | p^4 | n, \ell, m \rangle \\ &= \frac{1}{2mc^2} \langle n, \ell, m | \left(\mathcal{H}_0 + \frac{e^2}{r} \right)^2 | n, \ell, m \rangle \\ &= -\frac{1}{2mc^2} \left((E_n^0)^2 + 2E_n^0 \langle n, \ell, m | \frac{e^2}{r} | n, \ell, m \rangle + \langle n, \ell, m | \frac{e^4}{r^2} | n, \ell, m \rangle \right).\end{aligned}$$

Utilizzando le espressioni indicate per i valori medi, si ottiene il risultato finale

$$E_T^1 = -\frac{1}{2} m c^2 \alpha^4 \left[-\frac{3}{4n^4} + \frac{1}{n^3(\ell+1)} \right]. \quad (6.12)$$

6.26 Interazione spin-orbita

Considerare l'interazione magnetica tra lo spin dell'elettrone e il momento magnetico generato dal suo moto orbitale intorno al nucleo:

$$\mathcal{H}_{SO} = -\mu_e \cdot \mathbf{B} = \frac{e^2}{2m^2c^2r^3} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L},$$

nota come interazione spin-orbita.

Utilizzando il risultato

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{n,\ell} = \frac{1}{a_0^3} \frac{1}{n^3 \ell(\ell + \frac{1}{2})(\ell + 1)} = \left(\frac{mc\alpha}{\hbar} \right)^3 \frac{1}{n^3 \ell(\ell + \frac{1}{2})(\ell + 1)},$$

calcolare le correzioni al prim'ordine allo spettro dell'energia dovute a questa interazione.

Soluzione

Notiamo che

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} = \frac{1}{2} [(\mathbf{S} + \mathbf{L})^2 - L^2 - S^2] = \frac{1}{2} [J^2 - L^2 - S^2].$$

$\mathcal{H}_{SO}$ commuta, quindi, con gli operatori compatibili J^2 , L^2 , S^2 e conviene usare, per il calcolo dei valori medi che danno la correzione al I ordine, gli autoket comuni al momento angolare totale e all'Hamiltoniano $|n, j, m_j; \ell; s\rangle$, in modo che le matrici della perturbazione in questa base siano già diagonali:

$$\begin{aligned} \langle n', j', m'_j; \ell'; s' | \mathcal{H}_{SO} | n, j, m_j; \ell; s \rangle &= \\ &= \delta_{n,n'} \delta_{j,j'} \delta_{m,m'} \delta_{\ell,\ell'} \frac{e^2}{4m^2c^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{n,\ell} \hbar^2 \left[j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4} \right]. \end{aligned}$$

Il momento angolare totale, somma del momento orbitale dell'elettrone e del suo spin, è $J = \ell \pm \frac{1}{2}$, per cui

$$E_{SO}^1 = \frac{\hbar^2 e^2}{4m^2c^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{n,\ell} \times \begin{cases} \ell & \text{se } j = \ell + \frac{1}{2} \\ -(\ell+1) & \text{se } j = \ell - \frac{1}{2}. \end{cases}$$

Utilizzando la formula indicata, abbiamo il risultato finale

$$E_{SO}^1 = \frac{1}{4} mc^2 \alpha^4 \frac{1}{n^3 \ell(\ell + \frac{1}{2})(\ell + 1)} \times \begin{cases} \ell & \text{se } j = \ell + \frac{1}{2} \\ -(\ell+1) & \text{se } j = \ell - \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (6.13)$$

6.27 Stato fondamentale dell'atomo di Elio

L'atomo di Elio ha $Z = 2$ e $A = 4$; possiede quindi due elettroni che si muovono intorno ad un nucleo di massa pari a 4 volte quella dell'Idrogeno e circa 8×10^3 quella di un elettrone. Assumendo questa massa infinita, denominiamo con $\mathbf{r}_1$ e $\mathbf{r}_2$ le coordinate dei due elettroni rispetto al nucleo e con $\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ la loro posizione relativa. L'Hamiltoniano dell'atomo di Elio è, pertanto,

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}}.$$

Se non vi fosse l'interazione repulsiva tra i due elettroni, nell'equazione di Schrödinger ci sarebbe la separazione tra le variabili dei due elettroni e, detta E l'energia dello stato fondamentale, avremmo

$$\psi_E^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{E_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{E_1}(\mathbf{r}_2) = \frac{Z^3}{\pi a_0^3} e^{-\frac{Z(r_1+r_2)}{a_0}} \quad (6.14)$$

dove abbiamo indicato con E_1 e $\psi_{E_1}(r) = (2/\sqrt{4\pi})(Z/a_0)^3/2 \cdot e^{-\frac{Zr}{a_0}}$ rispettivamente l'energia dello stato fondamentale di un atomo idrogenoide con $Z = 2$ e la corrispondente autofunzione. L'energia dello stato fondamentale dell'Elio sarebbe

$$E^0 = 2E_1 = 2 \left[-\frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2} \right] = -8 \cdot 13.6 eV = -108.8 eV.$$

Sperimentalmente si trova che lo stato fondamentale dell'Elio ha energia pari a $-78,98 eV$, un valore molto più alto. Questo segnala il fatto che, trascurando il termine positivo di attrazione tra gli elettroni, si ottiene un'approssimazione troppo rozza.

Considerare l'interazione tra i due elettroni come perturbazione e calcolare la correzione al I ordine per l'energia dello stato fondamentale.

Soluzione

L'Hamiltoniano può essere riscritto nella forma

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$$

dove

$$\mathcal{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2}$$

e la perturbazione è data da

$$\mathcal{H}_1 = \frac{e^2}{r_{12}}$$

La correzione al I ordine dovuta all'interazione tra i due elettroni è data da:

$$\begin{aligned} E^1 &= \langle \psi_E^0 | \mathcal{H}_1 | \psi_E^0 \rangle = \\ &= \left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3} \right)^2 \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 e^{-\frac{2Z(r_1+r_2)}{a_0}} \frac{e^2}{r_{12}} = \\ &= \left(\frac{Z^3 e}{\pi a_0^3} \right)^2 K. \end{aligned}$$

Posto $\beta = \frac{2Z}{a_0}$, K è il seguente integrale

$$K = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 e^{-\beta(r_1+r_2)} \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \int d\mathbf{r}_1 e^{-\beta r_1} f(r_1)$$

dove

$$f(r_1) = \int d\mathbf{r}_2 e^{-\beta r_2} \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$$

è funzione solo del modulo di $\mathbf{r}_1$, perché integrando su tutto l'angolo solido di $\mathbf{r}_2$ scompare la dipendenza dagli angoli. Per calcolare $f(r_1)$ possiamo, quindi, orientare liberamente $\mathbf{r}_1$ nella direzione dell'asse z .

Avremo

$$\begin{aligned}
 f(r_1) &= 2\pi \int dr_2 r_2^2 e^{-\beta r_2} \int_{-1}^{+1} d\cos\theta \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta}} = \\
 &= -2\pi \int dr_2 r_2^2 e^{-\beta r_2} \frac{1}{r_1 r_2} \left[\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta} \right]_{-1}^{+1} = \\
 &= \frac{2\pi}{r_1} \int dr_2 r_2 e^{-\beta r_2} (r_1 + r_2 - |r_1 - r_2|) = \\
 &= \frac{2\pi}{r_1} \left[\int_0^{r_1} dr_2 r_2 e^{-\beta r_2} (2r_2) + \int_{r_1}^{\infty} dr_2 r_2 e^{-\beta r_2} (2r_1) \right] = \\
 &= \frac{4\pi}{r_1 \beta^3} \left[2 - e^{-\beta r_1} (2 + \beta r_1) \right],
 \end{aligned}$$

dove abbiamo usato le espressioni, ricavate dalla (A.7):

$$I_2(0, r_1) = \frac{1}{\beta^3} [2 - (2 + 2r_1\beta + r_1^2\beta^2)e^{-\beta r_1}]$$

e

$$I_1(r_1, \infty) = \frac{1}{\beta^2} (1 + \beta r_1) e^{-\beta r_1}.$$

Tornando al calcolo di K otteniamo, usando i soliti integrali (A.8),

$$K = 4\pi \int_0^{\infty} dr_1 r_1^2 e^{-\beta r_1} \frac{4\pi}{r_1 \beta^3} \left[2 - e^{-\beta r_1} (2 + \beta r_1) \right] = \frac{(4\pi)^2}{\beta^5} \frac{5}{4}.$$

Inserendo questi risultati nell'espressione per E^1 si ottiene

$$E^1 = \left(\frac{Z^3 e}{\pi a_0^3} \right)^2 \frac{5}{4} \frac{(4\pi)^2}{\beta^5} = \frac{5}{8} \frac{Ze^2}{a_0} = \frac{5Z}{4} \left(\frac{1}{2} mc^2 \alpha^2 \right) = 34 eV$$

dove si è tenuto conto del fatto che $a_0 = \frac{\hbar}{mc\alpha}$, $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ e $\frac{1}{2} mc^2 \alpha^2 = 13,6 eV$ è l'energia, cambiata di segno, dello stato fondamentale dell'atomo d'idrogeno.

In questa approssimazione lo stato fondamentale dell'atomo di elio è

$$E = E^0 + E^1 = -108.8 eV + 34 eV = -74,8 eV.$$

Questo valore è molto prossimo al valore sperimentale già citato $-78,98 eV$. Si può avere un'approssimazione migliore utilizzando il metodo variazionale (vedi problema 11.4).

Teoria Perturbativa dipendente dal tempo

7.1 Oscillatore armonico: perturbazione istantanea

Due particelle di massa m si muovono lungo l'asse x interagendo mediante una forza elastica di costante k .

Supponendo che, mentre esse si trovano nello stato fondamentale di energia E_0 , la costante k si dimezzi improvvisamente, qual è la probabilità che una misura dell'energia dia come risultato l'energia dello stato fondamentale?

Soluzione

Dette x_1 e x_2 le coordinate delle due particelle, introduciamo la coordinata del centro di massa e quella relativa

$$X = \frac{x_1 + x_2}{2} \quad x = x_1 - x_2$$

e la massa totale M e la massa ridotta μ

$$M = 2m \quad \mu = \frac{m}{2}.$$

Ponendo

$$\Psi(X, x) = \Phi(X)\psi(x),$$

l'equazione di Schrödinger

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + V(x_1 - x_2) - W \right] \Psi(x_1, x_2) = 0$$

si separa nelle due equazioni

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dX^2} - E_{CM} \right] \Phi(X) = 0 \quad \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) - E \right] \psi(x) = 0 \quad (7.1)$$

con la condizione

$$W = E_{CM} + E.$$

Il centro di massa si muove di moto libero, mentre la massa ridotta descrive un oscillatore armonico. Ai fini del problema interessa solo il moto della coordinata relativa.

Inizialmente il sistema è descritto dalla funzione d'onda (A.16)

$$\psi_0(x) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} \quad \text{dove} \quad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} = \sqrt[4]{\frac{mk}{\hbar^2}}.$$

Si vuole sapere la probabilità che, dopo il dimezzamento della costante elastica, l'oscillatore sia nello stato fondamentale del nuovo sistema, cioè nella stato descritto da:

$$\psi'_0(x) = \left(\frac{\alpha'}{\sqrt{\pi}} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}\alpha'^2 x^2} \quad \text{dove} \quad \alpha' = \sqrt{\frac{m\omega'}{\hbar}} = \sqrt[4]{\frac{mk'}{\hbar^2}} = \frac{\alpha}{\sqrt[4]{2}}.$$

Si tratta di una perturbazione istantanea, nella quale lo stato della particella non cambia, mentre cambia il suo Hamiltoniano. Pertanto tale probabilità è data dal modulo quadro di

$$\begin{aligned} \langle \psi_0 | \psi'_0 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \sqrt{\frac{\alpha\alpha'}{\pi}} e^{-\frac{1}{2}(\alpha^2 + \alpha'^2)x^2} = \\ &= \sqrt{\frac{\alpha\alpha'}{\pi}} \sqrt{\frac{2\pi}{\alpha^2 + \alpha'^2}} = \sqrt{\frac{2\alpha\alpha'}{\alpha^2 + \alpha'^2}}, \end{aligned}$$

dove si è usata l'espressione A.1 per l'integrale gaussiano riportata in Appendice. Quindi la probabilità richiesta è data da:

$$P_0 = \frac{2\alpha\alpha'}{\alpha^2 + \alpha'^2} = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt[4]{2}(1 + \sqrt{2})} = 2^{\frac{5}{4}}(\sqrt{2} - 1) = 0.9852.$$

7.2 Oscillatore armonico in campo elettrico: perturbazione istantanea

Una particella di massa m e carica q è sottoposta ad oscillazioni armoniche di frequenza ω lungo l'asse x . Essa viene repentinamente posta in un campo elettrico uniforme che genera un potenziale

$$\mathcal{H}_1 = -q\mathcal{E}X.$$

Determinare le probabilità di transizione se il sistema si trova inizialmente nello stato fondamentale.

Soluzione

Dopo l'accensione del campo elettrico l'Hamiltoniano diventa

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - q\mathcal{E}X = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 (x - x_0)^2 - \frac{1}{2}\frac{q^2\mathcal{E}^2}{m\omega^2}$$

che rappresenta ancora l'Hamiltoniano di un oscillatore armonico con la stessa frequenza, ma di livelli di energia traslati e con centro di oscillazione

$$x_0 = \frac{q\mathcal{E}}{m\omega^2}.$$

Le autofunzioni di $\mathcal{H}_0$ sono date da (A.16)

$$\phi_n^0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi) \quad \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

mentre, detti $|k\rangle$ gli autoket del nuovo Hamiltoniano, le sue autofunzioni sono

$$\langle x|k\rangle = \phi_k(x) = \phi_k^0(x - x_0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^k k!}} e^{-\frac{(\xi - \xi_0)^2}{2}} H_k(\xi - \xi_0)$$

dove

$$\xi_0 = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_0.$$

Ricordando che (A.17)

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

le ampiezze di transizione sono date da

$$\begin{aligned} \langle k|0^0\rangle &= \int dx \phi_k^*(x) \phi_0^0(x) = \int dx \phi_k^0(x - x_0) \phi_0^0(x) = \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{2^k k!}} (-1)^k \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{(\xi - \xi_0)^2}{2}} e^{(\xi - \xi_0)^2} \frac{d^k e^{-(\xi - \xi_0)^2}}{d\xi^k} e^{-\frac{\xi^2}{2}} = \\ &= \frac{(-1)^k}{(\pi 2^k k!)^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{\xi_0^2}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\xi\xi_0} \frac{d^k e^{-\xi^2 + 2\xi\xi_0}}{d\xi^k}. \end{aligned} \quad (7.2)$$

Notiamo, integrando per parti

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\xi\xi_0} \frac{d^k e^{-\xi^2 + 2\xi\xi_0}}{d\xi^k} &= \\ = e^{-\xi\xi_0} \frac{d^{k-1} e^{-\xi^2 + 2\xi\xi_0}}{d\xi^{k-1}} \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} d\xi (-\xi_0) e^{-\xi\xi_0} \frac{d^{k-1} e^{-\xi^2 + 2\xi\xi_0}}{d\xi^{k-1}}. \end{aligned} \quad (7.3)$$

Il primo termine a secondo membro è nullo e, tornando alla (7.2) dopo aver iterato l'integrazione k volte, si ha

$$\begin{aligned} \langle k|0^0\rangle &= \frac{(-1)^k}{(\pi 2^k k!)^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{\xi_0^2}{2}} \xi_0^k \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\xi^2 + \xi\xi_0} = \\ &= \frac{(-1)^k}{(\pi 2^k k!)^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{\xi_0^2}{2}} \xi_0^k e^{\frac{\xi_0^2}{4}} \sqrt{\pi} = \frac{(-1)^k}{(2^k k!)^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{\xi_0^2}{4}} \xi_0^k. \end{aligned} \quad (7.4)$$

Quadrando si hanno le probabilità di transizione richieste

$$P_{0,k} = \left(\frac{\xi_0^2}{2} \right)^k \frac{e^{-\frac{\xi_0^2}{2}}}{k!}.$$

Vista come funzione di k , si tratta di una distribuzione di Poisson il cui valore di attesa è $\frac{\xi_0^2}{2}$. Poiché

$$\xi_0 = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_0 = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{q\mathcal{E}}{m\omega^2} = \frac{q\mathcal{E}}{\sqrt{m\hbar\omega^3}},$$

se la perturbazione è piccola, lo è anche ξ_0 e l'unica probabilità importante di transizione ad uno stato con $k \neq 0$ si ha per $k = 1$:

$$P_{0,1} = \frac{\xi_0^2}{2} \frac{e^{-\frac{\xi_0^2}{2}}}{1!} \simeq \frac{\xi_0^2}{2} = \frac{q^2 \mathcal{E}^2}{2m\hbar\omega^3}.$$

Questo risultato è confermato dall'applicazione della teoria perturbativa (A.74)

$$\begin{aligned} P_{0,k} &= \left| \frac{\langle k^0 | \mathcal{H}_1 | n^0 \rangle}{E_k^0 - E_n^0} \right|^2 = \frac{q^2 \mathcal{E}^2}{(k\hbar\omega)^2} |\langle k^0 | \mathcal{H}_1 | n^0 \rangle|^2 = \\ &= \frac{q^2 \mathcal{E}^2}{(k\hbar\omega)^2} \left| \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle k^0 | a + a^\dagger | n^0 \rangle \right|^2 = \frac{q^2 \mathcal{E}^2}{(k\hbar\omega)^2} \frac{\hbar}{2m\omega} \delta_{k,1} = \frac{q^2 \mathcal{E}^2}{2m\hbar\omega^3} \delta_{k,1}. \end{aligned}$$

7.3 Particella su un segmento: perturbazione quadrata

Considerare una particella di massa m vincolata a muoversi su un segmento di lunghezza a .

- Scrivere le prime 4 autofunzioni e i corrispondenti autovalori.
- La particella si trova nello stato fondamentale ($n = 1$). Al tempo $t = 0$ viene introdotto istantaneamente un potenziale quadrato di profondità $-V_0$ ($V_0 > 0$), di larghezza $b \ll a$ centrato intorno a $x = \frac{a}{2}$. Se questo potenziale viene rimosso dopo un intervallo di tempo Δt , quale sarà la probabilità di trovare il sistema in ciascuno degli stati con $n = 2, n = 3, n = 4$?

Soluzione

- Autovalori ed autofunzioni richieste sono dati da

$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}, & \psi_1(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a} \\ E_2 &= \frac{4\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}, & \psi_2(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{2\pi x}{a} \\ E_3 &= \frac{9\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}, & \psi_3(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{3\pi x}{a} \\ E_4 &= \frac{16\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}, & \psi_4(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{4\pi x}{a}. \end{aligned}$$

b) Le probabilità di transizione (A.76) sono date da

$$P_{1 \rightarrow n}(\Delta t) = \left| -\frac{i}{\hbar} \int_0^{\Delta t} dt \langle n | \mathcal{H}_1 | 1 \rangle e^{i\omega_{n,1}t} \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |\langle n | \mathcal{H}_1 | 1 \rangle|^2 \left| \frac{e^{i\omega_{n,1}\Delta t} - 1}{i\omega_{n,1}} \right|^2$$

dove gli elementi di matrice sono dati da:

$$\langle n | \mathcal{H}_1 | 1 \rangle = -\frac{2V_0}{a} \int_{\frac{a-b}{2}}^{\frac{a+b}{2}} dx \sin \frac{n\pi x}{a} \sin \frac{\pi x}{a}$$

e $\omega_{n,1} = \frac{E_n^{(0)} - E_1^{(0)}}{\hbar} = \frac{\hbar\pi^2}{2ma^2} (n^2 - 1)$ con $n \neq 1$.

L'integrale è nullo per $n = 2$ e $n = 4$ perché, l'integrando si presenta come il prodotto di una funzione antisimmetrica (l'autofunzione n -sima) per una funzione simmetrica (l'autofunzione dello stato fondamentale) per riflessioni rispetto al centro dell'intervallo d'integrazione.

Rimane da calcolare la probabilità di transizione al terzo livello. Poiché

$$\int_{\frac{a-b}{2}}^{\frac{a+b}{2}} dx \sin \frac{n\pi x}{a} \sin \frac{\pi x}{a} = -\frac{a \left(2 \sin \left(\frac{\pi b}{a} \right) + \sin \left(\frac{2\pi b}{a} \right) \right)}{4\pi}$$

il risultato è

$$P_{1 \rightarrow 3}(\Delta t) = \left(\frac{V_0}{\hbar\omega_{3,1}} \right)^2 \sin^2 \left(\frac{\omega_{3,1} \Delta t}{2} \right) \left(\frac{2 \sin \left(\frac{\pi b}{a} \right) + \sin \left(\frac{2\pi b}{a} \right)}{\pi} \right)^2.$$

Volendo abbreviare i conti, l'integrale può essere approssimato con il prodotto del valore dell'integrando al centro dell'intervallo d'integrazione ($\frac{a}{2}$) per l'ampiezza dell'intervallo stesso ($\frac{b}{2}$):

$$P_{1 \rightarrow 3}(\Delta t) \simeq \left(\frac{2V_0 b}{a} \right)^2 \frac{4}{\hbar^2 \omega_{3,1}^2} \sin^2 \left(\frac{\omega_{3,1} \Delta t}{2} \right).$$

7.4 Oscillatore armonico con perturbazione gaussiana

Consideriamo un oscillatore armonico unidimensionale nello stato fondamentale al tempo $t = -\infty$ in presenza della perturbazione

$$\mathcal{H}_1(t) = -qEX e^{-\frac{t^2}{\tau^2}}.$$

Qual è la probabilità che al tempo $t = +\infty$ l'oscillatore si trovi nello stato $|n\rangle$?

Soluzione

Calcoliamo i coefficienti dello sviluppo (A.75) del ket di stato al tempo $t = +\infty$ nella base dell'oscillatore armonico per $n \neq 0$:

$$d_n(\infty) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt (-qE) \langle n | X | 0 \rangle e^{-\frac{t^2}{\tau^2}} e^{i\omega n t}.$$

Poiché

$$X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger),$$

e $a^\dagger|0\rangle = |1\rangle$ e $a|1\rangle = 0$, l'unico coefficiente non nullo è d_1

$$\begin{aligned} d_1(\infty) &= \frac{iqE}{\hbar} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-\frac{t^2}{\tau^2}} e^{i\omega t} = \\ &= \frac{iqE}{\hbar} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{\pi\tau^2} e^{-\frac{\omega^2\tau^2}{4}}. \end{aligned}$$

La probabilità di transizione cercata è

$$P_{0 \rightarrow 1} = \frac{q^2 E^2 \pi \tau^2}{2m\omega\hbar} e^{-\frac{\omega^2\tau^2}{2}}.$$

7.5 Oscillatore armonico con perturbazione smorzata

Su un oscillatore armonico di massa m e pulsazione ω agisce, a partire dall'istante $t = 0$, la perturbazione

$$\mathcal{H}_1(x, t) = Ax^2 e^{-bt}.$$

Usando la teoria perturbativa al I ordine si determino le probabilità di transizione dallo stato fondamentale allo n -simo stato dell'oscillatore dopo un lungo periodo di tempo.

Soluzione

La probabilità cercata, con $n \neq 0$, è data da

$$\begin{aligned} P_{0 \rightarrow n} &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^\infty dt \langle n | AX^2 e^{-bt} | 0 \rangle e^{i\omega_{n,0}t} \right|^2 = \\ &= \frac{A^2}{\hbar^2} |\langle n | X^2 | 0 \rangle|^2 \left| \int_0^\infty dt e^{(i\omega_{n,0} - b)t} \right|^2 = \\ &= \frac{A^2}{\hbar^2} \frac{1}{\omega_{n,0}^2 + b^2} \left| \frac{\hbar}{2m\omega} (\sqrt{2}\delta_{n,2} + \delta_{n,0}) \right|^2 \end{aligned}$$

dove abbiamo usato il risultato dell'esercizio (2.18). È dunque possibile una sola transizione allo stato $n = 2$ con probabilità

$$P_{0 \rightarrow 2} = \frac{2A^2}{\hbar^2} \frac{1}{4\omega^2 + b^2} \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 = \frac{A^2}{2m^2\omega^2} \frac{1}{4\omega^2 + b^2}.$$

7.6 Atomo d'idrogeno in campo elettrico impulsato

Al tempo $t = -\infty$ un atomo d'idrogeno si trova nello stato fondamentale; viene applicato un campo elettrico diretto lungo l'asse z

$$\mathbf{E}(t) = \hat{\mathbf{k}} E_0 e^{-\frac{t^2}{\tau^2}}.$$

Determinare al I ordine in teoria perturbativa la probabilità che al tempo $t = +\infty$ l'atomo si trovi in uno degli stati con $n = 2$.

Soluzione

Detto $\mathbf{r}_1$ e $\mathbf{r}_2$ rispettivamente la posizione dell'elettrone e del protone, e $V(\mathbf{r})$ il potenziale generato dal campo elettrico su una carica posta in $\mathbf{r}$ abbiamo

$$V(\mathbf{r}) = - \int \mathbf{E} \cdot d\mathbf{r} = -E_0 z e^{-\frac{t^2}{\tau^2}}.$$

Il termine di energia potenziale della perturbazione è quindi

$$\mathcal{H}_1(\mathbf{r}, t) = -eV(\mathbf{r}_1) + eV(\mathbf{r}_2) = ezE_0 e^{-\frac{t^2}{\tau^2}},$$

che rappresenta l'interazione del campo esterno con il dipolo dell'atomo.

Gli stati con $n = 2$ sono 4 e corrispondono allo stato con $\ell = 0$ e ai 3 stati con $\ell = 1$ e $m = 0, \pm 1$. La probabilità richiesta è data (A.76), dunque, da

$$P_{0 \rightarrow 2} = \sum_{\ell=0,1} \sum_{m=-\ell,\ell} |d_{2,\ell,m}(+\infty)|^2,$$

dove

$$d_{2,\ell,m}(+\infty) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega_{2,1}t} \langle 2, \ell, m | \mathcal{H}_1 | 1, 0, 0 \rangle.$$

Detta μ la massa ridotta dell'atomo d'idrogeno e α la costante di struttura fine, la frequenza di transizione è data da

$$\omega_{2,1} = -\frac{1}{2\hbar} \mu c^2 \alpha^2 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{1^2} \right) = \frac{3}{8\hbar} \mu c^2 \alpha^2.$$

Per calcolare gli elementi di matrice della perturbazione, notiamo che $\mathcal{H}_1$ commuta con L_z , l'operatore i cui numeri quantici etichettano gli stati imperturbati. Questo ci dice che possono essere diversi da zero solo gli elementi di matrice tra stati con uguale valore di m (regola di selezione $\Delta m = 0$ per le transizioni di dipolo). Infatti

$$[\mathcal{H}_1, L_z] = 0 \Rightarrow 0 = \langle n, \ell, m | [\mathcal{H}_1, L_z] | n', \ell', m' \rangle = \hbar(m' - m) \langle n, \ell, m | \mathcal{H}_1 | n', \ell', m' \rangle.$$

Ci siamo, dunque, ridotti a calcolare soltanto i due termini relativi a $m = 0$. L'altra regola di selezione per le transizioni di dipolo è $\Delta \ell = \pm 1$. È facile vedere, infatti, che, se ℓ non cambia, gli elementi di matrice conteranno z , proveniente da $\mathcal{H}_1$, che ha

parità negativa e il prodotto di due funzioni d'onda con la stessa parità. L'integrale su tutto lo spazio sarà quindi nullo¹. Ci rimane da calcolare l'unico elemento di matrice non nullo. Tenendo conto delle espressioni per le funzioni d'onda dell'atomo d'idrogeno (A.58):

$$\begin{aligned}
 \langle 2, 1, 0 | Z | 1, 0, 0 \rangle &= \\
 &= \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \frac{1}{\sqrt{\pi}} a_0^{-3} \int_0^\infty r^2 dr \int_{-1}^{+1} d\cos\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \cos\theta r \cos\theta e^{-\frac{r}{a_0}} = \\
 &= \frac{1}{2\sqrt{2}} a_0^{-4} \int_0^\infty dr r^4 e^{-\frac{3r}{2a_0}} \int_{-1}^{+1} d\cos\theta \cos^2\theta = \\
 &= \frac{1}{3\sqrt{2}} a_0 \frac{2^5}{3^5} \int_0^\infty dx x^4 e^{-x} = \\
 &= \frac{2^7\sqrt{2}}{3^5} a_0
 \end{aligned}$$

dove abbiamo tenuto conto dell'integrale (A.6). Sostituendo questa espressione nell'ampiezza di probabilità, abbiamo:

$$\begin{aligned}
 d_{2,\ell,m}(+\infty) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega_{2,1}t} e E_0 \frac{2^7\sqrt{2}}{3^5} a_0 e^{-\frac{t^2}{\tau^2}} \\
 &= -\frac{i}{\hbar} e E_0 a_0 \frac{2^7\sqrt{2}}{3^5} e^{-\frac{(\omega_{2,1}\tau)^2}{4}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-\frac{1}{\tau^2} (t - i\frac{\omega_{2,1}\tau^2}{4})^2} \\
 &= -\frac{i}{\hbar} e E_0 a_0 \frac{2^7\sqrt{2}}{3^5} \tau \sqrt{\pi} e^{-\frac{(\omega_{2,1}\tau)^2}{4}}.
 \end{aligned}$$

¹ Per le regole di selezione vedere il problema 3.10.

8

Particelle identiche

8.1 Due fermioni su un segmento

Due particelle non identiche entrambe di spin $\frac{1}{2}$ e massa m sono costrette a muoversi su un segmento di lunghezza L interagendo tramite un potenziale

$$V = k \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2.$$

Determinare gli autovalori e le autofunzioni dell'Hamiltoniano.

Cosa succederebbe se le particelle fossero identiche?

Soluzione

Poiché il potenziale dipende solo dagli stati di spin e si tratta di particelle non identiche, cerchiamo autofunzioni fattorizzate nella forma

$$\Psi(1, 2) = \psi_{n_1, n_2}(x_1, x_2) \chi(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2),$$

dove

$$\psi_{n_1, n_2}(x_1, x_2) = \psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2),$$

$\psi_n(x)$, con $n = 1, 2, \dots$, sono le autofunzioni dell'energia per una particella nel pozzo di potenziale e $\chi(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2)$ rappresenta gli autostati di spin. Il potenziale dipende soltanto dal prodotto scalare tra gli spin che può essere riscritto in termini dello spin totale $\mathbf{S}$:

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = \frac{1}{2} [(\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2 - S_1^2 - S_2^2] = \frac{1}{2} \left[S^2 - \frac{3}{2} \hbar^2 \right].$$

Quindi la fattorizzazione si ha solo se utilizziamo gli autostati dello spin totale (di S^2 e S_z), cioè gli stati di singoletto ($S = 0$) e di tripletto ($S = 1$).

In definitiva le autofunzioni comuni all'Hamiltoniano, S^2 e S_z sono:

$$\Psi_{n_1, n_2; s, m_s}(x_1, x_2) = \psi_{n_1, n_2}(x_1, x_2) \chi_{s, m_s}$$

con

$$\begin{aligned}\chi^{0,0} &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(1) \chi_-(2) - \chi_-(1) \chi_+(2)] \\ \chi^{1,-1} &= \chi_-(1) \chi_-(2) \\ \chi^{1,0} &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(1) \chi_-(2) + \chi_-(1) \chi_+(2)] \\ \chi^{1,+1} &= \chi_+(1) \chi_+(2)\end{aligned}$$

e corrispondono agli autovalori dell'energia

$$E_{n,s} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 + k \left[s(s+1) - \frac{3}{4} \right] \hbar^2, \text{ con } n^2 = n_1^2 + n_2^2 \text{ e } n_1, n_2 = 1, 2, \dots$$

La degenerazione è il prodotto di $2s+1$ per la degenerazione che interviene se esiste più di una coppia (n_1, n_2) che porta allo stesso valore di n .

Nel caso di particelle identiche, gli autovalori non cambiano, ma la loro degenerazione si riduce. Occorre, infatti, costruire le combinazioni simmetriche e antisimmetriche delle autofunzioni relative alle coordinate spaziali (gli autostati dello spin hanno già proprietà di simmetria) e imporre l'antisimmetria delle autofunzioni complessive.

Se $S = 0$, la parte spaziale deve essere simmetrica e, in corrispondenza degli autovalori $E_{n,0} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 - \frac{3}{4} k \hbar^2$, si ha:

$$\Psi_{n_1, n_2; 0, 0}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2) + \psi_{n_2}(x_1) \psi_{n_1}(x_2)] \chi^{0,0} \text{ se } n_1 \neq n_2$$

e

$$\Psi_{n_1, n_2; 0, 0}(x_1, x_2) = \psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2) \chi^{0,0} \text{ se } n_1 = n_2.$$

Gli stati relativi a $S = 1$ corrispondono agli autovalori $E_{n,1} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 + \frac{5}{4} k \hbar^2$ e hanno parte spaziale antisimmetrica. Per questo deve essere $n_1 \neq n_2$ e le autofunzioni sono

$$\Psi_{n_1, n_2; 1, m_s}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2) - \psi_{n_2}(x_1) \psi_{n_1}(x_2)] \chi^{1, m_s}.$$

con $m_s = 0, \pm 1$.

8.2 Due fermioni su un segmento in presenza di potenziale δ

Due fermioni identici di massa m , vincolati a muoversi su un segmento di lunghezza L , hanno entrambi componente lungo l'asse z dello spin pari a $+\frac{\hbar}{2}$.

- Quali sono l'energia minima del sistema e la funzione d'onda corrispondente?
- Se è presente un'energia potenziale di interazione $k\delta(x_1 - x_2)$, come si modifica il valore già trovato dell'energia nel calcolo perturbativo al 1° ordine?

Soluzione

- a) Si tratta di un sistema di due fermioni identici non interagenti la cui funzione d'onda di spin è

$$\chi(s_z^{(1)}, s_z^{(2)}) = \chi\left(+\frac{\hbar}{2}, +\frac{\hbar}{2}\right).$$

Ciascuna delle due particelle, se isolata, ha autofunzioni e autovalori dell'energia dati da

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \quad E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad \text{con } n = 1, 2, \dots$$

Le due particelle sono non interagenti e, quindi, la parte spaziale della generica autofunzione si può scrivere come prodotto di due autofunzioni relative all'Hamiltoniano di singola particella e l'autovalore è la somma dei due corrispondenti autovalori dell'energia. Poiché tuttavia la funzione d'onda complessiva del sistema deve essere antisimmetrica nello scambio delle due particelle e la funzione di spin nel caso in considerazione è simmetrica, occorre che la parte spaziale sia antisimmetrica. Per questo lo stato di minima energia non può essere quello in cui le due particelle sono nello stato fondamentale, bensì

$$\Psi_{s_z^{(1)}, s_z^{(2)}}(x_1, x_2) = \frac{1}{2} (\psi_1(x_1)\psi_2(x_2) - \psi_2(x_1)\psi_1(x_2)) \chi\left(+\frac{\hbar}{2}, +\frac{\hbar}{2}\right)$$

corrispondente al livello di energia

$$E_{1,2} = \frac{5\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}.$$

- b) Introducendo il potenziale d'interazione, il livello di energia non viene modificato dalla teoria perturbativa al I ordine. Infatti risulta:

$$\begin{aligned} E'_{1,2} &= k \int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 \Psi_{s_z^{(1)}, s_z^{(2)}}^*(x_1, x_2) \delta(x_1 - x_2) \Psi_{s_z^{(1)}, s_z^{(2)}}(x_1, x_2) = \\ &= k \int_0^L dx \left| \Psi_{s_z^{(1)}, s_z^{(2)}}(x, x) \right|^2 = 0 \end{aligned}$$

a causa dell'antisimmetria della funzione integranda.

8.3 Due fermioni interagenti

Due particelle di uguale massa e spin $\frac{1}{2}$ sono vincolate a muoversi su una retta e interagiscono tramite un potenziale

$$V = \frac{1}{2} kx^2 + a \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$$

dove $k > 0$ è una costante, x è la distanza relativa tra le particelle e $\mathbf{S}_1$ e $\mathbf{S}_2$ sono i loro operatori di spin.

Determinare gli autovalori dell'energia nel caso in cui le particelle siano differenti e nel caso in cui siano identiche.

Soluzione

Separato il moto del centro di massa da quello della coordinata relativa x , ci limitiamo a considerare quest'ultimo. Notiamo che

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = \frac{1}{2} (S^2 - S_1^2 - S_2^2) = \frac{1}{2} \left(S^2 - \frac{3}{2} \hbar^2 \right).$$

Ne consegue che l'Hamiltoniano commuta con S^2 e S_z e, quindi, che possiamo considerare gli autostati comuni a $\mathcal{H}$, S^2 e S_z . Essi sono dati dal prodotto diretto degli autostati dell'oscillatore armonico con gli autostati di S^2 e S_z .

Gli autovalori, se le particelle sono distinguibili, sono perciò dati da:

$$\begin{aligned} E_n^{s=1} &= \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega + \frac{1}{4} a \hbar^2 && \text{per i 3 stati di tripletto} \\ E_n^{s=0} &= \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega - \frac{3}{4} a \hbar^2 && \text{per lo stato di singoletto} \end{aligned}$$

con $n = 0, 1, \dots$

Se le particelle sono identiche, ricordando che le autofunzioni dell'Oscillatore Armonico sono pari in x (e quindi simmetriche per lo scambio delle due particelle) se n è pari, gli autovalori non cambiano, ma gli stati di tripletto (simmetrici) possono avere solo n dispari e gli stati di singoletto (antisimmetrici) solo n pari.

8.4 Due oscillatori fermionici identici

Un sistema composto di due particelle identiche di spin $\frac{1}{2}$ vincolate a muoversi su una retta è descritto dall'Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} (p_1^2 + p_2^2) + \frac{1}{2} m \omega^2 (x_1^2 + x_2^2).$$

Determinare la funzione d'onda completa (parte spaziale e parte di spin) degli stati corrispondenti al livello fondamentale ed al primo livello eccitato, nonché i relativi autovalori di $\mathcal{H}$, di $\mathbf{S}^2 = (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2$ e di S_z .

Soluzione

Per la particella i -esima denotiamo con $\psi_n(x_i)$ le autofunzioni dell'energia in un potenziale armonico unidimensionale e con $\chi_{\pm}(i)$ gli autostati dello spin. Trattandosi di fermioni le autofunzioni comuni a $\mathcal{H}$, S^2 , S_z devono essere antisimmetriche per lo scambio delle due particelle. Per quanto riguarda le coordinate spaziali possiamo costruire le seguenti autofunzioni del sistema completo aventi proprietà di simmetria definita (indicata con $+$ e $-$):

$$\psi_0^+(x_1, x_2) = \psi_0(x_1) \psi_0(x_2) \quad \text{con energia } E = \hbar \omega$$

e

$$\left. \begin{aligned} \psi_1^+(x_1, x_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_0(x_1) \psi_1(x_2) + \psi_1(x_1) \psi_0(x_2)] \\ \psi_1^-(x_1, x_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_0(x_1) \psi_1(x_2) - \psi_1(x_1) \psi_0(x_2)] \end{aligned} \right\} \text{ con energia } E = 2\hbar\omega.$$

Gli stati di spin possibili sono quelli di singoletto e di tripletto. Indicando con χ^{s, s_z} gli stati di spin totale $\mathbf{S}$ con $S^2 = s(s+1)\hbar^2$ e $S_z = s_z\hbar$, abbiamo uno stato antisimmetrico e tre stati simmetrici

$$\begin{aligned} \chi^{0,0} &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(1) \chi_-(2) - \chi_-(1) \chi_+(2)] \\ \chi^{1,-1} &= \chi_-(1) \chi_-(2) \\ \chi^{1,0} &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(1) \chi_-(2) + \chi_-(1) \chi_+(2)] \\ \chi^{1,+1} &= \chi_+(1) \chi_+(2). \end{aligned}$$

Le funzioni d'onda complessive completamente antisimmetriche sono:

$$\psi_0^+(x_1, x_2) \chi^{0,0} \quad \text{per lo stato fondamentale}$$

e

$$\left. \begin{aligned} \psi_1^+(x_1, x_2) \chi^{0,0} \\ \psi_1^-(x_1, x_2) \chi^{1,-1} \\ \psi_1^-(x_1, x_2) \chi^{1,0} \\ \psi_1^-(x_1, x_2) \chi^{1,+1} \end{aligned} \right\} \quad \text{per il primo livello eccitato.}$$

8.5 Oscillatore doppio per particelle identiche

Due particelle, ciascuna di massa m , sono confinate nel potenziale di un oscillatore armonico unidimensionale

$$V = \frac{1}{2} kx^2$$

e interagiscono tra di loro mediante un'altra forza elastica attrattiva di costante elastica $\bar{k} \ll k$.

- Quali sono gli autostati corrispondenti ai tre livelli più bassi dell'Hamiltoniano del sistema?
- Se le particelle sono identiche e hanno spin 0 quali di questi tre stati sono permessi?
- Se le particelle sono identiche e hanno spin $\frac{1}{2}$, qual è lo spin totale di ciascuno di questi tre stati?

(Suggerimento: utilizzare un opportuno cambio di variabili.)

Soluzione

Dette x_1 e x_2 le coordinate delle due particelle, l'Hamiltoniano del sistema è

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) + \frac{1}{2} k(x_1^2 + x_2^2) + \frac{1}{2} \bar{k}(x_1 - x_2)^2.$$

Introduciamo le coordinate del centro di massa e relativa

$$X = \frac{x_1 + x_2}{2} \quad \text{e} \quad x = x_1 - x_2.$$

In queste variabili l'Hamiltoniano si presenta come somma di termini relativi ad oscillatori armonici ciascuno dipendente da una sola variabile

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \mathcal{H}_{CM} + \mathcal{H}_r \\ \mathcal{H}_{CM} &= -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{1}{2} M \omega^2 X^2 \\ \mathcal{H}_r &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} \mu \omega'^2 x^2 \end{aligned}$$

dove abbiamo introdotto la massa totale del sistema e la massa ridotta

$$M = 2m \quad \text{e} \quad \mu = \frac{m}{2}$$

e le pulsazioni

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad \text{e} \quad \omega' = \sqrt{\frac{\frac{k}{2} + \bar{k}}{\mu}}.$$

La separazione di variabili consente di risolvere separatamente le equazioni agli autovalori per l'Hamiltoniano: le autofunzioni sono il prodotto delle autofunzioni dei singoli oscillatori e gli autovalori sono la somma degli autovalori.

- a) Per determinare i livelli più bassi di energia occorre tener conto dell'ipotesi $\chi \ll k$, per cui $2\hbar\omega > \hbar\omega' > \hbar\omega$. Quindi i tre livelli più bassi di energia sono nell'ordine:

$$\begin{aligned} E_0 &= \frac{1}{2} \hbar(\omega + \omega') \\ E_1 &= E_0 + \hbar\omega \\ E_2 &= E_0 + \hbar\omega'. \end{aligned}$$

Le tre corrispondenti autofunzioni sono date, detta $\phi_n^{(\omega)}(x)$ l'autofunzione n -sima di un oscillatore armonico di pulsazione ω , da

$$\begin{aligned} \psi_0(x_1, x_2) &= \phi_0^{(\omega)}(X) \phi_0^{(\omega')}(x) \\ \psi_1(x_1, x_2) &= \phi_1^{(\omega)}(X) \phi_0^{(\omega')}(x) \\ \psi_2(x_1, x_2) &= \phi_0^{(\omega)}(X) \phi_1^{(\omega')}(x). \end{aligned}$$

- b) Se le particelle sono bosoni identici, la funzione d'onda deve essere simmetrica per lo scambio delle coordinate $x_1 \leftrightarrow x_2$, che corrisponde allo scambio $x \leftrightarrow -x$. Per questo, tenendo conto del fatto che l'autofunzione n -sima dell'oscillatore armonico hanno parità -1^n , il terzo livello non è permesso.
- c) Se le particelle sono fermioni, le funzioni d'onda devono essere moltiplicate per l'autofunzione dello spin totale, che è antisimmetrica nel caso di spin 0 (singoletto) e simmetrica nel caso di spin 1 (tripletto). Se i fermioni sono identici la funzione d'onda deve risultare complessivamente antisimmetrica per scambio. Avremo, dunque, i seguenti stati di spin totale per ciascuno dei 3 livelli:

$$E_0 \rightarrow S = 0$$

$$E_1 \rightarrow S = 0$$

$$E_2 \rightarrow S = 1.$$

8.6 Particelle identiche in una scatola

Due particelle identiche di massa m e non interagenti sono chiuse nella scatola $|x| < a$, $|y| < b$, $|z| < c$, con $a > b > c > 0$.

- a) Determinare autovalori ed autofunzioni dell'energia, precisando il grado di degenerazione, per il livello fondamentale ed il primo livello eccitato, nel caso di particelle prive di spin e nel caso di fermioni.
- b) Supponendo che si tratti di fermioni in uno degli autostati comuni allo spin totale e all'Hamiltoniano corrispondenti al primo stato eccitato, determinare la probabilità di trovare entrambe le particelle nella regione $x > 0$.
- c) Supponiamo, sempre nel caso di fermioni, di aggiungere all'Hamiltoniano il termine

$$\lambda V = \lambda \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^4} \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2 \quad (\lambda \ll 1).$$

Si determinino le correzioni al primo ordine in teoria delle perturbazioni ai primi due livelli.

Soluzione

L'Hamiltoniano è separabile nelle tre variabili, ciascuna delle quali è vincolata su un segmento di differente lunghezza. Ciascuna delle particelle, se presente singolarmente, avrebbe autofunzioni dell'energia

$$\psi_{k,l,m}(\mathbf{r}) = \psi_k(x) \psi_l(y) \psi_m(z)$$

dove

$$\psi_k(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{a}} \cos \frac{k\pi x}{2a}, & \text{se } k \text{ è dispari;} \\ \sqrt{\frac{1}{a}} \sin \frac{k\pi x}{2a}, & \text{se } k \text{ è pari;} \end{cases}$$

all'interno del segmento $(-a, a)$ e nulla all'esterno. Analoghe espressioni si avrebbero per $\psi_l(y)$ e $\psi_m(z)$. Gli autovalori corrispondenti sarebbero

$$E_{k,l,m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m} \left(\frac{k^2}{a^2} + \frac{l^2}{b^2} + \frac{m^2}{c^2} \right).$$

- a) In assenza di spin, e quindi di proprietà di simmetria per scambio, lo stato fondamentale è non degenere, ha energia pari a $2E_{1,1,1}$ e funzione d'onda

$$\psi_{1,1,1}(\mathbf{r}_1) \psi_{1,1,1}(\mathbf{r}_2),$$

che è, tuttavia, simmetrica per scambio delle due particelle.

Il primo livello eccitato si ottiene incrementando il numero quantico relativo alla coordinata x a $k = 2$ (ricordiamo che $a > b > c$). Esso è degenere doppiamente, ha energia pari a $E_{1,1,1} + E_{2,1,1}$ e autofunzioni

$$\begin{aligned} \psi_{1,1,1}(\mathbf{r}_1) \psi_{2,1,1}(\mathbf{r}_2) \\ \psi_{2,1,1}(\mathbf{r}_1) \psi_{1,1,1}(\mathbf{r}_2) \end{aligned}$$

che possono essere combinate in modo simmetrico o antisimmetrico.

Nel caso di fermioni occorre imporre l'antisimmetria della funzione d'onda completa (posizione e spin) per scambio di particelle. I livelli di energia non cambiano, mentre per quanto riguarda le autofunzioni la situazione è simile a quella del problema 8.4. Utilizzando la stessa notazione per gli stati di spin avremo uno stato fondamentale non degenere con funzione d'onda

$$\psi_{1,1,1}(\mathbf{r}_1) \psi_{1,1,1}(\mathbf{r}_2) \chi^{0,0}$$

mentre il primo livello eccitato è quattro volte degenere, ha energia pari a $E_{1,1,1} + E_{2,1,1}$ e funzioni d'onda

$$\begin{aligned} \psi_1^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \chi^{0,0} \\ \psi_1^-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \chi^{1,-1} \\ \psi_1^-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \chi^{1,0} \\ \psi_1^-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \chi^{1,+1} \end{aligned}$$

dove

$$\begin{aligned} \psi_1^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{1,1,1}(\mathbf{r}_1) \psi_{2,1,1}(\mathbf{r}_2) + \psi_{2,1,1}(\mathbf{r}_1) \psi_{1,1,1}(\mathbf{r}_2)] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(x_1) \psi_2(x_2) + \psi_2(x_1) \psi_1(x_2)] \psi_1(y_1) \psi_1(z_1) \psi_1(y_2) \psi_1(z_2) \\ \psi_1^-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{1,1,1}(\mathbf{r}_1) \psi_{2,1,1}(\mathbf{r}_2) - \psi_{2,1,1}(\mathbf{r}_1) \psi_{1,1,1}(\mathbf{r}_2)] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(x_1) \psi_2(x_2) - \psi_2(x_1) \psi_1(x_2)] \psi_1(y_1) \psi_1(z_1) \psi_1(y_2) \psi_1(z_2). \end{aligned}$$

- b) Tenendo conto della normalizzazione relativa alla parte della funzione d'onda dipendente da y e z , dobbiamo calcolare:

$$\begin{aligned}
P_{\pm}(x_1 > 0, x_2 > 0) &= \frac{1}{2} \int_0^a dx_1 \int_0^a dx_2 [\psi_1(x_1) \psi_2(x_2) \pm \psi_2(x_1) \psi_1(x_2)]^2 = \\
&= \frac{1}{2} \int_0^a dx_1 \int_0^a dx_2 [\psi_1^2(x_1) \psi_2^2(x_2) + \psi_2^2(x_1) \psi_1^2(x_2) \pm \\
&\quad \pm 2\psi_1(x_1) \psi_2(x_2) \psi_2(x_1) \psi_1(x_2)] = \\
&= \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{2} \pm 2 \left[\int_0^a dx \psi_1(x) \psi_2(x) \right]^2 \right\} = \\
&= \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{2} \pm \frac{2}{a} \left[\int_0^a dx \cos \frac{\pi x}{2a} \sin \frac{\pi x}{a} \right]^2 \right\} = \\
&= \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{2} \pm 2 \left[\frac{4}{3\pi} \right]^2 \right\}.
\end{aligned}$$

c) Per ciascuno stato richiesto $|\psi\rangle$, dobbiamo calcolare

$$\langle \psi | \lambda V | \psi \rangle = \lambda \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^4} I$$

dove I è dato da

$$I = \langle \psi | x_1 x_2 + y_1 y_2 + z_1 z_2 | \psi \rangle.$$

Nello stato fondamentale

$$I = \langle x_1 \rangle \langle x_2 \rangle + \langle y_1 \rangle \langle y_2 \rangle + \langle z_1 \rangle \langle z_2 \rangle = 0$$

poiché, per la simmetria degli stati, ciascun valore d'attesa è nullo.

Nel caso del primo livello eccitato occorre diagonalizzare la matrice relativa alle due diverse funzioni d'onda (il potenziale non dipende dallo spin). Consideriamo prima gli elementi diagonal, per i quali si vede subito che le coordinate y e z non danno contributo. Per il primo termine della diagonale si ha:

$$\begin{aligned}
I_{+,+} &= \langle \psi_1^+ | x_1 x_2 | \psi_1^+ \rangle \\
&= \frac{1}{2} \int_{-a}^a dx_1 dx_2 x_1 x_2 [\psi_1(x_1) \psi_2(x_2) + \psi_2(x_1) \psi_1(x_2)]^2.
\end{aligned}$$

Sviluppato il quadrato, notiamo che i due termini quadratici danno risultato nullo poiché proporzionali al valore d'attesa di x in un autostato della buca. Si ottiene quindi, integrando per parti,

$$I_{+,+} = \left[\int_{-a}^a dx x \psi_1(x) \psi_2(x) \right]^2 = 2 \left(\frac{32a}{9\pi^2} \right)^2.$$

In modo analogo si ottiene:

$$I_{-,-} = \langle \psi_1^- | x_1 x_2 | \psi_1^- \rangle = -2 \left(\frac{32a}{9\pi^2} \right)^2.$$

È facile vedere, con calcoli analoghi, che i termini non diagonal sono nulli. Quindi le correzioni al primo livello eccitato sono:

$$\langle \psi_1^{\pm} | \lambda V | \psi_1^{\pm} \rangle = \pm \frac{128}{81} \lambda \frac{\hbar^2}{ma^2 \pi^2}.$$

8.7 Tre fermioni su un segmento con accoppiamento tra gli spin

Tre particelle identiche di massa m e spin $1/2$ sono confinate sul segmento $(0, a)$ dell'asse x . Esse sono soggette al potenziale

$$V = \alpha (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3)$$

con $\alpha < 0$ e $\mathbf{S}_i$ spin della particella i -esima. Una misura della componente dello spin totale lungo l'asse z fornisce il valore $S_z = +\frac{3}{2}\hbar$. Scrivere le possibili autofunzioni dell'energia ed i relativi autovalori. Qual è l'autofunzione dello stato fondamentale del sistema in questo stato di spin? Qual è il relativo autovalore?

Soluzione

Notiamo che il potenziale può essere riscritto nella forma

$$V = \frac{\alpha}{2} (S^2 - S_1^2 - S_2^2 - S_3^2),$$

per cui le autofunzioni dell'energia sono il prodotto di autofunzioni relative alle coordinate spaziali per autofunzioni dello spin totale. Si tratta di un sistema di tre fermioni in uno stato con $S_z = +\frac{3}{2}\hbar$ ed $s = \frac{3}{2}$ che è il massimo valore che s può assumere. Gli spin delle tre particelle hanno uguale componente z , quindi l'autofunzione dello spin totale è simmetrica e la parte dipendente dalle coordinate spaziali deve essere antisimmetrica:

$$\Psi_{n_1, n_2, n_3; \frac{3}{2}, +\frac{3}{2}}(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \det \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(x_1) & \psi_{n_1}(x_2) & \psi_{n_1}(x_3) \\ \psi_{n_2}(x_1) & \psi_{n_2}(x_2) & \psi_{n_2}(x_3) \\ \psi_{n_3}(x_1) & \psi_{n_3}(x_2) & \psi_{n_3}(x_3) \end{vmatrix} \chi^{\frac{3}{2}, \frac{3}{2}}.$$

L'autovalore corrispondente è

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) + \frac{3}{4} \alpha \hbar^2 \quad \text{con } n_1, n_2, n_3 = 1, 2, \dots$$

Dato lo stato di spin, anche nello stato fondamentale la parte spaziale dell'autofunzione deve essere antisimmetrica, quindi i tre numeri quantici devono essere diversi e tali che l'energia è minima, quindi $n_1 = 1$, $n_2 = 2$, $n_3 = 3$. Si ottiene così

$$\Psi_{1,2,3; \frac{3}{2}, +\frac{3}{2}}(x_1, x_2, x_3).$$

L'autovalore relativo è

$$E = \left[\frac{7\pi^2}{ma^2} + \frac{3}{4} \alpha \right] \hbar^2.$$

8.8 Due fermioni interagenti in una sfera

Due particelle identiche di spin $\frac{1}{2}$ si trovano in una sfera impenetrabile di raggio R .

- Scrivere le autofunzioni dell'energia relative allo stato fondamentale e al primo stato eccitato.

- b) Calcolare come si modifica la degenerazione se interviene un'interazione

$$V = \alpha \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2,$$

dove $\mathbf{S}_1$ e $\mathbf{S}_2$ sono gli spin delle due particelle.

Soluzione

Nel caso di una singola particella di spin $\frac{1}{2}$ in una sfera impenetrabile, avendo presenti i risultati del problema 3.12, le autofunzioni comuni all'energia e allo spin sono date da

$$\psi_{n,\ell,m,m_s}(r, \theta, \varphi) = \psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi) \chi_{m_s}$$

dove χ_{m_s} sono gli autostati di S_z corrispondenti agli autovalori $m_s \hbar = \pm \frac{\hbar}{2}$ e

$$\psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,\ell}(r) Y_\ell^m(\theta, \varphi)$$

dove

$$R_{n,\ell}(r) = N j_\ell(k_{n,\ell} r) \quad \text{e} \quad k_{n,\ell} = \frac{z_{n,\ell}}{R}.$$

j_ℓ è la ℓ -sima funzione di Bessel sferica, mentre $z_{n,\ell}$ è l' n -simo zero di j_ℓ . $k_{n,\ell}$ è legato all'autovalore dell'energia $E_{n,\ell}$ dalla relazione

$$E_{n,\ell} = \frac{\hbar^2}{2m} k_{n,\ell}^2.$$

Lo stato fondamentale è non degenere e si ottiene per $\ell = 0$ e $n = 1$

$$k_{1,0} = \frac{\pi}{R} \quad E_{1,0} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mR^2}.$$

Il primo stato eccitato si ottiene per $\ell = 1$ e $n = 1$ ed è tre volte degenere ($m = 0, \pm 1$). Veniamo ora al caso di due particelle di spin $\frac{1}{2}$.

- a) Il sistema dei due fermioni deve avere una funzione d'onda completamente antisimmetrica per scambio delle particelle. Nel caso dello stato fondamentale c'è una sola possibilità, corrispondente allo stato di singoletto per lo spin totale $\chi_{S^2, S_z} = \chi_{0,0}$:

$$\psi_{1,s=0}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{1,0,0}(\mathbf{r}_1), \psi_{1,0,0}(\mathbf{r}_2) \chi_{0,0}.$$

Il primo livello eccitato del sistema deve avere una particella nello stato fondamentale e l'altra nel primo stato eccitato. Questo consente sia lo stato di singoletto

$$\psi_{2,m,s=0}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{1,0,0}(\mathbf{r}_1), \psi_{1,1,m}(\mathbf{r}_2) + \psi_{1,1,m}(\mathbf{r}_1), \psi_{1,0,0}(\mathbf{r}_2)] \chi_{0,0}$$

che ha 3 possibili determinazioni in corrispondenza dei tre valori di $m = 0, \pm 1$, che quello di tripletto:

$$\psi_{2,m,s=1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{1,0,0}(\mathbf{r}_1), \psi_{1,1,m}(\mathbf{r}_2) - \psi_{1,1,m}(\mathbf{r}_1), \psi_{1,0,0}(\mathbf{r}_2)] \chi_{1,m_s}$$

che ha 9 possibili determinazioni in corrispondenza dei tre valori di $m = 0, \pm 1$ e dei tre valori di $m_s = 0, \pm 1$.

b) L'interazione $V = \alpha \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$ può essere riscritta nella forma

$$V = \frac{\alpha}{2} (S^2 - S_1^2 - S_2^2) = \frac{\alpha}{2} \left(S^2 - \frac{3}{2} \hbar^2 \right).$$

Negli stati di singoletto $V = -\frac{3}{4} \alpha \hbar^2$ mentre negli stati di tripletto $V = \frac{1}{4} \alpha \hbar^2$, quindi c'è un contributo all'autovalore dell'energia diverso a seconda dello stato di spin totale. Dal punto di vista della degenerazione l'unico effetto è presente nel caso del primo stato eccitato che ora dà luogo a due livelli distinti

$$E_{1,s=0} = \frac{\hbar^2}{2mR^2} (z_{1,1}^2 + \pi^2) - \frac{3}{4} \alpha \hbar^2 \quad 3 \text{ volte degenerare}$$

$$E_{1,s=1} = \frac{\hbar^2}{2mR^2} (z_{1,1}^2 + \pi^2) + \frac{1}{4} \alpha \hbar^2 \quad 9 \text{ volte degenerare}$$

dove $z_{1,1} = 4.49341$ (vedi [15]).

8.9 Due fermioni sulla superficie di una sfera

Due particelle identiche di spin $\frac{1}{2}$, non interagenti tra loro, sono vincolate a muoversi su una superficie sferica, in modo che i soli gradi di libertà sono quelli angolari e di spin. Tra tutti gli stati accessibili al sistema delle due particelle, determinare quanti sono gli stati che soddisfano le seguenti proprietà:

- sono autostati sia di L_z che di S_z , le componenti lungo l'asse z del momento angolare totale $\mathbf{L} = \mathbf{L}^{(1)} + \mathbf{L}^{(2)}$ e dello spin totale $\mathbf{S} = \mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)}$, dove gli indici 1 e 2 si riferiscono alle due particelle;
- i numeri quantici $\ell^{(1)}$ e $\ell^{(2)}$ relativi ai momenti angolari delle due particelle sono 0 o 1;
- la configurazione dello spin totale è in uno stato di tripletto (autostato di S^2 con $s = 1$).

Soluzione

Gli stati richiesti sono prodotto di autostati del momento angolare totale per autostati dello spin totale.

La terza condizione indica che l'autostato del momento angolare totale deve essere antisimmetrico per lo scambio delle due particelle. Poiché, per la seconda condizione, $\ell^{(1)} = 0, 1$ e $\ell^{(2)} = 0, 1$, abbiamo le seguenti possibilità:

- $\ell^{(1)} = 0$ e $\ell^{(2)} = 0$: esiste un'unico stato $|m^{(1)}, m^{(2)}\rangle = |0, 0\rangle$ che è simmetrico e quindi da escludere;
- $\ell^{(1)} = 0$ e $\ell^{(2)} = 1$: esistono tre stati $|0, 0\rangle, |0, +1\rangle, |0, -1\rangle$;
- $\ell^{(1)} = 1$ e $\ell^{(2)} = 0$: esistono tre stati $|0, 0\rangle, |+1, 0\rangle, |-1, 0\rangle$; sia in questo caso che in quello precedente gli stati non hanno simmetria definita, ma, a partire da questi sei stati, possiamo considerare le tre combinazioni lineari simmetriche e le tre antisimmetriche;

4. $\ell^{(1)} = 1$ e $\ell^{(2)} = 1$: possiamo avere stati di momento angolare totale con $\ell = 0, 1, 2$. Poiché per i coefficienti di Clebsch-Gordan vale la relazione

$$\langle j^{(1)}, j^{(2)}, m^{(1)}, m^{(2)} | j^{(1)}, j^{(2)}, J, M \rangle = (-1)^{J-j^{(1)}-j^{(2)}} \langle j^{(2)}, j^{(1)}, m^{(2)}, m^{(1)} | j^{(2)}, j^{(1)}, J, M \rangle,$$

risulta che gli stati con $\ell = 0, 2$ sono simmetrici e non vanno considerati. Sono, invece, antisimmetrici gli stati corrispondenti a $\ell = 1$

$$\begin{aligned} |\ell = 1, m = 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|m^{(1)} = +1, m^{(2)} = -1\rangle - |m^{(1)} = -1, m^{(2)} = +1\rangle) \\ |\ell = 1, m = +1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|m^{(1)} = +1, m^{(2)} = 0\rangle - |m^{(1)} = 0, m^{(2)} = +1\rangle) \\ |\ell = 1, m = -1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|m^{(1)} = -1, m^{(2)} = 0\rangle - |m^{(1)} = 0, m^{(2)} = -1\rangle). \end{aligned}$$

La risposta, quindi, è che si hanno complessivamente 6 stati relativamente al momento angolare che moltiplicato per 3, i possibili stati di spin totale, dà il numero totale di 18 stati.

8.10 Tre elettroni in potenziale centrale

Tre elettroni sono legati da un potenziale centrale; si trascurino le interazioni tra gli elettroni. Uno di essi si trova nello stato di energia E_1 e funzione d'onda spaziale ψ_1 , mentre gli altri due si trovano nello stato di energia E_2 e funzione d'onda spaziale ψ_2 . Si scrivano i possibili stati compatibili con la statistica di Fermi-Dirac e si dica quale è il loro spin.

Qual è la degenerazione totale del livello $E = E_1 + 2E_2$ se ψ_1 e ψ_2 corrispondono entrambe a stati con $\ell = 0$?

Soluzione

Chiamiamo $\psi_n^\pm$ l'autofunzione di un elettrone che si trova nel livello di energia n e nello stato di spin con $m_s = \pm 1/2$. Le due particelle nello stato con $n = 2$ devono essere in stati di spin diverso, mentre l'altra particella può trovarsi indifferentemente in uno dei due stati di spin. Complessivamente abbiamo due possibilità che possiamo scrivere, antisimmetrizzando mediante il determinante di Slater,

$$\Psi_{1,2,2;j=\frac{1}{2},m_j=+\frac{1}{2}}(x_1,x_2,x_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \det \begin{vmatrix} \psi_1^+(x_1) & \psi_1^+(x_2) & \psi_1^+(x_3) \\ \psi_2^+(x_1) & \psi_2^+(x_2) & \psi_2^+(x_3) \\ \psi_2^-(x_1) & \psi_2^-(x_2) & \psi_2^-(x_3) \end{vmatrix}$$

e

$$\Psi_{1,2,2;j=\frac{1}{2},m_j=-\frac{1}{2}}(x_1,x_2,x_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \det \begin{vmatrix} \psi_1^-(x_1) & \psi_1^-(x_2) & \psi_1^-(x_3) \\ \psi_2^+(x_1) & \psi_2^+(x_2) & \psi_2^+(x_3) \\ \psi_2^-(x_1) & \psi_2^-(x_2) & \psi_2^-(x_3) \end{vmatrix}.$$

In queste espressioni j ed m_j sono i numeri quantici relativi alla somma degli spin. È facile vedere infatti, sviluppando i determinanti secondo la prima riga, che i due elettroni nel livello con $n = 2$ sono in uno stato di singoletto; il loro spin totale è pertanto 0 e lo spin totale dei tre deve essere perciò $1/2$. Il valore della sua componente z è dato quindi dallo stato di spin dell'elettrone nel livello con $n = 1$.

Poiché non vi è degenerazione legata al momento angolare ($\ell = 0$), la degenerazione del livello $E = E_1 + 2E_2$ è pari a 2.

Diffusione (Approssimazione di Born)

9.1 Potenziale di Yukawa e potenziale coulombiano

Determinare in approssimazione di Born la sezione d'urto differenziale per la diffusione elastica dal potenziale di Yukawa:

$$V(r) = V_0 \frac{e^{-\alpha r}}{\alpha r}$$

e il potenziale Coulombiano:

$$V(r) = \frac{q_1 q_2}{r}.$$

Soluzione

Applicando la formula A.78 al caso del potenziale di Yukawa otteniamo

$$\begin{aligned} f_B(q) &= -\frac{2\mu V_0}{\hbar^2 q} \int_0^\infty dr \sin(qr) \frac{e^{-\alpha r}}{\alpha r} r = \\ &= -\frac{2\mu V_0}{\hbar^2 q \alpha} \Im \left(\int_0^\infty dr e^{-\alpha r + iqr} \right) = \\ &= -\frac{2\mu V_0}{\hbar^2 q \alpha} \Im \left(\frac{1}{\alpha - iq} \right) = \\ &= -\frac{2\mu V_0}{\hbar^2 \alpha} \frac{1}{\alpha^2 + q^2}. \end{aligned}$$

La sezione d'urto è quindi

$$\frac{d\sigma_B}{d\Omega} = \left(\frac{2\mu V_0}{\hbar^2 \alpha} \right)^2 \left(\frac{1}{\alpha^2 + 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}} \right)^2$$

dove θ è l'angolo tra la direzione d'incidenza e la direzione di diffusione.

Possiamo ottenere i risultati per il potenziale Coulombiano dalle formule precedenti mediante il limite

$$\alpha \rightarrow 0 \qquad V_0 \rightarrow 0 \qquad \frac{V_0}{\alpha} \rightarrow q_1 q_2.$$

Il risultato è

$$\frac{d\sigma_B}{d\Omega} = \frac{q_1^2 q_2^2}{16E^2 \sin^4 \frac{\theta}{2}}$$

dove $E = \hbar^2 k^2 / 2\mu$ è l'energia della particella incidente sul centro di forza. Il risultato coincide con quello classico di Rutherford e con il risultato quantistico esatto (notare che la sezione d'urto non dipende da $\hbar$).

9.2 Potenziale gaussiano

Determinare in approssimazione di Born la sezione d'urto differenziale e totale per la diffusione elastica dal potenziale

$$V(x) = V_0 e^{-\alpha^2 r^2}.$$

Soluzione

Utilizzando la notazione dell'appendice A.13 applichiamo la formula (A.78)

$$\begin{aligned} f_B(q) &= -\frac{2\mu}{\hbar^2 q} \int_0^\infty dr \sin(qr) V(r) r = \\ &= -\frac{2\mu V_0}{\hbar^2 q} \int_0^\infty dr \sin(qr) r e^{-\alpha^2 r^2} = \\ &= -\frac{\sqrt{\pi} \mu V_0}{2\hbar^2 \alpha^3} e^{-\frac{q^2}{4\alpha^2}}. \end{aligned}$$

Nell'ultimo passaggio abbiamo usato il risultato (A.5). Tenendo conto del fatto che $q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$, la sezione d'urto differenziale è

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_B(q)|^2 = \frac{\pi \mu^2 V_0^2}{4\hbar^4 \alpha^6} e^{-2 \frac{k^2}{\alpha^2} \sin^2 \frac{\theta}{2}}.$$

Calcoliamo infine la sezione d'urto totale.

$$\begin{aligned} \sigma &= \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = 2\pi \frac{\pi \mu^2 V_0^2}{4\hbar^4 \alpha^6} \int_{-1}^{+1} d \cos \theta e^{-\frac{k^2}{\alpha^2} (1 - \cos \theta)} = \\ &= \frac{\pi^2 \mu^2 V_0^2}{2\hbar^4 \alpha^6} \left(1 - e^{-2 \frac{k^2}{\alpha^2}} \right) = \\ &= \frac{\pi^2 \mu V_0^2}{4\hbar^2 \alpha^6 E} \left(1 - e^{-4\mu \frac{E}{\hbar^2 \alpha^2}} \right), \end{aligned}$$

dove si è introdotta l'energia delle particelle diffuse $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$.

9.3 Scattering da sfera opaca

Determinare in approssimazione di Born la sezione d'urto differenziale e totale per la diffusione elastica dal potenziale:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{se } r \in [0, a], \\ 0 & \text{altrimenti.} \end{cases}$$

Soluzione

Utilizzando la notazione dell'appendice A.13 applichiamo la formula (A.78)

$$\begin{aligned} f_B(q) &= -\frac{2\mu}{\hbar^2 q} \int_0^\infty dr \sin(qr) V(r) r = \\ &= \frac{2\mu V_0}{\hbar^2 q} \int_0^a dr \sin(qr) r = \\ &= \frac{2\mu V_0}{\hbar^2 q^3} \int_0^{qa} dx \sin x x = \\ &= \frac{2\mu V_0}{\hbar^2 q^3} [\sin(qa) - qa \cos(qa)] = \\ &= \frac{2\mu V_0 a^3}{\hbar^2} \varphi(qa), \end{aligned}$$

dove, essendo j_p le funzioni di Bessel sferiche, vedi (A.43),

$$\varphi(x) = \frac{\sin x - x \cos x}{x^3} = \frac{1}{x} j_1(x).$$

La sezione d'urto è quindi

$$\frac{d\sigma_B}{d\Omega} = \left(\frac{2\mu V_0 a^3}{\hbar^2} \right)^2 \varphi^2 \left(2ka \sin \frac{\theta}{2} \right)$$

dove θ è l'angolo tra la direzione d'incidenza e la direzione di diffusione.

Studiamo l'andamento della sezione d'urto differenziale. Poiché

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow 0} \varphi(x) &= \frac{1}{3} \\ \lim_{x \rightarrow \infty} \varphi(x) &= 0, \end{aligned}$$

la sezione d'urto presenta un massimo in $\theta = 0$, oscillazioni smorzate come q^{-2} e zeri nelle soluzioni di $x = \tan x$, con $x = 2ka \sin \frac{\theta}{2}$. Per $ka \ll 1$ si ha scattering isotropo; per $ka \gg 1$, poiché la sezione d'urto va rapidamente a zero, la diffusione avviene essenzialmente in avanti.

Calcoliamo ora la sezione d'urto totale in approssimazione di Born.

$$\begin{aligned}
 \sigma_B &= \int d\Omega \frac{d\sigma_B}{d\Omega} = \\
 &= 2\pi \left(\frac{2\mu V_0 a^3}{\hbar^2} \right)^2 \int_0^\pi d\theta \, 2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \varphi^2 \left(2ka \sin \frac{\theta}{2} \right) = \\
 &= 8\pi \left(\frac{2\mu V_0 a^3}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{(2ka)^2} \int_0^{2ka} dx \, x \varphi^2(x) = \\
 &= 8\pi \left(\frac{2\mu V_0 a^3}{\hbar^2} \right)^2 G(2ka)
 \end{aligned}$$

dove

$$G(y) = \frac{1}{y^2} \int_0^y dx \frac{(\sin x - x \cos x)^2}{x^5} = \frac{\cos 2y + 2y \sin 2y + 2y^4 - 2y^2 - 1}{8y^6}.$$

Questa funzione tende a un valore costante pari a $1/18$ per $y \rightarrow 0$ ed è monotona decrescente. Il suo andamento è riportato in figura 9.1

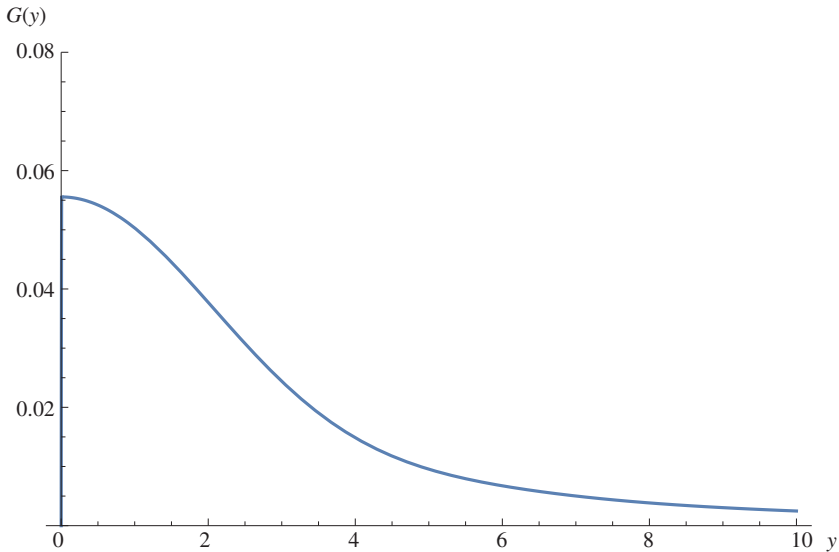


Figura 9.1. Andamento nella variabile $y = 2ka$ della sezione d'urto totale (a parte costanti) in approssimazione di Born per la diffusione da una sfera opaca

Approssimazione WKB

10.1 Oscillatore Armonico

Determinare lo spettro dell'Oscillatore Armonico in approssimazione WKB.

Soluzione

Il metodo WKB consente di calcolare un'approssimazione agli autovalori dell'energia E_n imponendo che sia soddisfatta la relazione (A.80), cioè che l'integrale dell'impulso lungo la traiettoria chiusa classica (un periodo) per quell'energia sia pari a $n + \frac{1}{2}$ di $2\pi\hbar$ dove n è un numero intero. Tale integrale è uguale all'area inclusa all'interno della traiettoria nello spazio delle fasi $p - q$. Per il livello E_n tale traiettoria classica è definita dalla relazione

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

che possiamo riscrivere anche nella forma

$$1 = \frac{p^2}{2mE_n} + \frac{q^2}{\frac{2E_n}{m\omega^2}}.$$

Nello spazio delle fasi $p - q$ la traiettoria chiusa corrispondente ad un periodo del moto classico è, dunque, un'ellissi di semiassi

$$a = \sqrt{\frac{2E_n}{m\omega^2}} \quad \text{e} \quad b = \sqrt{2mE_n},$$

la cui area è

$$\pi ab = \pi \frac{2E_n}{\omega}.$$

Applicando la condizione di quantizzazione si ottiene

$$\pi \frac{2E_n}{\omega} = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{con } n = 0, 1, 2, \dots,$$

cioè

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad \text{con } n = 0, 1, 2, \dots$$

In questo caso, il metodo WKB dà il risultato esatto.

10.2 Caduta di un grave

Determinare lo spettro dell'energia per un grave in caduta libera sulla superficie terrestre in approssimazione WKB. Mostrare che per oggetti macroscopici non è possibile rivelare effetti quantistici.

Soluzione

La caduta di un grave corrisponde al moto di una massa m in un potenziale

$$V(z) = \begin{cases} mgz, & \text{se } z > 0 \\ \infty, & \text{se } z < 0 \end{cases}$$

descritto dalla figura 10.1. Classicamente, supponendo elastici gli urti contro il pavimento a $z = 0$, si ha un moto periodico tra i punti d'inversione $z = 0$ e $z = \bar{z} = \frac{E}{mg}$ con periodo T che ricaviamo dalla relazione

$$\frac{1}{2} g \left(\frac{T}{2}\right)^2 = \frac{E}{mg},$$

al quale corrisponde la frequenza

$$\omega = \pi g \sqrt{\frac{m}{2E}}.$$

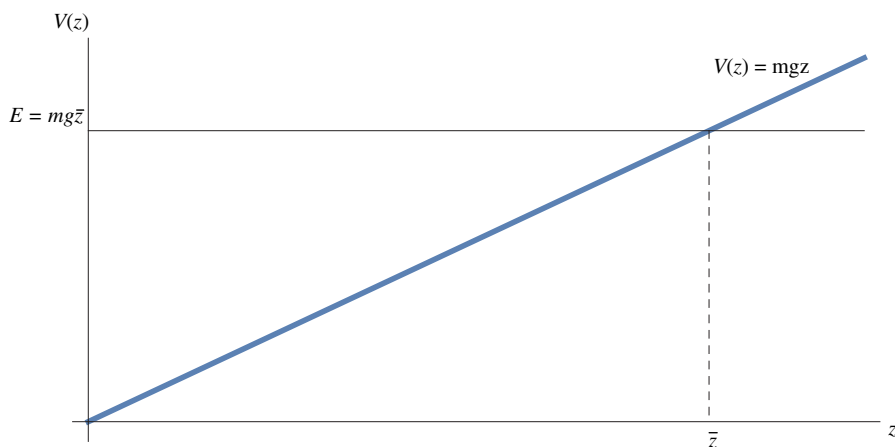


Figura 10.1. Buca di potenziale per la caduta di un grave

Lo spettro discreto dell'energia può essere valutato in approssimazione WKB tramite la relazione di Bohr-Sommerfeld

$$I = \int_0^{\bar{z}} dz \sqrt{2m(E_n - mgz)} = \pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Notiamo, tuttavia, che questa regola è stata ricavata nell'ipotesi che il potenziale sia debolmente variabile e questo sicuramente non avviene in $z = 0$ dove $V(z)$ diverge. Possiamo però ricorrere al trucco di considerare l'estensione del potenziale a $z < 0$ nella forma

$$\bar{V}(z) = k|z|, \quad (10.1)$$

restringendoci, però, alle soluzioni con n dispari che si azzerano nell'origine. Dovremo, quindi, imporre

$$\int_{-\bar{z}}^{\bar{z}} dz \sqrt{2m(E_n - mg|z|)} = \pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{con } n = 1, 3, 5, \dots$$

o, equivalentemente, data la simmetria del potenziale

$$I = \int_0^{\bar{z}} dz \sqrt{2m(E_n - mgz)} = \pi\hbar \left(n - \frac{1}{4} \right) \quad \text{con } n = 1, 2, 3, \dots$$

L'integrale I può essere valutato facilmente:

$$I = \sqrt{2m^2g} \int_0^{\bar{z}} dz \sqrt{\bar{z} - z} = -\sqrt{2m^2g} \left[\frac{2}{3} (\bar{z} - z)^{\frac{3}{2}} \right]_0^{\bar{z}} = \frac{2}{3} \sqrt{2m^2g} \bar{z}^{\frac{3}{2}}.$$

Si ottiene così lo spettro

$$E_n = \frac{[3\pi(n - \frac{1}{4})]^{\frac{2}{3}}}{2} \sqrt[3]{mg^2\hbar^2} \quad \text{con } n = 1, 2, 3, \dots$$

Gli effetti quantistici non sono percepibili a livello macroscopico. Infatti nel caso di una massa $m = 1 \text{ Kg}$ che cade da un metro di altezza avremmo un'energia

$$E_n = mg\bar{z} = 9.8J$$

mentre l'energia dello stato fondamentale sarebbe

$$E_1 \simeq \sqrt[3]{mg^2\hbar^2} \simeq (1 \cdot 10^2 \cdot 10^{-68})^{\frac{1}{3}} = 10^{-22} J.$$

Poiché per grandi n si ha

$$E_n \sim n^{\frac{2}{3}} E_1$$

avremmo

$$n \sim \left(\frac{E_n}{E_1} \right)^{\frac{3}{2}} \simeq \left(\frac{9.8}{10^{-22}} \right)^{\frac{3}{2}} \simeq 10^{34}.$$

Si tratta di un numero enorme, tuttavia potrebbe darsi che intorno al livello E_n la densità di livelli sia bassa consentendo di rilevare effetti quantistici. Valutiamo, pertanto, la distanza tra i livelli intorno a E_n da

$$\Delta E_n = \frac{dE_n}{dn} \Delta n \quad \text{con } \Delta n = 1.$$

Abbiamo

$$\Delta E_n \simeq \frac{2}{3} E_1 n^{-\frac{1}{3}} \simeq 10^{-11} \cdot 10^{-22} = 10^{-33} J$$

che è estremamente piccola rispetto a $E_n = 9,8 J$.

10.3 Pozzo di potenziale infinito

Determinare lo spettro dell'energia in approssimazione WKB per il potenziale:

$$V(x) = V_0 \cot^2 \frac{\pi x}{a}$$

dove a è una costante positiva. Discutere i limiti per piccoli e grandi numeri quantici.

Soluzione

Il potenziale è rappresentato in figura 10.2.

Gli autovalori E_n dell'energia sono determinati dalla relazione

$$I = \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{con } n = 0, 1, 2 \dots \quad (10.2)$$

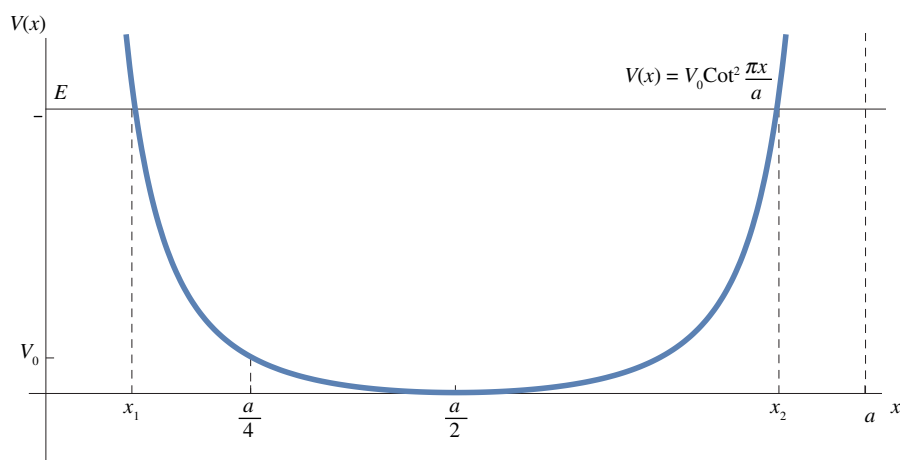


Figura 10.2. Buca di potenziale $V(x) = V_0 \cot^2 \frac{\pi x}{a}$

dove, tenendo conto della simmetria del potenziale,

$$I = 2 \int_{x_1}^{\frac{a}{2}} dx \sqrt{2mV_0} \sqrt{\frac{E}{V_0} - \cot^2 \frac{\pi x}{a}} = \frac{2a}{\pi} \sqrt{2mV_0} \int_{\frac{\pi x_1}{a}}^{\frac{\pi}{2}} dy \sqrt{\alpha - \cot^2 y}$$

dove

$$V(x_1) = V_0 \cot^2 \frac{\pi x_1}{a} = E_n \quad \text{e} \quad \alpha = \frac{E_n}{V_0} = \cot^2 \frac{\pi x_1}{a}.$$

Consideriamo la sostituzione

$$z = \sqrt{\frac{\alpha - \cot^2 y}{\cot^2 y}} = \sqrt{\alpha \tan^2 y - 1}.$$

Da

$$\begin{aligned} z^2 &= \alpha \tan^2 y - 1 & \Rightarrow & \tan y = \sqrt{\frac{1+z^2}{\alpha}} \\ z^2 &= \alpha \frac{1 - \cos^2 y}{\cos^2 y} - 1 & \Rightarrow & \cos^2 y = \frac{\alpha}{z^2 + 1 + \alpha} \end{aligned}$$

abbiamo

$$dz = \frac{\alpha \tan y}{z \cos^2 y} dy \quad \Rightarrow \quad dy = \frac{z \cos^2 y}{\alpha \tan y} dz = \frac{z}{\alpha} \frac{\alpha}{z^2 + 1 + \alpha} \sqrt{\frac{\alpha}{1+z^2}} dz$$

e

$$\sqrt{\alpha - \cot^2 y} = \frac{z}{\tan y} = z \sqrt{\frac{\alpha}{1+z^2}},$$

mentre per i limiti di integrazione risulta

$$\begin{aligned} y_1 = \frac{\pi x_1}{a} & \Rightarrow z_1 = \sqrt{\frac{\alpha - \cot^2 \frac{\pi x_1}{a}}{\cot^2 \frac{\pi x_1}{a}}} = 0 \\ y_2 = \frac{\pi}{2} & \Rightarrow z_2 = \sqrt{\frac{\alpha - \cot^2 \frac{\pi}{2}}{\cot^2 \frac{\pi}{2}}} = +\infty. \end{aligned}$$

Sostituendo nell'integrale da calcolare si ha

$$\begin{aligned} I &= \frac{2a}{\pi} \sqrt{2mV_0} \int_0^{+\infty} dz \frac{\alpha z^2}{(z^2 + 1 + \alpha)(z^2 + 1)} = \\ &= \frac{2a}{\pi} \sqrt{2mV_0} \int_0^{+\infty} dz \left[\frac{1 + \alpha}{z^2 + 1 + \alpha} - \frac{1}{z^2 + 1} \right] = \\ &= \frac{2a}{\pi} \sqrt{2mV_0} (\sqrt{1 + \alpha} - 1) \frac{\pi}{2}, \end{aligned}$$

dove abbiamo utilizzato l'integrale

$$\int_0^{+\infty} dz \frac{1}{z^2 + 1} = [\arctan z]_0^{+\infty} = \frac{\pi}{2}.$$

Imponendo la condizione di quantizzazione (10.2) e ricordando che $\alpha = \frac{E_n}{V_0}$, si ottiene lo spettro dell'energia

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 + 2\pi\hbar \sqrt{\frac{V_0}{2ma^2}} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

che per V_0 piccoli riproduce lo spettro del pozzo di potenziale quadrato, mentre per V_0 grandi quello dell'oscillatore armonico (notiamo che V_0 è il valore assunto dal potenziale in $\frac{a}{4}$, vedi Fig. 10.2).

10.4 Barriera Triangolare

Usare il metodo WKB per valutare la probabilità di trasmissione attraverso la barriera triangolare della forma

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } |x| > a; \\ V_0(1 - \frac{|x|}{a}), & \text{se } |x| < a; \end{cases}$$

per energie inferiori a V_0 .

Soluzione

Con riferimento alla figura 10.3 i punti di inversione del moto classico sono dati da $\pm \bar{x}$ dove

$$V(\bar{x}) = E \quad \Rightarrow \quad \bar{x} = a \left(1 - \frac{E}{V_0} \right).$$

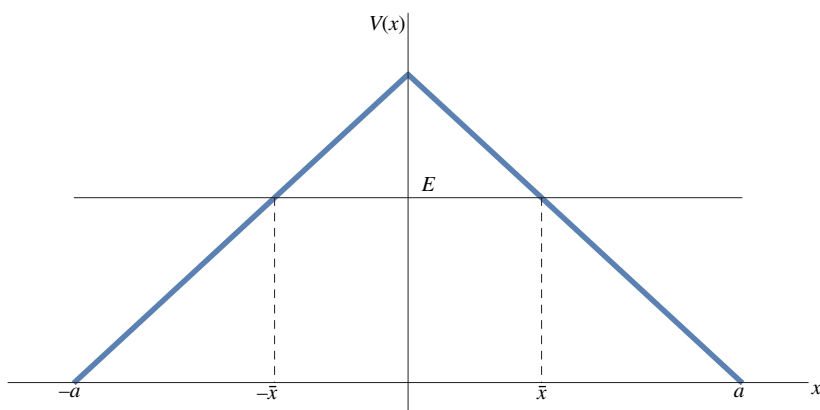


Figura 10.3. Barriera di potenziale triangolare

Data la simmetria del potenziale

$$\ln T = -\frac{4}{\hbar} \int_0^{\bar{x}} dx \sqrt{2mV_0} \sqrt{\left(1 - \frac{x}{a}\right) - \frac{E}{V_0}} = -\frac{4}{\hbar} \sqrt{2mV_0} \int_0^{\bar{x}} dx \sqrt{\frac{\bar{x}}{a} - \frac{x}{a}}.$$

Con la sostituzione $y = \frac{\bar{x}}{a} - \frac{x}{a}$ si ottiene

$$\ln T = -\frac{4a}{\hbar} \sqrt{2mV_0} \int_0^{\frac{\bar{x}}{a}} dy \sqrt{y} = -\frac{4a}{\hbar} \sqrt{2mV_0} \frac{2}{3} \left(\frac{\bar{x}}{a}\right)^{\frac{3}{2}} = -\frac{8}{3} \frac{a\sqrt{2m}}{\hbar V_0} (V_0 - E)^{\frac{3}{2}}.$$

La probabilità di trasmissione al di là della barriera è, in definitiva,

$$T = e^{-\frac{8}{3} \frac{a\sqrt{2m}}{\hbar V_0} (V_0 - E)^{\frac{3}{2}}}.$$

10.5 Barriera Parabolica

Usare il metodo WKB per valutare la probabilità di trasmissione attraverso la barriera parabolica della forma

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } |x| > a; \\ V_0(1 - \frac{x^2}{a^2}), & \text{se } |x| < a; \end{cases}$$

per energie inferiori a V_0 .

Soluzione

Con riferimento alla figura 10.4 i punti di inversione del moto classico sono dati da $\pm\bar{x}$ dove

$$V(\bar{x}) = E \quad \Rightarrow \quad \bar{x} = a\sqrt{1 - \frac{E}{V_0}}.$$

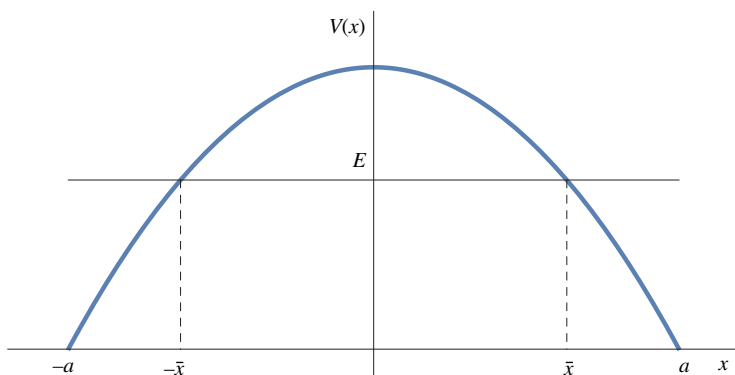


Figura 10.4. Barriera di potenziale parabolica

Data la simmetria del potenziale

$$\begin{aligned}\ln T &= -\frac{4}{\hbar} \sqrt{2mV_0} \int_0^{\bar{x}} dx \sqrt{\left(1 - \frac{x^2}{a^2}\right) - \frac{E}{V_0}} = -\frac{4}{\hbar} \sqrt{2mV_0} \int_0^{\bar{x}} dx \sqrt{\frac{\bar{x}^2}{a^2} - \frac{x^2}{a^2}} = \\ &= -\frac{4}{\hbar} \sqrt{2mV_0} \frac{\bar{x}}{a} \int_0^{\bar{x}} dx \sqrt{1 - \frac{x^2}{\bar{x}^2}}.\end{aligned}$$

Con la sostituzione $x = \bar{x} \sin \theta$ si ottiene

$$\ln T = -\frac{4}{\hbar} \sqrt{2mV_0} \frac{\bar{x}^2}{a} \int_0^1 d\theta \cos^2 \theta = -\frac{a\pi}{\hbar\sqrt{2mV_0}} p_E^2$$

dove $p_E = \sqrt{2m(V_0 - E)}$ è l'impulso corrispondente ad un potenziale costante pari a V_0 . La probabilità di trasmissione al di là della barriera è

$$T = e^{-\frac{a\pi}{\hbar\sqrt{2mV_0}} p_E^2}.$$



11

Metodo Variazionale

11.1 Stato fondamentale dell'oscillatore anarmonico

Utilizzare il metodo Variazionale per valutare in modo approssimato l'energia dello stato fondamentale dell'oscillatore anarmonico, cioè una particella di massa m soggetta al potenziale:

$$V(x) = \mu x^4 \quad (\mu > 0).$$

Notiamo che il potenziale anarmonico, come quello armonico, diverge all'infinito, ha un minimo in $x = 0$ ed è simmetrico. Lo spettro dell'energia è quindi discreto e lo stato fondamentale è pari e privo di nodi. Scegliamo quindi come funzioni di prova il set al quale appartiene quella dello stato fondamentale dell'oscillatore armonico (in questo caso $\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$):

$$\psi(x; \alpha) = \text{costante} \cdot e^{-\alpha \frac{x^2}{2}}.$$

Soluzione

Il valore di attesa dell'energia nello stato ψ è dato da

$$\begin{aligned} E(\alpha) &= \frac{\langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\alpha \frac{x^2}{2}} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \mu x^4 \right] e^{-\alpha \frac{x^2}{2}}}{\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\alpha x^2}} = \\ &= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[-\frac{\hbar^2}{2m} (-\alpha + \alpha^2 x^2) + \mu x^4 \right] e^{-\alpha x^2} = \\ &= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \left[\frac{\hbar^2 \alpha}{2m} I_0 - \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} I_2 + \mu I_4 \right] = \frac{\hbar^2 \alpha}{4m} + \frac{3\mu}{4\alpha^2} \end{aligned}$$

dove, per la (A.3),

$$I_0 = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}; \quad I_2 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}}; \quad I_4 = \frac{3}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^5}}.$$

Cerchiamo ora il minimo di $E(\alpha)$:

$$\frac{dE(\alpha)}{d\alpha} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\hbar^2}{4m} - \frac{3\mu}{2\alpha^3} = 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha = \sqrt[3]{\frac{6\mu m}{\hbar^2}}$$

mentre la derivata seconda è sempre positiva. In corrispondenza di questo valore di α si ottiene il valore approssimato per il livello di energia dello stato fondamentale:

$$E = \frac{\hbar^2 \alpha}{4m} \left(1 + \frac{3m\mu}{\hbar^2 \alpha^3} \right) = \frac{\hbar^2 \alpha}{4m} \left(1 + \frac{1}{2} \right) = \frac{3\hbar^2}{8m} \sqrt[3]{\frac{6m\mu}{\hbar^2}} = \frac{3}{8} \sqrt[3]{\frac{6\mu \hbar^4}{m^2}}.$$

11.2 Stato fondamentale della buca infinita

Utilizzare il metodo variazionale per valutare l'energia dello stato fondamentale per una particella vincolata sul segmento $[-a, a]$. Utilizzare come funzione di prova

$$\psi(x; \alpha) = |x|^\alpha - a^\alpha$$

dove α è il parametro variazionale. Confrontare il risultato ottenuto con il valore esatto e determinare l'errore relativo.

Soluzione

Il valore di aspettazione dell'energia nello stato ψ è dato da

$$\begin{aligned} E(\alpha) &= \frac{\langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{2 \int_0^{+a} dx (x^\alpha - a^\alpha) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right] (x^\alpha - a^\alpha)}{2 \int_0^{+a} dx (x^\alpha - a^\alpha)^2} = \\ &= -\frac{\hbar^2}{4ma^2} \frac{1 + 3\alpha + 2\alpha^2}{1 - 2\alpha}. \end{aligned}$$

Imponendo che la derivata di $E(\alpha)$ si annulli si trovano due soluzioni

$$\alpha_{\pm} = \frac{1}{2} \left(1 \pm \sqrt{6} \right).$$

La soluzione relativa al segno $+$ dà il punto di minimo cercato (l'altra soluzione corrisponde ad un punto di massimo). In corrispondenza di questo valore si ottiene l'approssimazione

$$E_1^{\text{var}} = \frac{1.23737 \hbar^2}{ma^2}$$

da confrontare con il valore esatto

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}.$$

L'errore relativo è pari a

$$\frac{E_1^{\text{var}} - E_1}{E_1} = 0.002976,$$

inferiore, quindi, al 0.3%.

11.3 I primi livelli di energia per il potenziale lineare

Una particella di massa m si muove in un potenziale centrale lineare

$$V(r) = Kr.$$

L'equazione di Schrödinger radiale presenta, nel caso del potenziale lineare, una scala naturale di lunghezze $r_0 = \sqrt[3]{\frac{\hbar^2}{2mk}}$ e, in termini della variabile scalata $\rho = \frac{r}{r_0}$, essa si scrive

$$\left[-\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} - \rho \right] \psi(\rho) = \varepsilon \psi(\rho)$$

dove

$$\varepsilon = \frac{E}{E_0} \quad \text{con} \quad E_0 = \sqrt[3]{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}}.$$

Risolvendo numericamente questa equazione, che nel caso $\ell = 0$ è l'equazione di Airy, si trova che gli autovalori più bassi nei casi $\ell = 0, 1, 2$ sono rispettivamente $\varepsilon = 2.3381, 3.3612, 4.2482$. Utilizzando una funzione di prova che abbia il corretto andamento per $\rho \rightarrow 0$, usare il metodo variazionale per valutare questi autovalori.

Soluzione

La funzione d'onda ha un andamento nell'origine, dovuto al potenziale centrifugo, della forma $\rho^{\ell+1}$. Poiché asintoticamente il potenziale diverge, possiamo usare la funzione di prova

$$\psi(\rho) = \rho^{\ell+1} e^{-\alpha\rho}.$$

Il valore di aspettazione dell'energia nello stato ψ è dato da

$$\begin{aligned} E(\alpha) &= \frac{\langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\int_0^\infty d\rho \rho^{\ell+1} e^{-\alpha\rho} \left[-\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} - \rho \right] \rho^{\ell+1} e^{-\alpha\rho}}{\int_0^\infty d\rho \rho^{2(\ell+1)} e^{-2\alpha\rho}} = \\ &= \frac{(2\ell+3)!(2\alpha)^{-2(\ell+2)}(2\alpha^3+2\ell+3)}{(2\ell+3)!(2\alpha)^{-(2\ell+3)}} = \frac{2\alpha^3+2\ell+3}{2\alpha}, \end{aligned}$$

dove, per calcolare gli integrali, si è utilizzata la (A.6). La funzione $E(\alpha)$ ha un minimo che può essere calcolato imponendo l'annullamento della derivata:

$$\frac{4\alpha^3 - 2\ell - 3}{2\alpha^2} = 0 \quad \rightarrow \quad \alpha(\ell) = \sqrt[3]{\frac{3+2\ell}{4}}.$$

Sostituendo in $E(\alpha)$ i valori per $\ell = 0, 1, 2$ si ottengono i risultati:

$$E(\alpha(0)) = 2.4764, \quad E(\alpha(1)) = 3.4812, \quad E(\alpha(2)) = 4.3566$$

che riproducono i risultati esatti con una precisione variabile tra il 3% e il 6%.

Per la funzione d'onda di prova si potrebbe usare anche un andamento asintotico gaussiano. Gli integrali sono ugualmente calcolabili, usando questa volta le (A.2), e si ottengono dei risultati con una precisione leggermente superiore.

11.4 Stato fondamentale dell'atomo di Elio

L'atomo di Elio ha $Z = 2$ e $A = 4$; possiede quindi due elettroni che si muovono intorno ad un nucleo di massa pari a 4 volte quella dell'Idrogeno e circa 8×10^3 quella di un elettrone. Assumendo questa massa infinita, denominiamo con $\mathbf{r}_1$ e $\mathbf{r}_2$ le coordinate dei due elettroni rispetto al nucleo e con $\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ la loro posizione relativa. L'Hamiltoniano dell'atomo di Elio è, pertanto,

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}}.$$

Se non vi fosse l'interazione repulsiva tra i due elettroni, nell'equazione di Schrödinger ci sarebbe la separazione tra le variabili dei due elettroni e, detta E l'energia dello stato fondamentale, avremmo

$$\psi_E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{E_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{E_1}(\mathbf{r}_2) = \frac{Z^3}{\pi a_0^3} e^{-\frac{Z(r_1+r_2)}{a_0}}, \quad (11.1)$$

dove abbiamo indicato con E_1 e $\psi_{E_1}(r) = (2/\sqrt{4\pi})(Z/a_0)^3/2 \cdot e^{-\frac{Zr}{a_0}}$ rispettivamente l'energia dello stato fondamentale di un atomo idrogenoide con $Z = 2$ e la corrispondente autofunzione. L'energia dello stato fondamentale dell'Elio sarebbe

$$E = 2E_1 = 2 \left[-\frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2} \right] = -8 \cdot 13.6 \text{ eV} = -108.8 \text{ eV}.$$

Sperimentalmente si trova che lo stato fondamentale dell'Elio ha energia pari a $-78,98 \text{ eV}$, un valore molto più alto. Questo segnala il fatto che, trascurando il termine positivo di attrazione tra gli elettroni, si ottiene un'approssimazione troppo rozza.

Usare il metodo Variazionale per migliorare l'approssimazione. Suggerimento: le funzioni di prova saranno date ancora dalla (11.1), considerando, però, Z come un parametro da determinare minimizzando il funzionale

$$E(Z) = \left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3} \right)^2 \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 e^{-\frac{Z(r_1+r_2)}{a_0}} \mathcal{H} e^{-\frac{Z(r_1+r_2)}{a_0}}.$$

Soluzione

L'Hamiltoniano può essere riscritto nella forma

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{(2-Z)e^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} - \frac{(2-Z)e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}}.$$

Tenendo conto del fatto che ψ_{E_1} soddisfa l'equazione di Schrödinger in corrispondenza dell'autovalore E_1 , cioè

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{r_1} \right) e^{-\frac{Zr_1}{a_0}} = -\frac{Z^2 e^2}{2a_0} e^{-\frac{Zr_1}{a_0}},$$

si riescono ad eliminare gli operatori differenziali

$$\begin{aligned} E(Z) &= \left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3} \right)^2 \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 e^{-\frac{2Z(r_1+r_2)}{a_0}} e^2 \left[-\frac{Z^2}{a_0} - \frac{(2-Z)}{r_1} - \frac{(2-Z)}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \right] = \\ &= \left(\frac{Z^3 e}{\pi a_0^3} \right)^2 \left[-\frac{Z^2}{a_0} K_1 - 2(2-Z)K_2 + K_3 \right]. \end{aligned}$$

K_1 , K_2 e K_3 sono i seguenti integrali

– $\mathbf{K}_1$

$$K_1 = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 e^{-\frac{2Z(r_1+r_2)}{a_0}} = \left(4\pi \int_0^\infty dr r^2 e^{-\beta r} \right)^2 = \left(4\pi \frac{2}{\beta^3} \right)^2$$

dove $\beta = \frac{2Z}{a_0}$ e si sono usate le formule (A.8).

– $\mathbf{K}_2$

$$\begin{aligned} K_2 &= \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 e^{-\beta(r_1+r_2)} \frac{1}{r_1} = (4\pi)^2 \int_0^\infty dr_2 r_2^2 e^{-\beta r_2} \int_0^\infty dr_1 r_1 e^{-\beta r_1} = \\ &= (4\pi)^2 \frac{2}{\beta^3} \frac{1}{\beta^2} = \frac{2(4\pi)^2}{\beta^5} \end{aligned}$$

– $\mathbf{K}_3$ (questo calcolo è presente anche nel problema 6.27)

$$K_3 = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 e^{-\beta(r_1+r_2)} \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \int d\mathbf{r}_1 e^{-\beta r_1} f(r_1)$$

dove

$$f(r_1) = \int d\mathbf{r}_2 e^{-\beta r_2} \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$$

è funzione solo del modulo di $\mathbf{r}_1$ perché integrando su tutto l'angolo solido di $\mathbf{r}_2$ scompare la dipendenza dagli angoli. Per calcolare $f(r_1)$ possiamo, quindi, orientare liberamente $\mathbf{r}_1$ nella direzione dell'asse z . Avremo

$$\begin{aligned} f(r_1) &= 2\pi \int dr_2 r_2^2 e^{-\beta r_2} \int_{-1}^{+1} d\cos\theta \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta}} = \\ &= -2\pi \int dr_2 r_2^2 e^{-\beta r_2} \frac{1}{r_1 r_2} \left[\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta} \right]_{-1}^{+1} = \\ &= \frac{2\pi}{r_1} \int dr_2 r_2 e^{-\beta r_2} (r_1 + r_2 - |r_1 - r_2|) = \\ &= \frac{2\pi}{r_1} \left[\int_0^{r_1} dr_2 r_2 e^{-\beta r_2} (2r_2) + \int_{r_1}^\infty dr_2 r_2 e^{-\beta r_2} (2r_1) \right] = \\ &= \frac{4\pi}{r_1 \beta^3} \left[2 - e^{-\beta r_1} (2 + \beta r_1) \right], \end{aligned}$$

dove abbiamo usato le espressioni, ricavate dalla (A.7):

$$I_2(0, r_1) = \frac{1}{\beta^3} [2 - (2 + 2r_1\beta + r_1^2\beta^2)e^{-\beta r_1}]$$

e

$$I_1(r_1, \infty) = \frac{1}{\beta^2} (1 + \beta r_1)e^{-\beta r_1}.$$

Tornando al calcolo di K_3 otteniamo, usando i soliti integrali (A.8),

$$K_3 = 4\pi \int_0^\infty dr_1 r_1^2 e^{-\beta r_1} \frac{4\pi}{r_1 \beta^3} [2 - e^{-\beta r_1} (2 + \beta r_1)] = \frac{(4\pi)^2}{\beta^5} \frac{5}{4}.$$

Inserendo questi risultati nell'espressione per $E(Z)$ si ottiene

$$E(Z) = -\frac{e^2}{a_0} \left(\frac{27}{8} Z - Z^2 \right),$$

che assume il suo valore minimo per

$$Z = Z_{eff} = \frac{27}{16}$$

dato da

$$E(Z_{eff}) = -\frac{e^2}{a_0} \left(\frac{27}{8} Z_{eff} - Z_{eff}^2 \right) = -77.5 \text{ eV}.$$

Questo valore è molto prossimo al valore sperimentale già citato $-78,98 \text{ eV}$, e fornisce una migliore approssimazione rispetto al calcolo in teoria delle perturbazioni (vedi problema 6.27). Notiamo che

$$Z_{eff} < 2;$$

tenendo conto del fatto che le funzioni d'onda sono fattorizzate, possiamo considerare l'approssimazione come risultante da un modello nel quale ciascuno degli elettroni si muove nel campo medio di un nucleo con una carica effettiva $Z_{eff} \cdot e$, inferiore a quella reale a causa dell'effetto di schermo prodotto dall'altro elettrone.

Appendice A

Formule utili

A.1 Integrali di uso frequente

A.1.1 Integrali Gaussiani

$$I_0(\alpha) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\alpha x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}. \quad (\text{A.1})$$

Per $n = 1, 2, \dots$ si ha

$$I_{2n+1}(\alpha) = 0, \quad I_{2n}(\alpha) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^{2n} e^{-\alpha x^2} = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial \alpha^n} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}. \quad (\text{A.2})$$

Per i primi valori di n si ottiene

$$I_0 = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}; \quad I_2 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}}; \quad I_4 = \frac{3}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^5}}. \quad (\text{A.3})$$

Altro integrale gaussiano di uso frequente è

$$I(\alpha, \beta) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\alpha x^2 + \beta x} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{\frac{\beta^2}{4\alpha}} \quad (\text{A.4})$$

che consente anche di calcolare

$$\begin{aligned} I(\alpha, \beta) &= \int_0^{+\infty} dx x \sin(\beta x) e^{-\alpha x^2} = \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx x \frac{e^{i\beta x} - e^{-i\beta x}}{2i} e^{-\alpha x^2} = \\ &= -\frac{1}{4} \frac{\partial}{\partial \beta} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{e^{i\beta x} + e^{-i\beta x}}{i} = \\ &= -\frac{1}{4} \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\frac{\beta^2}{4\alpha^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[e^{-(\alpha x + i\frac{\beta}{2\alpha})^2} + e^{-(\alpha x - i\frac{\beta}{2\alpha})^2} \right] = \\ &= -\frac{1}{4} \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\frac{\beta^2}{4\alpha^2}} 2 \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} = \\ &= \frac{\sqrt{\pi} \beta}{4\alpha} e^{-\frac{\beta^2}{4\alpha^2}}. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

A.1.2 Integrali con funzioni esponenziali

$$\begin{aligned}
 \int_0^{+\infty} dx x^n e^{-x} &= \left[(-1)^n \frac{d^n}{d\alpha^n} \int_0^{+\infty} dx e^{-\alpha x} \right]_{\alpha=1} = \\
 &= \left[(-1)^n \frac{d^n}{d\alpha^n} \frac{1}{\alpha} \right]_{\alpha=1} = \\
 &= n!
 \end{aligned} \tag{A.6}$$

In maniera analoga si trova il risultato più generale

$$I_n(a, b) = \int_a^b dx x^n e^{-\beta x} = (-1)^n \frac{d^n}{d\beta^n} I_0(a, b). \tag{A.7}$$

Per $a = 0$ e $b = \infty$ si ottiene

$$I_0(0, \infty) = \frac{1}{\beta}; \quad I_1(0, \infty) = -\frac{d}{d\beta} \frac{1}{\beta} = \frac{1}{\beta^2}; \quad I_2(0, \infty) = \frac{d^2}{d\beta^2} \frac{1}{\beta} = \frac{2}{\beta^3}. \tag{A.8}$$

A.2 Equazione di continuità

L'equazione di continuità in Meccanica Quantistica è data da

$$\frac{\partial P(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \tag{A.9}$$

dove la densità di probabilità è data da

$$P(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \psi^*(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) \tag{A.10}$$

e la densità di corrente di probabilità è definita come

$$\begin{aligned}
 \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) &= \frac{\hbar}{2im} [\psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t) - \psi(\mathbf{r}, t) \nabla \psi^*(\mathbf{r}, t)] = \\
 &= \frac{\hbar}{im} \Im(\psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t)).
 \end{aligned} \tag{A.11}$$

A.3 Oscillatore armonico

A.3.1 Trattazione operatoriale

La soluzione per l'equazione agli autovalori per l'Hamiltoniano dell'oscillatore armonico è:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad ; \quad \hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle. \tag{A.12}$$

In termini degli operatori di creazione e distruzione

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} p \quad a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} p \quad (\text{A.13})$$

abbiamo:

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger) \quad p = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (a - a^\dagger). \quad (\text{A.14})$$

Per a e $a^\dagger$ valgono le relazioni

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle. \quad (\text{A.15})$$

A.3.2 Trattazione nella rappresentazione X

Le autofunzioni sono date da

$$\phi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi) \quad \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad (\text{A.16})$$

dove H_n è il polinomio di Hermite n -simo definito da

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}. \quad (\text{A.17})$$

I polinomi di Hermite sono polinomi ortogonali

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi H_n(\xi) H_m(\xi) = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{n,m} \quad (\text{A.18})$$

e per essi vale la relazione di ricorrenza

$$2\xi H_n(\xi) = H_{n+1}(\xi) + 2n H_{n-1}(\xi) \quad (\text{A.19})$$

Primi polinomi di Hermite

$$\begin{aligned} H_0(x) &= 1; H_1(x) = 2x; H_2(x) = 4x^2 - 2; H_3(x) = 8x^3 - 12x \\ H_4(x) &= 16x^4 - 48x^2 + 12; H_5(x) = 32x^5 - 160x^3 + 120x. \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

A.4 Cambiamento di coordinate

Il passaggio da coordinate cartesiane a coordinate sferiche avviene mediante la trasformazione:

$$x = r \sin \theta \cos \phi \quad (\text{A.21})$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi \quad (\text{A.22})$$

$$z = r \cos \theta. \quad (\text{A.23})$$

A.5 Momento Angolare

A.5.1 Trattazione operatoriale

Gli operatori J^2 , J_x , J_y , J_z soddisfano le seguenti relazioni di commutazione:

$$\begin{aligned} [J^2, J_x] &= [J^2, J_y] = [J^2, J_z] = 0 \\ [J_x, J_y] &= i\hbar J_z & [J_y, J_z] &= i\hbar J_x & [J_z, J_x] &= i\hbar J_y. \end{aligned}$$

Indichiamo con $|j, m\rangle$ il generico autoket comune a J^2 e J_z :

$$J^2|j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2|j, m\rangle \quad J_z|j, m\rangle = m\hbar|j, m\rangle.$$

Gli operatori

$$J_{\pm} = J_x \pm iJ_y \quad (\text{A.24})$$

soddisfano le seguenti regole di commutazione con gli operatori J^2 e J_z :

$$[J^2, J_{\pm}] = 0 \quad [J_z, J_{\pm}] = \pm J_{\pm}. \quad (\text{A.25})$$

Gli operatori $J_{\pm}$ agiscono sugli autoket comuni ad J^2 e J_z innalzando o abbassando di una unità il numero quantico azimutale:

$$J_{\pm}|j, m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}|j, m\pm 1\rangle. \quad (\text{A.26})$$

A.5.2 Armoniche Sferiche

Definizione

$$Y_{\ell, m}(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}} P_{\ell}^m(\cos\theta) e^{im\phi} \quad (\text{A.27})$$

dove P_{ℓ}^m sono le funzioni associate di Legendre

$$P_{\ell}^m(z) = (1-z^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{dz^{|m|}} P_{\ell}(z) \quad (\text{A.28})$$

e $P_{\ell}(z)$ sono i polinomi di Legendre

$$P_{\ell}(z) = \frac{1}{2^{\ell}\ell!} \frac{d^{\ell}}{dz^{\ell}} (1-z^2)^{\ell}. \quad (\text{A.29})$$

Relazione di ortonormalizzazione

$$\int d\Omega Y_{\ell', m'}^*(\theta, \phi) Y_{\ell, m}(\theta, \phi) = \delta_{\ell, \ell'} \delta_{m, m'}. \quad (\text{A.30})$$

Relazione di ricorrenza

$$\cos \theta Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = a_{\ell,m} Y_{\ell+1,m}(\theta, \phi) + a_{\ell-1,m} Y_{\ell-1,m}(\theta, \phi) \quad (\text{A.31})$$

dove

$$a_{\ell,m} = \sqrt{\frac{(\ell+1+m)(\ell+1-m)}{(2\ell+1)(2\ell+3)}}. \quad (\text{A.32})$$

Teorema di Somma

Se (Θ, Φ) e (θ', ϕ') sono due direzioni dello spazio e θ è l'angolo compreso tra di esse, un polinomio di Legendre si può esprimere in termini delle armoniche sferiche:

$$P_\ell(\cos \theta) = \frac{4\pi}{2\ell+1} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} Y_{\ell,m}(\Theta, \Phi)^* Y_{\ell,m}(\theta', \phi'). \quad (\text{A.33})$$

Le prime Armoniche Sferiche

$$Y_{0,0}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad (\text{A.34})$$

$$Y_{1,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} \quad (\text{A.35})$$

$$Y_{2,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1), \quad Y_{2,\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi},$$

$$Y_{2,\pm 2}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi} \quad (\text{A.36})$$

$$Y_{3,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{7}{16\pi}} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta), \quad Y_{3,\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{21}{64\pi}} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_{3,\pm 2}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{105}{32\pi}} \sin^2 \theta \cos \theta e^{\pm 2i\varphi}, \quad Y_{3,\pm 3}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{35}{64\pi}} \sin^3 \theta e^{\pm 3i\varphi}. \quad (\text{A.37})$$

A.6 Equazione di Schrödinger in coordinate sferiche**A.6.1 L'equazione radiale**

Per un potenziale centrale $V(r)$ l'equazione di Schrödinger è separabile in coordinate sferiche. L'autofunzione comune agli operatori $\mathcal{H}$, L^2 e L_z con autovalori rispettivamente E , $\ell(\ell+1)\hbar^2$ e $m\hbar$, si può scrivere nella forma

$$\psi_{E,\ell,m}(r, \theta, \phi) = R_{E,\ell}(r) Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = \frac{U_{E,\ell}(r)}{r} Y_{\ell,m}(\theta, \phi) \quad (\text{A.38})$$

dove m è la massa ridotta del sistema e $U_{E,\ell}(r)$ è soluzione dell'equazione radiale:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 U_{E,\ell}}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} U_{E,\ell} + V(r) U_{E,\ell} = E U_{E,\ell} \quad (\text{A.39})$$

$U_{E,\ell}(r)$ deve soddisfare la condizione

$$\lim_{r \rightarrow 0} U_{E,\ell}(r) = 0. \quad (\text{A.40})$$

A.7 Funzioni di Bessel sferiche

Le funzioni di Bessel sferiche sono soluzioni dell'equazione di Bessel sferica

$$z^2 \frac{d^2}{dz^2} \phi(z) + 2z \frac{d}{dz} \phi(z) + [z^2 - \ell(\ell+1)] \phi(z) = 0. \quad (\text{A.41})$$

A.7.1 Funzioni di Bessel sferiche di I e II specie

Due integrali linearmente indipendenti sono dati dalle funzioni di Bessel sferiche di prima e seconda specie j_ℓ e $y_\ell = (-1)^{\ell+1} j_{-\ell-1}$. Le prime di esse per valori interi di ℓ sono

$$j_0(z) = \frac{\sin z}{z} \quad (\text{A.42})$$

$$j_1(z) = \frac{\sin z}{z^2} - \frac{\cos z}{z} \quad (\text{A.43})$$

$$j_2(z) = \left(\frac{3}{z^2} - 1 \right) \frac{\sin z}{z} - \frac{3 \cos z}{z^2} \quad (\text{A.44})$$

$$j_3(z) = \left(\frac{15}{z^3} - \frac{6}{z} \right) \frac{\sin z}{z} - \left(\frac{15}{z^2} - 1 \right) \frac{\cos z}{z} \quad (\text{A.45})$$

e

$$y_0(z) = -\frac{\cos z}{z} \quad (\text{A.46})$$

$$y_1(z) = -\frac{\cos z}{z^2} - \frac{\sin z}{z} \quad (\text{A.47})$$

$$y_2(z) = \left(-\frac{3}{z^2} + 1 \right) \frac{\cos z}{z} - \frac{3 \sin z}{z^2} \quad (\text{A.48})$$

$$y_3(z) = \left(-\frac{15}{z^3} + \frac{6}{z} \right) \frac{\cos z}{z} - \left(\frac{15}{z^2} - 1 \right) \frac{\sin z}{z}. \quad (\text{A.49})$$

Il loro andamento asintotico è dato da

$$j_\ell(z) \underset{z \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{z} \cos \left(z - \frac{\ell+1}{2} \pi \right) \quad (\text{A.50})$$

e

$$y_\ell(z) \underset{z \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{z} \sin \left(z - \frac{\ell+1}{2} \pi \right). \quad (\text{A.51})$$

A.7.2 Funzioni di Hankel sferiche

Altre possibile soluzioni linearmente indipendenti dell'equazione di Bessel sferica sono le funzioni di Hankel sferiche di I e II specie definite da

$$h_\ell^{(1)}(z) = j_\ell(z) + iy_\ell(z) \quad (\text{A.52})$$

$$h_\ell^{(2)}(z) = j_\ell(z) - iy_\ell(z). \quad (\text{A.53})$$

L'andamento asintotico delle funzioni di Hankel è dato da

$$h_\ell^{(1)}(z) \underset{z \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{z} e^{i(z - \frac{\ell+1}{2}\pi)} \quad (\text{A.54})$$

$$h_\ell^{(2)}(z) \underset{z \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{z} e^{-i(z - \frac{\ell+1}{2}\pi)}. \quad (\text{A.55})$$

Quando l'argomento è immaginario puro le funzioni di Hankel hanno un comportamento asintotico di tipo esponenziale:

$$h_\ell^{(1)}(iz) \underset{iz \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{iz} e^{(-z - i\frac{\ell+1}{2}\pi)} \quad (\text{A.56})$$

e

$$h_\ell^{(2)}(iz) \underset{iz \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{iz} e^{(z + i\frac{\ell+1}{2}\pi)}. \quad (\text{A.57})$$

A.8 Le prime autofunzioni dell'atomo d'idrogeno

Detto $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ il raggio di Bohr, si ha

$$\psi_{1,0,0} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} a_0^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \quad (\text{A.58})$$

$$\psi_{2,0,0} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} a_0^{-\frac{3}{2}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} \quad (\text{A.59})$$

$$\psi_{2,1,0} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} a_0^{-\frac{3}{2}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \cos \theta \quad (\text{A.60})$$

$$\psi_{2,1,\pm 1} = \frac{1}{8\sqrt{2\pi}} a_0^{-\frac{3}{2}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}. \quad (\text{A.61})$$

A.9 Spin

A.9.1 Matrici di Pauli

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.62})$$

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + \varepsilon_{ijk} \sigma_k \quad (\text{A.63})$$

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = \sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2\delta_{ij} \quad (\text{A.64})$$

$$[\sigma_i \sigma_j] = \sigma_i \sigma_j - \sigma_j \sigma_i = 2i\varepsilon_{ijk} \sigma_k. \quad (\text{A.65})$$

A.9.2 Relazioni utili

$$(\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})\mathbb{I} + i(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (\text{A.66})$$

dove $\mathbb{I}$ è la matrice identità. In particolare se $\mathbf{A} = \mathbf{B}$

$$(\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\sigma})^2 = A^2 \mathbb{I} \quad (\text{A.67})$$

$$e^{i\boldsymbol{\theta} \cdot \boldsymbol{\sigma}} = \mathbb{I} \cos \theta + i(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \sin \theta \quad \text{dove } \mathbf{n} = \frac{\boldsymbol{\theta}}{\theta}. \quad (\text{A.68})$$

A.10 Perturbazioni indipendenti dal tempo

Sia dato l'Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$$

dove il problema agli autovalori di $\mathcal{H}_0$ sia stato risolto:

$$\mathcal{H}_0 |n^0\rangle = E_n^0 |n^0\rangle.$$

Se l'autovalore E_n^0 è non degenere e se gli elementi di matrice $\langle m^0 | \mathcal{H}_1 | n^0 \rangle$ sono piccoli rispetto ai livelli E_n^0 , abbiamo i seguenti sviluppi per gli autovalori E_n e gli autostati $|n\rangle$ di $\mathcal{H}$:

$$E_n = E_n^0 + E_n^1 + E_n^2 + \dots$$

$$|n\rangle = |n^0\rangle + |n^1\rangle + |n^2\rangle + \dots$$

dove

$$E_n^1 = \langle n^0 | \mathcal{H}_1 | n^0 \rangle \quad (\text{A.69})$$

$$E_n^2 = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^0 | \mathcal{H}_1 | n^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} \quad (\text{A.70})$$

$$|n^1\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m^0 | \mathcal{H}_1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} |m^0\rangle. \quad (\text{A.71})$$

Nel caso che l'autovalore E_n^0 sia degenere, le correzioni al prim'ordine agli autovalori sono date dagli autovalori della matrice che corrisponde ad $\mathcal{H}_1$ nell'autospazio di E_n^0 .

$$\det [(\mathcal{H}_1)_{m,j} - E_n^1 \delta_{m,j}] = 0. \quad (\text{A.72})$$

A.11 Perturbazioni istantanee

Per perturbazione istantanea si intende il cambiamento repentino di Hamiltoniano

$$\mathcal{H}_0 \rightarrow \mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$$

dove $\mathcal{H}_0$ e $\mathcal{H}_1$ non dipendono dal tempo. Una perturbazione istantanea non modifica il vettore di stato. Supponendo che inizialmente il sistema sia nello stato $|n^0\rangle$, autoket

di $\mathcal{H}_0$, la probabilità della misura E_k , autovalore del nuovo Hamiltoniano, e quindi la probabilità di transizione $|n^0\rangle \rightarrow |k\rangle$, è data da

$$P_{n \rightarrow k} = |\langle k | n^0 \rangle|^2. \quad (\text{A.73})$$

Se è possibile applicare la teoria perturbativa per autovalori non degeneri, la probabilità di transizione a stati $k \neq n$ è:

$$P_{n \rightarrow k} = \left| \frac{\langle k^0 | \mathcal{H}_1 | n^0 \rangle}{E_k^0 - E_n^0} \right|^2. \quad (\text{A.74})$$

A.12 Perturbazioni dipendenti dal tempo

Sia dato l'Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1(t)$$

dove si conosce la soluzione del problema agli autovalori di $\mathcal{H}_0$

$$\mathcal{H}_0 |n^0\rangle = E_n^0 |n^0\rangle,$$

mentre $\mathcal{H}_1$ dipende dal tempo e i suoi elementi di matrice nella rappresentazione di $\mathcal{H}_0$ sono piccoli rispetto ai livelli E_n^0 . Scriviamo lo stato del sistema al tempo t nella forma

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n d_n(t) e^{-i \frac{E_n^0}{\hbar} t} |n^0\rangle. \quad (\text{A.75})$$

Detta $P_{i \rightarrow f}$ la probabilità con la quale troveremo il sistema nello stato $|f^0\rangle$, se al tempo $t = 0$ esso si trova nello stato $|i^{(0)}\rangle$, al I ordine perturbativo si ha

$$P_{i \rightarrow f}(t) = |d_f(t)|^2 = \left| -\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \langle f^0 | \mathcal{H}_1(\tau) | i^0 \rangle e^{i\omega_{fi}\tau} \right|^2 \quad (\text{A.76})$$

dove $\omega_{fi} = \frac{E_f^0 - E_i^0}{\hbar}$ e $f \neq i$.

A.13 Approssimazione di Born

Detti $\mathbf{k}$ e $\mathbf{k}'$ i vettori d'onda rispettivamente della particella incidente e di quella diffusa, l'ampiezza di diffusione in approssimazione di Born per il potenziale $V(\mathbf{r})$ è data da

$$f_B(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (\text{A.77})$$

dove μ è la massa ridotta del sistema.

Nel caso di potenziale centrale l'espressione si semplifica:

$$f_B(q) = -\frac{2\mu}{\hbar^2 q} \int_0^\infty dr \sin(qr) V(r) r \quad (\text{A.78})$$

dove, trattandosi di scattering elastico, $q = |\mathbf{k} - \mathbf{k}'| = 2k \sin \frac{\theta}{2}$, con θ angolo di diffusione.

A.14 Metodo WKB

Considerato il sistema unidimensionale di una particella di massa m ed energia E soggetta ad un potenziale $V(x)$, definiamo $p(x)$ l'impulso classico

$$p(x) = \sqrt{E - V(x)}.$$

Se l'energia E è inferiore al potenziale $V(x)$ per ogni punto esterno ad un intervallo $[a, b]$, l'autovalore E appartiene allo spettro discreto. Nell'approssimazione WKB, gli autovalori dell'energia ad esso appartenenti sono dati dalla relazione

$$\frac{1}{\hbar} \int_b^a dx p(x) = (n + \frac{1}{2})\pi \quad \text{con } n = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{A.79})$$

Equivalentemente, se si considera un'intera oscillazione classica tra i due punti a e b di inversione del moto, questa relazione può essere riscritta nella forma della quantizzazione di Bohr-Sommerfeld

$$\oint dx p(x) = \int_D dx dp = 2\pi\hbar(n + \frac{1}{2}) \quad \text{con } n = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{A.80})$$

dove, nella prima espressione, l'integrale è esteso alla traiettoria classica completa e, nella seconda, al dominio D da essa delimitato.

Nel caso in cui l'energia E è maggiore del potenziale $V(x)$ per ogni punto esterno all'intervallo $[a, b]$, l'autovalore E appartiene allo spettro continuo e siamo in presenza di una barriera. La probabilità di attraversamento di una barriera in approssimazione WKB è data da

$$T = e^{-\frac{2}{\hbar} \int_a^b dy |p(y)|}. \quad (\text{A.81})$$

Riferimenti bibliografici

- [1] V. I. Kogan and V. M. Galitskiy. *Problems in Quantum Mechanics*. Prentice-Hall London, 1963.
- [2] I. I. Gol'dman and V. D. Krivchenkov. *Problems in Quantum Mechanics*. Pergamon Press London, 1961.
- [3] I. I. Gol'dman, V. D. Krivchenkov, V. I. Kogan, and V. M. Galitskiy. *Selected Problems in Quantum Mechanics*. Infosearch London, 1960.
- [4] D. Ter Haar. *Selected problems in Quantum Mechanics*. Infosearch Ltd. London, 1964.
- [5] G. Passatore. *Problemi di meccanica quantistica elementare*. Franco Angeli Milano, ii edition, 1981.
- [6] Yung-Kuo Lim Ed. *Problems and Solutions on Quantum Mechanics*. World Scientific, 1999.
- [7] E. Merzbacher. *Quantum Mechanics*. Wiley New York, 1970.
- [8] L. Landau and E. Lifchitz. *Phys. Theor. vol. III (Mecanique Quantique)*. Mir Moscou, 1966.
- [9] A. Messiah. *Mecanique Quantique*, volume I e II. Dunod Paris, 1962.
- [10] R. Shankar. *Principles of Quantum Mechanics*. Plenum Press New York, ii edition, 1994.
- [11] G. Nardulli. *Meccanica Quantistica*, volume I e II. Franco Angeli Milano, 2001.
- [12] S. Flügge. *Practical Quantum Mechanics*, volume I e II. Springer Verlag Berlin, 1971.
- [13] K. Gottfried and T-M Yan. *Quantum Mechanics: Fundamentals*. Springer Verlag Berlin, ii edition, 2004.
- [14] J.J. Sakurai and J. Napolitano. *Meccanica quantistica moderna*. Zanichelli Bologna, ii edition, 2014.
- [15] M. Abramowitz and I. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Dover New York, 1972.