

Esercitazioni Meccanica Quantistica

Corso di Laurea in Fisica

Università degli studi di Torino

Per domande su queste note scrivere a marco.regis@unito.it. Ringrazio anche per segnalazioni di refusi o sviste (che spero siano pochi, ma sicuramente presenti).

In caso all'esercizio sia associata un'etichetta GSx.x significa che è presente un esercizio analogo numerato x.x nel libro David J. Griffiths and Darrel F. Schroeter, "Introduction to Quantum Mechanics", Cambridge University Press, Third Edition.

1 Gradino di potenziale

Dato il potenziale mostrato in Fig. 1 e descritto da:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x > 0 \end{cases} \quad (\text{assumendo } V_0 > 0) \quad (1)$$

e considerando una particella con energia E proveniente da "sinistra" ($x = -\infty$) e incidente sul gradino, determinare:

- Le soluzioni dell'equazione stazionaria di Schrödinger.
- I coefficienti di riflessione e trasmissione.

(Time-independent one-dimensional Schrödinger equation) GS2.34

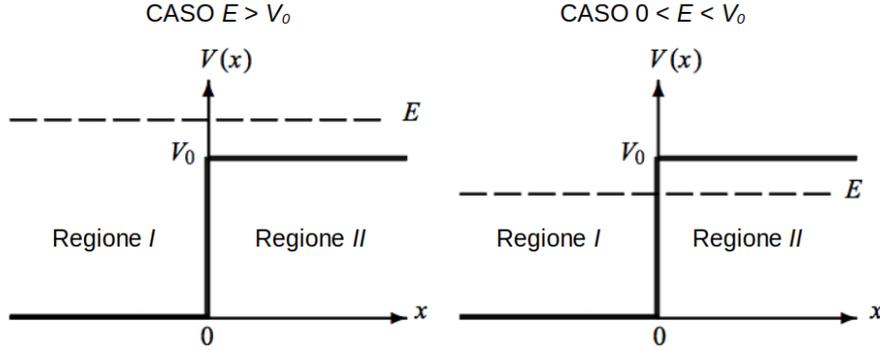


Figure 1: Gradino di potenziale.

Soluzione

Prima di avviarci a risolvere il problema, facciamo alcune considerazioni. Un potenziale discontinuo, come il gradino dell'esercizio attuale, può essere considerato una schematizzazione di un caso continuo con una variazione significativa su distanze molto piccole. Dallo studio delle onde elettromagnetiche sappiamo per esempio che una variazione dell'indice di rifrazione (quantità strettamente legata al potenziale) su distanze dell'ordine della lunghezza d'onda della radiazione determina l'inapplicabilità dell'ottica geometrica e richiede l'introduzione dell'ottica ondulatoria. Analogamente e più in generale, variazioni del potenziale su distanze dell'ordine della lunghezza d'onda di de Broglie delle particelle coinvolte comportano che la descrizione classica del fenomeno non sia più sufficiente e correzioni quantistiche diventino non trascurabili. Per tale ragione incontreremo spesso potenziali discontinui o con variazioni rilevanti su scale piccole.

La seconda considerazione è che classicamente la particella arriva da sinistra nella regione *I* con velocità $v = \sqrt{2E/m}$, e viene riflessa se $E < V_0$, mentre passa nella regione *II* se $E > V_0$, muovendosi con velocità $v = \sqrt{2(E - V_0)/m}$. Per capire cosa succede quantisticamente dobbiamo risolvere l'equazione stazionaria di Schrödinger $H\psi = E\psi$ e possiamo farlo separando i due casi.

Caso A: $E > V_0$

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_I}{dx^2} = E\psi_I \Rightarrow \frac{d^2\psi_I}{dx^2} + k^2\psi_I = 0 & x < 0 \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + V_0\psi_{II} = E\psi_{II} \Rightarrow \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + q^2\psi_{II} = 0 & x > 0 \end{cases} \quad (2)$$

Abbiamo definito $k^2 = 2mE/\hbar^2$ e $q^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$, per rendere le equazioni più compatte. Risolvendo:

$$\begin{cases} \psi_I(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} & x < 0 \\ \psi_{II}(x) = C e^{iqx} + D e^{-iqx} \Rightarrow \psi_{II}(x) = C e^{iqx} & x > 0 \end{cases} \quad (3)$$

dove A, B, C sono costanti complesse e abbiamo posto $D = 0$ perchè trascuriamo l'onda che proviene da $x = +\infty$. Abbiamo ottenuto che nella regione I si ha la sovrapposizione di un'onda piana che si propaga da sinistra verso destra $\psi_i = A e^{ikx}$ incidente sul gradino e un'onda piana riflessa dal gradino che si propaga in direzione opposta $\psi_r = B e^{-ikx}$. Nella regione II abbiamo l'onda trasmessa $\psi_t = C e^{iqx}$ che si propaga da sinistra verso destra. Imponiamo le condizioni di continuità in $x = 0$ per la funzione d'onda e la sua derivata prima:

$$\begin{cases} \psi_I(0) = \psi_{II}(0) \Rightarrow A + B = C \\ \left(\frac{d\psi_I}{dx}\right)_{x=0} = \left(\frac{d\psi_{II}}{dx}\right)_{x=0} \Rightarrow k(A - B) = qC \end{cases} \quad (4)$$

che è un sistema lineare di due equazioni e tre incognite. Attraverso un po' di algebra si arriva a:

$$\begin{cases} C = A \frac{2k}{k+q} \\ B = A \frac{k-q}{k+q} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \psi_I(x) = A e^{ikx} + A \frac{k-q}{k+q} e^{-ikx} & x < 0 \\ \psi_{II}(x) = A \frac{2k}{k+q} e^{iqx} & x > 0 \end{cases} \quad (5)$$

Vogliamo ora calcolare i coefficienti di riflessione e trasmissione, che sono definiti da:

$$R \equiv \frac{j_r}{j_i} \quad \text{e} \quad T \equiv \frac{j_t}{j_i}, \quad (6)$$

dove j_i, j_r e j_t sono le correnti di probabilità relative all'onda incidente, riflessa e trasmessa, rispettivamente. Possono essere calcolate attraverso:

$$j = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{d\Psi}{dx} - \Psi \frac{d\Psi^*}{dx} \right), \quad (7)$$

da cui si ottiene:

$$j_i = \frac{\hbar k}{m} |A|^2, \quad j_r = \frac{\hbar k}{m} |B|^2 \quad \text{e} \quad j_t = \frac{\hbar q}{m} |C|^2 \quad (8)$$

e quindi:

$$T = \frac{q}{k} \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{4kq}{(k+q)^2} \quad \text{e} \quad R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{(k-q)^2}{(k+q)^2}. \quad (9)$$

Si può verificare che $T + R = 1$, come deve essere, visto che l'onda incidente può essere solamente trasmessa o riflessa. Nella descrizione classica avremmo $R = 0$, mentre osserviamo non essere così quantisticamente. Chiaramente però R decresce al crescere di E e si ha:

$$E \rightarrow +\infty \Rightarrow q^2 \rightarrow k^2 \Rightarrow R \rightarrow 0. \quad (10)$$

Caso B: $0 < E < V_0$ ¹

$$\begin{cases} \frac{d^2\psi_I}{dx^2} + k^2 \psi_I = 0 \Rightarrow \psi_I(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} & x < 0 \\ \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} - q^2 \psi_{II} = 0 \Rightarrow \psi_{II}(x) = C e^{-qx} + D e^{qx} \Rightarrow \psi_{II}(x) = C e^{-qx} & x > 0 \end{cases} \quad (11)$$

Abbiamo definito $k^2 = 2mE/\hbar^2$ e $q^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$, e posto $D = 0$ per evitare che $\psi_{II}(x)$ diverga per $x \rightarrow +\infty$.

Dalle condizioni di continuità in $x = 0$ otteniamo:

$$\begin{cases} \psi_I(0) = \psi_{II}(0) \Rightarrow A + B = C \\ \left(\frac{d\psi_I}{dx}\right)_{x=0} = \left(\frac{d\psi_{II}}{dx}\right)_{x=0} \Rightarrow ik(A - B) = -qC \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} C = A \frac{2k}{k + iq} \\ B = A \frac{k - iq}{k + iq} \end{cases}. \quad (12)$$

Possiamo procedere con l'interpretazione fisica già discussa nel caso precedente in termini di onda incidente, onda riflessa e onda trasmessa. Il coefficiente di riflessione in questo caso risulta essere:

$$R = \frac{j_r}{j_i} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left| \frac{k - iq}{k + iq} \right|^2 = \left(\frac{k - iq}{k + iq} \right) \left(\frac{k - iq}{k + iq} \right)^* = 1. \quad (13)$$

Abbiamo trovato dunque che per $E < V_0$ avviene riflessione totale. Ciò sembra essere in apparente contraddizione l'esistenza di una probabilità non nulla di trovarsi al di là del gradino che può essere espressa in termini della funzione d'onda trasmessa $|\psi_t|^2 = |C|^2 e^{-2qx}$, dove $C \neq 0$ da Eq. 12. In realtà è tutto spiegabile attraverso l'interpretazione probabilistica propria della meccanica quantistica. Ossia, la particella incidente sul gradino non è localizzata in $x = 0$ ma è descritta da una distribuzione di probabilità che ammette valori non nulli nell'intorno di x anche per $x > 0$ (e in particolare tali valori non saranno piccoli fino a quando si è a distanze comparabili con la scala associata al principio di indeterminazione). Tale probabilità tende però a zero per $x \rightarrow +\infty$, come si vede dall'espressione di $|\psi_t|^2$ e ciò significa riflessione totale (la particella "non può raggiungere" $x = +\infty$), vedi Fig. 2.

Il fenomeno può anche essere pensato in analogia alla propagazione di un'onda elettromagnetica che incontra un mezzo dissipativo il quale assorbe completamente la radiazione.

¹Notare che $E < 0$ implica soluzioni identicamente nulle.

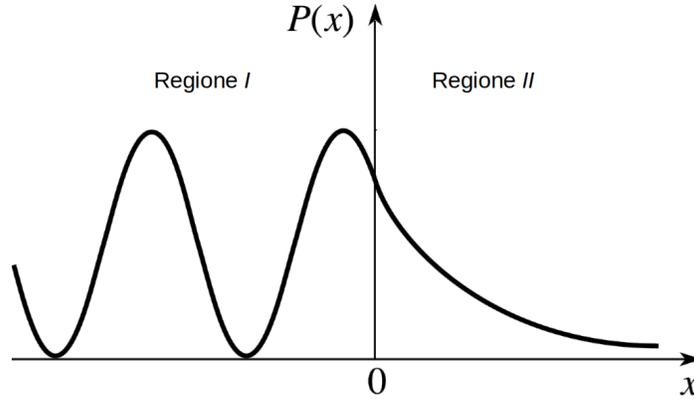


Figure 2: Densità di probabilità per problema gradino di potenziale, caso $0 < E < V_0$.

2 Gradino rovesciato (esercizio per casa)

Considerare il potenziale:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ -V_0 & x > 0 \end{cases} \quad (\text{con } V_0 > 0) \quad (14)$$

e una particella con energia $E > 0$ proveniente da “sinistra” ($x = -\infty$). Calcolare coefficiente di riflessione e mostrare che $R \rightarrow 1$ per $E \rightarrow 0$ (opposto al caso classico).

(Time-independent one-dimensional Schrödinger equation) GS2.35

Soluzione

$$R = \left(\frac{\sqrt{E} - \sqrt{E + V_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E + V_0}} \right)^2. \quad (15)$$

3 Barriera di potenziale

Dato il potenziale mostrato in Fig. 3 e descritto da:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0, x > a \\ V_0 & 0 < x < a \end{cases} \quad (\text{assumendo } V_0 > 0) \quad (16)$$

e considerando una particella con energia E proveniente da “sinistra” ($x = -\infty$) e incidente sulla barriera, determinare:

- a) Le soluzioni dell'equazione stazionaria di Schrödinger
b) I coefficienti di riflessione e trasmissione.

(Time-independent one-dimensional Schrödinger equation) GS2.33

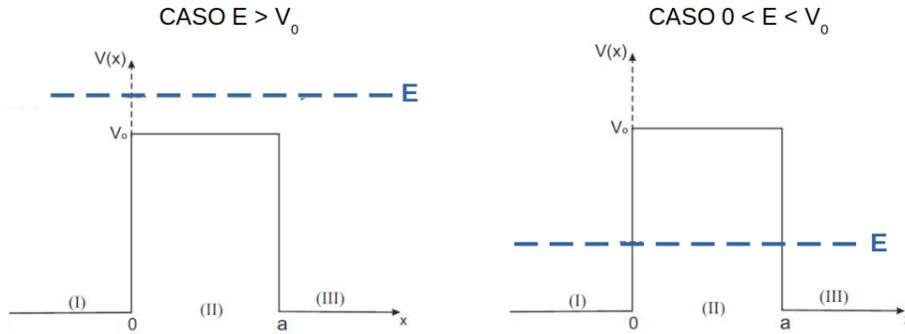


Figure 3: Barriera di potenziale.

Soluzione

Risolviamo il problema considerando i due casi illustrati in Fig. 3, $E > V_0$ e $0 < E < V_0$.

Caso A: $E > V_0$

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_I}{dx^2} = E \psi_I \Rightarrow \frac{d^2\psi_I}{dx^2} + k^2 \psi_I = 0 & x < 0 \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + V_0 \psi_{II} = E \psi_{II} \Rightarrow \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + q^2 \psi_{II} = 0 & 0 < x < a \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_{III}}{dx^2} = E \psi_{III} \Rightarrow \frac{d^2\psi_{III}}{dx^2} + k^2 \psi_{III} = 0 & x > a \end{cases} \quad (17)$$

Abbiamo definito $k^2 = 2mE/\hbar^2$ e $q^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$, per rendere le equazioni più compatte. Risolvendo:

$$\begin{cases} \psi_I(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} & x < 0 \\ \psi_{II}(x) = C e^{iqx} + D e^{-iqx} & 0 < x < a \\ \psi_{III}(x) = E e^{ikx} + F e^{-ikx} \Rightarrow \psi_{III} = E e^{ikx} & x > a \end{cases} \quad (18)$$

dove A, B, C, D, E sono costanti complesse e abbiamo posto $F = 0$ perchè trascuriamo l'onda che proviene da $x = +\infty$. Analogamente al problema del gradino di potenziale,

possiamo definire un'onda incidente $\psi_i = A e^{ikx}$, un'onda riflessa $\psi_r = B e^{-ikx}$ e un'onda trasmessa $\psi_t = E e^{ikx}$, da cui calcolare le densità di corrente di probabilità ed ottenere i coefficienti di riflessione e trasmissione:

$$R \equiv \frac{j_r}{j_i} = \frac{|B|^2}{|A|^2} \quad \text{e} \quad T \equiv \frac{j_t}{j_i} = \frac{|E|^2}{|A|^2}. \quad (19)$$

Imponiamo le condizioni di continuità in $x = 0$ e $x = a$ per la funzione d'onda e la sua derivata prima, ottenendo un sistema lineare di quattro equazioni e cinque incognite:

$$\begin{cases} \psi_I(0) = \psi_{II}(0) \Rightarrow A + B = C + D ; \left(\frac{d\psi_I}{dx} \right)_{x=0} = \left(\frac{d\psi_{II}}{dx} \right)_{x=0} \Rightarrow A - B = \frac{q}{k}(C - D) \\ \psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) \Rightarrow C e^{iqa} + D e^{-iqa} = E e^{ika} \\ \left(\frac{d\psi_{II}}{dx} \right)_{x=a} = \left(\frac{d\psi_{III}}{dx} \right)_{x=a} \Rightarrow C e^{iqa} - D e^{-iqa} = \frac{k}{q} E e^{ika} \end{cases} \quad (20)$$

Sommando tra loro le prime due equazioni del sistema e sommando e sottraendo le ultime due si ottiene:

$$\begin{cases} A = \frac{C}{2} \left(\frac{k+q}{k} \right) + \frac{D}{2} \left(\frac{k-q}{k} \right) \\ C = \frac{E}{2} e^{ia(k-q)} \left(\frac{k+q}{q} \right) \\ D = -\frac{E}{2} e^{ia(k+q)} \left(\frac{k-q}{q} \right) \end{cases} \quad (21)$$

ossia

$$A = \frac{E}{2kq} e^{iak} [2kq \cos(aq) - i(k^2 + q^2) \sin(aq)], \quad (22)$$

da cui calcolare T e quindi $R = 1 - T$:

$$T = \left[1 + \frac{(k^2 - q^2)^2 \sin^2(aq)}{4k^2 q^2} \right]^{-1} \quad \text{e} \quad R = \left[1 + \frac{4k^2 q^2}{(k^2 - q^2)^2 \sin^2(aq)} \right]^{-1}. \quad (23)$$

Come nel caso della barriera abbiamo:

$$E \rightarrow +\infty \Rightarrow q^2 \rightarrow k^2 \Rightarrow T \rightarrow 1. \quad (24)$$

Esiste però anche un'ulteriore situazione in cui si ha trasparenza assoluta della barriera ed è quando $\sin(aq) = 0$, ossia per $q = n\pi/a$ (con $n = 1, 2, \dots$). Esprimendo in termini di lunghezza d'onda $\lambda = 2\pi/q$, la condizione diventa $a = n\lambda/2$ cioè se la barriera contiene un numero intero di semi-lunghezze d'onda non vi è riflessione. Tale fenomeno è chiamato effetto Ramsauer-Townsend. Al contrario per $\sin^2(aq) = 1$ si ha massima riflessione (ma notare $R < 1$), che, nei processi d'urto, corrisponde ad una risonanza.

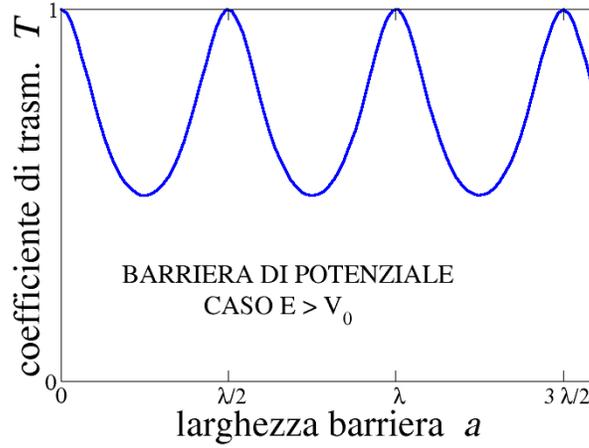


Figure 4: Coefficiente di trasmissione in funzione della larghezza della barriera di potenziale, caso $E > V_0$. Notare la presenza di massimi (trasparenza assoluta - effetto Ramsauer-Townsend) e minimi (risonanze).

Caso B: $0 < E < V_0$

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_I}{dx^2} = E \psi_I \Rightarrow \frac{d^2\psi_I}{dx^2} + k^2 \psi_I = 0 & x < 0 \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + V_0 \psi_{II} = E \psi_{II} \Rightarrow \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} - q^2 \psi_{II} = 0 & 0 < x < a \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_{III}}{dx^2} = E \psi_{III} \Rightarrow \frac{d^2\psi_{III}}{dx^2} + k^2 \psi_{III} = 0 & x > a, \end{cases} \quad (25)$$

dove abbiamo, come al solito, definito $k^2 = 2mE/\hbar^2$ e $q^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$. Risolvendo:

$$\begin{cases} \psi_I(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} & x < 0 \\ \psi_{II}(x) = C e^{-qx} + D e^{qx} & 0 < x < a \\ \psi_{III}(x) = E e^{ikx} + F e^{-ikx} \Rightarrow \psi_{III}(x) = E e^{ikx} & x > a \end{cases} \quad (26)$$

dove A, B, C, D, E sono costanti complesse e abbiamo posto $F = 0$ perchè trascuriamo l'onda che proviene da $x = +\infty$. È immediato riconoscere che è tutto analogo al caso precedente operando la sostituzione $q \rightarrow iq$. Ricordando che $\cos(iy) = \cosh(y)$ e $\sin(iy) = i \sinh(y)$, Eq. 22 diventa:

$$A = \frac{E}{2kq} e^{ia k} [2kq \cosh(aq) - i(k^2 - q^2) \sinh(aq)] , \quad (27)$$

da cui:

$$T = \left[1 + \frac{(k^2 + q^2)^2 \sinh^2(aq)}{4k^2 q^2} \right]^{-1} \quad \text{e} \quad R = \left[1 + \frac{4k^2 q^2}{(k^2 + q^2)^2 \sinh^2(aq)} \right]^{-1}. \quad (28)$$

Notare che T è diverso da zero, ossia è possibile attraversare la barriera, nonostante $E < V_0$. Tale fenomeno è detto effetto tunnel. Si può facilmente vedere inoltre che la probabilità di trasmissione decresce rapidamente nel limite di barriere alte ($V_0 \gg E$ cioè $q^2 \gg k^2$), e analogamente anche nel limite di barriere larghe ($a \gg 1/q$), riconducendoci al caso dell'esercizio 1.

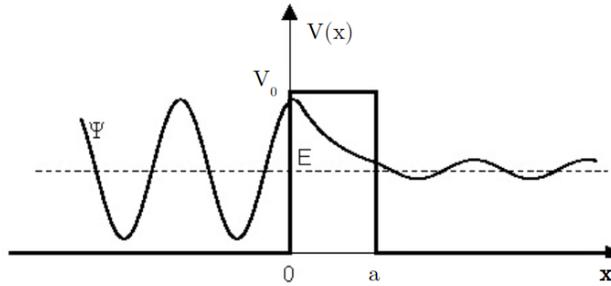


Figure 5: Illustrazione della funzione d'onda per tunneling della barriera di potenziale nel caso $0 < E < V_0$.

4 Buca di potenziale finita

Dato il potenziale mostrato in Fig. 6 e descritto da:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| > a \\ -V_0 & -a \leq x \leq a \end{cases} \quad (\text{assumendo } V_0 > 0) \quad (29)$$

e considerando una particella con energia E proveniente da “sinistra” ($x = -\infty$) e incidente sulla buca, descrivere le soluzioni dell'equazione di Schrödinger.

(Time-independent one-dimensional Schrödinger equation) GS chapter 2.6

Soluzione

Risolviamo il problema considerando separatamente gli stati di scattering ($E > 0$) e gli stati legati ($E < 0$).

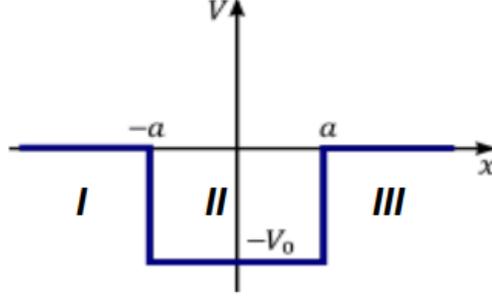


Figure 6: Buca di potenziale finita.

Caso A: $E > 0$

In questo caso possiamo procedere in maniera analoga a quanto visto per gli esercizi precedenti.

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_I}{dx^2} = E \psi_I \Rightarrow \frac{d^2\psi_I}{dx^2} + k^2 \psi_I = 0 & x < -a \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} - V_0 \psi_{II} = E \psi_{II} \Rightarrow \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + q^2 \psi_{II} = 0 & -a \leq x \leq +a \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_{III}}{dx^2} = E \psi_{III} \Rightarrow \frac{d^2\psi_{III}}{dx^2} + k^2 \psi_{III} = 0 & x > +a \end{cases} \quad (30)$$

dove abbiamo definito $k^2 = 2mE/\hbar^2$ e $q^2 = 2m(E + V_0)/\hbar^2$. Risolvendo:

$$\begin{cases} \psi_I(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} & x < -a \\ \psi_{II}(x) = C e^{iqx} + D e^{-iqx} & -a \leq x \leq +a \\ \psi_{III}(x) = E e^{ikx} + F e^{-ikx} \Rightarrow \psi_{III} = E e^{ikx} & x > +a \end{cases} \quad (31)$$

dove A, B, C, D, E sono costanti complesse e abbiamo posto $F = 0$ perchè trascuriamo l'onda che proviene da $x = +\infty$.

Esercizio per casa: Imporre le condizioni di continuità e verificare le espressioni seguenti per i coefficienti di trasmissione e riflessione:

$$T = \left[1 + \frac{V_0^2 \sin^2(Lq)}{4E(E + V_0)} \right]^{-1} \quad \text{e} \quad R = \left[1 + \frac{4E(E + V_0)}{V_0^2 \sin^2(Lq)} \right]^{-1}, \quad (32)$$

dove $L = 2a$ è la larghezza della buca. Notare che si ha riflessione massima ("risonanza") per $L = (2n + 1) \lambda/4$, mentre trasparenza assoluta $T = 1$ per $L = n \lambda/2$ (dove $\lambda = 2\pi/q$), ossia

l'effetto Ramsauer-Townsend. Quest'ultima relazione può anche essere scritta in termini di energia (ricordando la definizione di q):

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} - V_0, \quad (33)$$

che ci dice quale energia devono avere le particelle per determinare una trasmissione perfetta.

Caso B: $-V_0 < E < 0$

Consideriamo ora energie negative. Per $E \leq -V_0$ si ottiene la soluzione identicamente nulla. Restringiamo quindi il campo di indagine a $-V_0 < E < 0$.

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_I}{dx^2} = E \psi_I \Rightarrow \frac{d^2 \psi_I}{dx^2} - k^2 \psi_I = 0 & x < -a \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_{II}}{dx^2} - V_0 \psi_{II} = E \psi_{II} \Rightarrow \frac{d^2 \psi_{II}}{dx^2} + q^2 \psi_{II} = 0 & -a \leq x \leq +a \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_{III}}{dx^2} = E \psi_{III} \Rightarrow \frac{d^2 \psi_{III}}{dx^2} - k^2 \psi_{III} = 0 & x > +a \end{cases} \quad (34)$$

dove ora $k^2 = -2mE/\hbar^2$ e $q^2 = 2m(E + V_0)/\hbar^2$. Risolvendo:

$$\begin{cases} \psi_I(x) = A e^{-kx} + B e^{kx} \Rightarrow \psi_I(x) = B e^{kx} & x < -a \\ \psi_{II}(x) = C e^{-iqx} + D e^{iqx} & -a \leq x \leq +a \\ \psi_{III}(x) = E e^{-kx} + F e^{+kx} \Rightarrow \psi_{III}(x) = E e^{-kx} & x > +a \end{cases} \quad (35)$$

dove B, C, D, E sono costanti complesse e abbiamo posto $A = F = 0$ per evitare che la soluzione diverga a $x = \pm\infty$. La funzione d'onda è illustrata in Fig. 7 (avendo considerato opportune condizioni di continuità in $x = a$ e $x = -a$). Appare evidente che sia una funzione a quadrato sommabile.

Approfondiamo ora la descrizione nella regione II . Riscriviamo la soluzione come:

$$\psi_{II}(x) = C' \sin(qx) + D' \cos(qx). \quad (36)$$

Il potenziale è simmetrico per $x \rightarrow -x$, e non è difficile dimostrare, attraverso l'equazione di Schrödinger, che gli stati stazionari debbano avere simmetria $\psi(x) = \pm\psi(-x)$, dove col segno $+$ abbiamo le soluzioni "pari" ($C' = 0$ e $D' \neq 0$) e col segno $-$ le soluzioni "dispari" ($C' \neq 0$ e $D' = 0$).

Cominciamo con le soluzioni **pari** e imponiamo le condizioni di continuità in $x = +a$ (la situazione in $x = -a$ è analoga per via della simmetria):

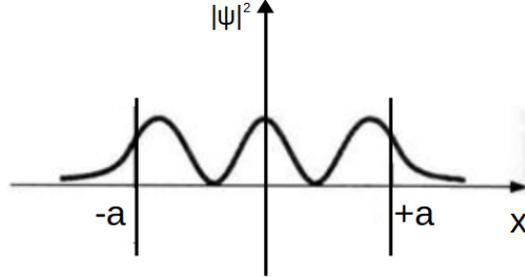


Figure 7: Esempio di soluzione dell'equazione di Schrödinger buca finita, caso $-V_0 < E < 0$.

$$\begin{cases} \psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) \Rightarrow D' \cos(qa) = E e^{-ka} \\ \left(\frac{d\psi_{II}}{dx} \right)_{x=a} = \left(\frac{d\psi_{III}}{dx} \right)_{x=a} \Rightarrow -q D' \sin(qa) = -k E e^{-ka} \Rightarrow q \tan(qa) = k \end{cases} \quad (37)$$

Nell'ultimo passaggio abbiamo diviso la seconda equazione per la prima. Per visualizzare le soluzioni di questa equazione trascendente definiamo le variabili:

$$z = qa, \quad y = ka, \quad r^2 = \frac{2m V_0 a^2}{\hbar^2}, \quad (38)$$

da cui

$$\begin{cases} y = z \tan z \\ y^2 + z^2 = r^2 \end{cases} \quad (39)$$

Notare che y e z variano con l'energia, mentre r è fissato (a fissato potenziale) e la seconda equazione definisce una circonferenza nel piano (z, y) . Graficando si ottiene Fig. 8.

Le soluzioni del sistema e quindi i possibili valori dell'energia sono dati dalle intersezioni tra le curve e possiamo notare che:

- lo spettro è discreto (le condizioni di continuità “discretizzano” lo spettro)
- all'aumentare di r (cioè di larghezza e profondità della buca), il numero di soluzioni aumenta
- esiste sempre almeno una soluzione, ossia, anche se la profondità di una buca simmetrica è prossima allo zero, si ha sempre almeno uno stato legato.

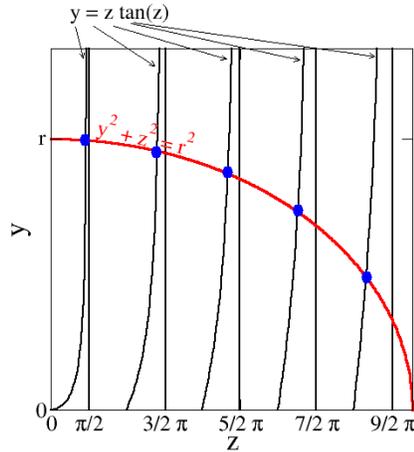


Figure 8: Soluzione grafica, caso funzione d'onda pari.

- nel limite $V_0 \rightarrow +\infty$ si ha² $z_n \rightarrow n\pi/2$ che implica:

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m L^2} - V_0, \quad (40)$$

cioè le soluzioni corrispondenti alla buca a pareti infinite (dove il fondo della buca, cioè $-V_0$ viene tradizionalmente fissato a zero, mentre $V(x)$ fuori dalla buca vale $+\infty$).

Analogamente, per quanto riguarda le soluzioni **dispari**, imponiamo le condizioni di continuità e troviamo:

$$\begin{cases} y = -z \cotgz \\ y^2 + z^2 = r^2. \end{cases} \quad (41)$$

Graficamente in Fig. 9 si può notare che le soluzioni dispari si intervallano con quelle pari.

5 Buca di potenziale infinita /1

Considerare una particella confinata tra 0 e a in una buca di potenziale infinita, che abbia una funzione d'onda iniziale data da:

$$\Psi(x, 0) = A \sqrt{\frac{2}{a}} \left[1 + \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right] \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right). \quad (42)$$

²Includendo anche le soluzioni dispari che vedremo fra poco.

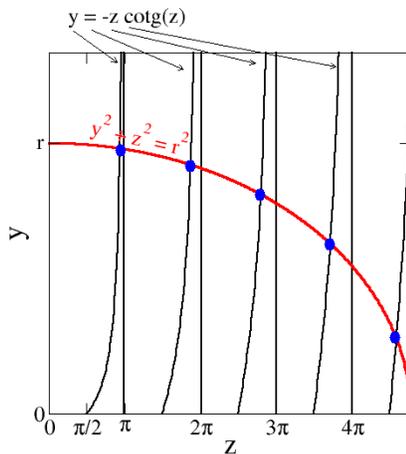


Figure 9: Soluzione grafica, caso funzione d'onda dispari.

- Calcolare A .
- Tale funzione d'onda descrive uno stato stazionario?
- Calcolare il valor medio dell'energia e la sua evoluzione temporale.
- Esercizio per casa:** Calcolare il valor medio della posizione e la sua evoluzione temporale.

[Soluzione: $\langle x \rangle = \frac{a}{2} \left[1 - \frac{128}{45\pi^2} \cos(3\omega t) \right]$]

(Time-independent one-dimensional Schrödinger equation) GS2.5

Soluzione

Prima di cominciare a risolvere l'esercizio è utile ricordare la formula trigonometrica:

$$\sin \alpha \cos \beta = \frac{1}{2} [\sin(\alpha + \beta) + \sin(\alpha - \beta)] . \quad (43)$$

Chiamando $\alpha = \beta = \pi x/a$, possiamo riscrivere la funzione d'onda come:

$$\begin{aligned} \Psi(x, 0) &= A \sqrt{\frac{2}{a}} \left[\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right] = A \sqrt{\frac{2}{a}} \left[\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \frac{1}{2} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \right] \\ &= A \left[\psi_1(x) + \frac{1}{2} \psi_2(x) \right] , \end{aligned} \quad (44)$$

dove abbiamo introdotto le autofunzioni normalizzate della buca infinita di potenziale $\psi_n(x) = \sqrt{2/a} \sin(n\pi x/a)$ e in Eq.44 riscritto la funzione d'onda in termini delle prime

due, cioè $\Psi = \sum_n c_n \Psi_n$, con $c_1 = A$, $c_2 = A/2$ e $c_{n>2} = 0$. Ricordiamo inoltre che esse sono ortogonali fra loro $\int \psi_m(x) \psi_n(x) dx = \delta_{mn}$. Quest'ultima informazione può essere utilizzata per semplificare la determinazione di A , che otteniamo richiedendo la normalizzazione $\int |\Psi(x, 0)|^2 dx = 1$:

$$1 = \int_0^a |A[\psi_1(x) + \frac{1}{2}\psi_2(x)]|^2 dx = |A|^2 \int_0^a [|\psi_1|^2 + \frac{1}{2}(\psi_1^* \psi_2 + \psi_2^* \psi_1) + \frac{1}{4}|\psi_2|^2] dx = |A|^2 \frac{5}{4}, \quad (45)$$

da cui $A = \sqrt{4/5}$ (a meno di una fase arbitraria che, essendo irrilevante, poniamo a zero).

Ricordando che l'evoluzione temporale dello stato stazionario Ψ_n è data da $e^{-i E_n t/\hbar}$, la funzione d'onda della particella si può scrivere come:

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \sqrt{\frac{4}{5}} \left[\psi_1(x) e^{-i E_1 t/\hbar} + \frac{1}{2} \psi_2(x) e^{-i E_2 t/\hbar} \right] = \sqrt{\frac{4}{5}} e^{-i \omega t} \left[\psi_1(x) + \frac{1}{2} \psi_2(x) e^{-i 3\omega t} \right] \\ &= \sqrt{\frac{8}{5a}} e^{-i \omega t} \left[1 + \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{-3i \omega t} \right] \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right), \end{aligned} \quad (46)$$

ricordando che $E_n = n^2 E_1 = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2m a^2}$ e usando $E_n/\hbar = n^2 \omega$.

Per stabilire se si tratta di uno stato stazionario dobbiamo capire se il modulo quadro dipende dal tempo:

$$\begin{aligned} |\Psi(x, t)|^2 &= \frac{8}{5a} \left[1 + \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) (e^{-3i \omega t} + e^{3i \omega t}) \right] \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \\ &= \frac{8}{5a} \left[1 + \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) + 2 \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) \cos(3\omega t) \right] \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right). \end{aligned} \quad (47)$$

Non è quindi uno stato stazionario (pur essendo una sovrapposizione di stati stazionari).

Il valor medio dell'energia è dato da:

$$\langle H \rangle = \int_0^a \Psi(x, t)^* i \hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} dx, \quad (48)$$

che conduce a (formula che si ottiene immediatamente attraverso l'espansione in stati stazionari):

$$\langle H \rangle = \sum_n c_n^2 E_n = \frac{4}{5} E_1 + \frac{1}{5} E_2 = \left(\frac{4}{5} + \frac{4}{5}\right) E_1 = \frac{8}{5} \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2}. \quad (49)$$

6 Buca di potenziale infinita /2

Una particella di massa m si trova nello stato fondamentale di una buca di potenziale con pareti infinite situate a $x = 0$ e $x = a$. All'istante $t = 0$ la parete di destra si sposta

- istantaneamente a $x = 2a$, lasciando la funzione d'onda momentaneamente indisturbata.
- Scrivere la funzione d'onda a $t = 0$, l'operatore Hamiltoniano, e le autofunzioni dell'energia a $t > 0$.
 - Una misura dell'energia viene effettuata a $t > 0$. Quali sono i possibili risultati?
 - Calcolare le loro probabilità e determinare i due valori più probabili.
 - Calcolare il valor medio dell'energia usando il valore d'aspettazione dell'Hamiltoniana a $t > 0$ e confrontarlo con quello a $t < 0$.

(Time-independent one-dimensional Schrödinger equation)

Soluzione

Ricordiamo le autofunzioni normalizzate e gli autovalori dell'energia per la buca di potenziale asimmetrica di larghezza L :

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad , \quad E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m L^2} \quad , \quad (50)$$

A $t = 0$ possiamo considerare $L = a$ e per lo stato fondamentale si ha $n = 1$, quindi:

$$\Psi(x, 0) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \quad \text{per } 0 \leq x \leq a \quad , \quad \Psi(x, 0) = 0 \quad \text{per } x > a, x < 0 \quad . \quad (51)$$

L'operatore Hamiltoniano è dato da $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m) + V$, dove V è definito da:

$$V(x, t = 0) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq a \\ +\infty & x < 0, x > a \end{cases} \quad V(x, t > 0) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq 2a \\ +\infty & x < 0, x > 2a \end{cases} \quad (52)$$

Le autofunzioni e i possibili risultati di una misura di energia a $t > 0$ (uso un simbolo \sim per differenziare rispetto al caso $t \leq 0$) possono dunque essere ottenuti da Eqs. 50 con $L = 2a$:

$$\tilde{\psi}_n(x) = \sqrt{\frac{1}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) \quad , \quad \tilde{E}_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{8m a^2} \quad , \quad (53)$$

La funzione d'onda a $t > 0$ può essere sviluppata attraverso $\Psi(x, t) = \sum_n c_n \tilde{\psi}_n(x) e^{-i\tilde{E}_n t/\hbar}$, e la probabilità degli autovalore \tilde{E}_n è data da $|c_n|^2$. Possiamo calcolare tali coefficienti attraverso:

$$\begin{aligned} c_n &= \langle \Psi(x, 0) | \tilde{\psi}_n(x) \rangle = \int_0^a dx \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sqrt{\frac{1}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) \\ &= \frac{\sqrt{2}}{a} \frac{a}{\pi} \int_0^\pi dy \sin y \sin(ny/2) = -\frac{\sqrt{2}}{\pi} \frac{4 \sin(n\pi/2)}{n^2 - 4} \quad . \end{aligned} \quad (54)$$

Si ottiene quindi $c_n = 0$ per n pari, a parte il caso $n = 2$ che va trattato a parte e per il quale si ottiene $c_n = \sqrt{2}/2$ e quindi $|c_2|^2 = 1/2$. Per n dispari si ha invece $|c_n|^2 = \frac{32}{\pi^2(n^2-4)^2}$. I due risultati più probabili sono dunque \tilde{E}_1 con $P_1 = |c_1|^2 \simeq 0.36$ e \tilde{E}_2 con $P_2 = |c_2|^2 = 0.5$.

Il valore di aspettazione dell'Hamiltoniana a $t > 0$ è dato da:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle_{t>0} &= \sum_n |c_n|^2 \tilde{E}_n = |c_2|^2 \frac{\hbar^2 \pi^2 4}{8 m a^2} + \sum_{n \text{ odd}} \frac{32}{\pi^2 (n^2 - 4)^2} \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{8 m a^2} \\ &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{4 m a^2} + \frac{4 \hbar^2}{m a^2} \underbrace{\sum_{n \text{ odd}} \frac{n^2}{(n^2 - 4)^2}}_{\pi^2/16} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2 m a^2}. \end{aligned} \quad (55)$$

Abbiamo verificato dunque che è uguale al valore per $t < 0$ (dato da Eq. 50 con $L = a$ e $n = 1$).

7 Buca di potenziale infinita /3

Considerare una particella in una buca di potenziale infinita di larghezza a con funzione d'onda iniziale data da:

$$\Psi(x, 0) = A [\psi_1(x) + e^{i\phi} \psi_2(x)], \quad (56)$$

dove ψ_n rappresenta lo stato stazionario n -esimo e ϕ è una costante reale.

- 1) Determinare A e $\Psi(x, t)$.
- 2) Qual è la probabilità di trovare la particella nella metà sinistra della buca di potenziale all'istante $t = 0$?
- 3) Senza ulteriori calcoli, scrivere la probabilità di trovare la particella nella metà sinistra della buca a t generico.
- 4) Se si misura l'energia della particella, quali valori si possono ottenere e con quali probabilità? Determinare il valore medio ad un generico istante di tempo.
- 5) Determinare il valore medio dell'impulso, ad un generico istante di tempo.

(Time-independent one-dimensional Schrödinger equation) GS2.6

Soluzione

Consideriamo una buca infinita asimmetrica con stati stazionari normalizzati dati da $\psi_n(x) = \sqrt{2/a} \sin(n\pi x/a)$. Ricordiamo inoltre che esse sono ortogonali fra loro $\int \psi_m(x) \psi_n(x) dx = \delta_{mn}$. Quest'ultima informazione può essere utilizzata per determinare A , che otteniamo richiedendo la normalizzazione $\int |\Psi(x, 0)|^2 dx = 1$:

$$1 = \int_0^a |A [\psi_1(x) + e^{i\phi} \psi_2(x)]|^2 dx = |A|^2 \int_0^a [|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2] dx = |A|^2 2, \quad (57)$$

da cui $A = 1/\sqrt{2}$ (a meno di una fase arbitraria che, essendo irrilevante, poniamo a zero).

Ricordando che l'evoluzione temporale dello stato stazionario Ψ_n è data da $e^{-i E_n t/\hbar}$, la funzione d'onda della particella si può scrivere come:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_1(x) e^{-i E_1 t/\hbar} + e^{i\phi} \psi_2(x) e^{-i E_2 t/\hbar} \right] = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i E_1 t/\hbar} \left[\psi_1(x) + e^{i\phi} \psi_2(x) e^{-i 3 E_1 t/\hbar} \right] \quad (58)$$

avendo usato $E_n = n^2 E_1 = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2 m a^2}$.

La metà sinistra corrisponde a $[0, a/2]$, da cui:

$$\begin{aligned} P_{[0, a/2]}(0) &= \int_0^{a/2} |\Psi(x, 0)|^2 dx = \frac{1}{2} \int_0^{a/2} \left[|\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2 + \psi_1(x) \psi_2(x) (e^{i\phi} + e^{-i\phi}) \right] dx \\ &= \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{2} + 2 \cos \phi \frac{2}{a} \int_0^{a/2} \sin(\pi x/a) \sin(2\pi x/a) dx \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[1 + 2 \cos \phi \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} \sin(y) \sin(2y) dy \right] \\ &= \frac{1}{2} + \cos \phi \frac{4}{\pi} \underbrace{\int_0^{\pi/2} \sin^2(y) \cos(y) dy}_{\int_0^1 dx x^2 = 1/3} = \frac{1}{2} + \frac{4}{3\pi} \cos \phi, \end{aligned} \quad (59)$$

avendo usato $\sin(2y) = 2 \cos(y) \sin(y)$. Da Eq. 58 è immediato osservare che il calcolo a $t \neq 0$ procede esattamente allo stesso modo, operando la sostituzione $\phi \rightarrow \phi - 3 E_1 t/\hbar$. Si ha dunque (definendo $\omega = E_1/\hbar$):

$$P_{[0, a/2]}(t) = \frac{1}{2} + \frac{4}{3\pi} \cos(\phi - 3 \omega t), \quad (60)$$

Avendo scritto la funzione d'onda attraverso lo sviluppo in autostati dell'Hamiltoniano, il valore medio dell'energia sarà dato da:

$$\langle H(t) \rangle = |c_1|^2 E_1 + |c_2|^2 E_2 = \frac{1}{2}(E_1 + E_2) = \frac{5\hbar^2 \pi^2}{4 m a^2}, \quad (61)$$

valido per un generico istante di tempo, essendo una costante del moto. Abbiamo usato $c_1 = 1/\sqrt{2}$ e $c_2 = e^{i\phi}/\sqrt{2}$ e la misura dell'energia può dare E_1 o E_2 con uguale probabilità pari a $|c_1|^2 = |c_2|^2 = 1/2$.

Notiamo che gli autostati di \hat{H} non sono autostati di \hat{p} . Infatti il potenziale non è invariante per traslazioni e $[\hat{H}, \hat{p}] \neq 0$.³ Calcoliamo esplicitamente il valor medio dell'operatore

³A prima vista questa affermazione potrebbe essere poco intuitiva, ma può essere capita prendendo una buca con pareti ripide ma non verticali. Chiaramente in tali regioni il potenziale non commuta con l'impulso, e facendo il limite per ripidità delle pareti che va a infinito si ritrova il caso del problema in questione.

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}:$$

$$\begin{aligned} \langle p(t) \rangle &= \int_0^a \Psi(x, t)^* \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right] \Psi(x, t) dx \\ &= \frac{-i\hbar}{a} \int_0^a \left[\sin(\pi x/a) + e^{-i(\phi-3\omega t)} \sin(2\pi x/a) \right] \left[\frac{\pi}{a} \cos(\pi x/a) + e^{i(\phi-3\omega t)} \frac{2\pi}{a} \cos(2\pi x/a) \right] dx \\ &= \frac{-i\hbar\pi}{a^2} \int_0^a \left[e^{-i(\phi-3\omega t)} \sin(2\pi x/a) \cos(\pi x/a) + e^{i(\phi-3\omega t)} 2 \sin(\pi x/a) \cos(2\pi x/a) \right] dx \\ &= \frac{-i\hbar}{a} \int_0^\pi \left[e^{-i(\phi-3\omega t)} \sin(2y) \cos(y) + e^{i(\phi-3\omega t)} 2 \sin(y) \cos(2y) \right] dy \\ &= \frac{4i\hbar}{3a} \left[e^{i(\phi-3\omega t)} - e^{-i(\phi-3\omega t)} \right] = -\frac{8\hbar}{3a} \sin(\phi - 3\omega t). \end{aligned} \quad (62)$$

8 Particella libera

Considerare la seguente funzione d'onda: $\psi(x) = A \cos(kx)$, dove A è una costante opportunamente dimensionata. Si tratta di una particella libera? Tale ψ descrive uno stato ad impulso definito? Assumendo sia una particella libera, descrive uno stato ad energia definita?

(Free particle)

Soluzione

La funzione d'onda rappresenta lo stato dinamico del sistema, ma per decidere se si tratta di una particella libera occorrerebbe conoscere l'Hamiltoniano. Per rispondere alle altre domande, riscriviamo la funzione d'onda come:

$$\psi(x) = A \cos(kx) = \frac{A}{2} \left(e^{ikx} + e^{-ikx} \right). \quad (63)$$

Lo stato è dato da una sovrapposizione di stati con impulsi $+\hbar k$ e $-\hbar k$. Quindi non ha impulso definito. Per derivare l'energia occorre conoscere l'Hamiltoniano. Se siamo in un caso di particella libera ($V = 0$), l'energia è definita essendo $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$.

9 Principio di indeterminazione e raggio di Bohr

Usando il principio di indeterminazione, dimostrare che un elettrone nell'atomo di idrogeno è localizzato in una regione definita dal raggio di Bohr.

(The Uncertainty Principle)

Soluzione

Considerando l'elettrone localizzato in una regione di dimensioni lineari Δx , possiamo stimare, dal principio di indeterminazione, il suo impulso essere dell'ordine $p \sim \hbar/\Delta x$ e la sua energia cinetica:

$$T = \frac{p^2}{2m} \sim \frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2}. \quad (64)$$

L'energia totale $E = T + V$ è data dalla somma di energia cinetica ed energia potenziale, quest'ultima associata all'attrazione Coulombiana, $V = -e^2/(4\pi\epsilon_0\Delta x)$. Possiamo ottenere la distanza di equilibrio Δx_e minimizzando l'energia:

$$\frac{dE}{d(\Delta x)} \sim -\frac{\hbar^2}{m(\Delta x)^3} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(\Delta x)^2} = 0 \Rightarrow \Delta x_e \sim \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}, \quad (65)$$

che coincide con l'espressione del raggio di Bohr.

10 Funzione d'onda gaussiana

Considerare la funzione d'onda di una particella di massa m descritta da:

$$\Psi(x, t) = A e^{-\alpha(x^2 + i\hbar t/m)}, \quad A \in \mathbb{C}, \alpha \in \mathbb{R}^+. \quad (66)$$

- Determinare la costante A .
- Determinare le densità di probabilità di posizione e impulso.
- Determinare la funzione energia potenziale tale per cui questa funzione d'onda soddisfa l'equazione di Schrödinger.
- Verificare il principio di indeterminazione, facendo il calcolo nello spazio delle configurazioni.
- Compito per casa:** Verificare il principio di indeterminazione, facendo il calcolo nello spazio degli impulsi.

(The Wave Function) GS1.9

Soluzione

La costante A può essere calcolata imponendo la condizione di normalizzazione della funzione d'onda:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow 1 = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\alpha x^2} dx = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}}, \quad (67)$$

da cui

$$A = e^{i\theta} \left(\frac{2\alpha}{\pi} \right)^{1/4}, \quad (68)$$

dove θ è una fase arbitraria da cui non dipendono le leggi fisiche e può quindi essere posta $\theta = 0$, per semplicità. La funzione d'onda risulta quindi essere:

$$\Psi(x, t) = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha(x^2 + iht/m)} \quad (69)$$

La densità di probabilità associata alla posizione è data da:

$$\rho(x) = |\psi(x)|^2 = \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} e^{-2\alpha x^2}, \quad (70)$$

ossia una Gaussiana centrata nell'origine e con dispersione $\sigma_x = 1/\sqrt{4\alpha}$.

Per ottenere la densità di probabilità associata all'impulso occorre prima calcolare la funzione d'onda nello spazio degli impulsi, che si ottiene attraverso la trasformata di Fourier della funzione d'onda nello spazio delle configurazioni:

$$\begin{aligned} \phi(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ipx/\hbar} \psi(x) dx = \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ipx/\hbar - \alpha x^2} dx \\ &= \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha(x + \frac{ip}{2\alpha\hbar})^2} e^{-\frac{p^2}{4\alpha\hbar^2}} dx = \frac{A e^{-\frac{p^2}{4\alpha\hbar^2}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha y^2} dy, \end{aligned} \quad (71)$$

dove nell'ultimo passaggio si è effettuato il cambio di variabile $y = x + \frac{ip}{2\alpha\hbar}$ e⁴ da cui si ottiene

$$\phi(p) = \frac{1}{(2\alpha\pi\hbar^2)^{1/4}} e^{-\frac{p^2}{4\alpha\hbar^2}}. \quad (72)$$

La densità di probabilità associata all'impulso è quindi:

$$|\phi(p)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\alpha\pi\hbar^2}} e^{-\frac{p^2}{2\alpha\hbar^2}} \quad (73)$$

Per determinare la funzione energia potenziale, partiamo dall'equazione di Schrödinger $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V \Psi$ e valutiamo i vari termini:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i\alpha\hbar}{m} \Psi, \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -2\alpha(1 - 2\alpha x^2) \Psi, \quad (74)$$

ottenendo:

$$\begin{aligned} V \Psi &= -\frac{i\alpha\hbar}{m} i\hbar \Psi - 2\alpha(1 - 2\alpha x^2) \frac{\hbar^2}{2m} \Psi = \frac{\alpha\hbar^2}{m} \Psi + \frac{\alpha\hbar^2}{m} (2\alpha x^2 - 1) \Psi \\ &= \frac{2\alpha^2 \hbar^2 x^2}{m} \Psi \Rightarrow V = \frac{2\alpha^2 \hbar^2 x^2}{m}. \end{aligned} \quad (75)$$

⁴Notare che in questo caso l'integrale nel piano complesso su una retta parallela all'asse reale dà lo stesso risultato dell'integrale sul cammino reale.

Abbiamo ottenuto un potenziale parabolico (oscillatore armonico).

Per verificare il principio di indeterminazione dobbiamo valutare il prodotto $\sigma_x \sigma_p$, dove $\sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ e $\sigma_p^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$. Da quanto calcolato in precedenza già sappiamo che $\sigma_x = 1/\sqrt{4\alpha}$, ma andiamo a verificarlo attraverso la definizione appena enunciata.

$$\langle x \rangle_x = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi|^2 dx = 0, \quad (76)$$

in quanto l'integrando è dispari. Il pedice x indica che ci stiamo riferendo al valore di aspettazione nello spazio delle configurazioni. Definendo $\beta = 2\alpha$:

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle_x &= \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\psi|^2 dx = A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\beta x^2} dx = -A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial \beta} (e^{-\beta x^2}) dx \\ &= -A^2 \frac{d}{d\beta} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta x^2} dx = -A^2 \frac{d}{d\beta} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} = \frac{1}{4\alpha}, \end{aligned} \quad (77)$$

ossia il risultato atteso.

Per calcolare σ_p , ricordiamo che l'operatore impulso nello spazio delle configurazioni è dato da $-i\hbar\partial/\partial x$.

$$\langle p \rangle_x = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi(x) dx = i\hbar A^2 \beta \int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-\beta x^2} dx = 0. \quad (78)$$

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle_x &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \right) \psi(x) dx = -A^2 \hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} [-\beta(1 - \beta x^2)] e^{-\alpha x^2} dx \\ &= A^2 \hbar^2 \beta \int_{-\infty}^{+\infty} (e^{-\beta x^2} - \beta x^2 e^{-\beta x^2}) dx = \hbar^2 \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \beta \left[\sqrt{\frac{\pi}{\beta}} + \beta \frac{d}{d\beta} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} \right] = \hbar^2 \alpha. \end{aligned} \quad (79)$$

Abbiamo quindi ottenuto:

$$\sigma_x \sigma_p = \frac{1}{2\sqrt{\alpha}} \sqrt{\alpha} \hbar = \frac{\hbar}{2}. \quad (80)$$

Notare che siamo in una situazione di minima indeterminazione (questo si può capire notando che di fatto stiamo descrivendo lo stato fondamentale dell'oscillatore armonico con $\alpha = m\omega/(2\hbar)$).

11 Funzione d'onda esponenziale

Considerare la funzione d'onda di una particella descritta da:

$$\Psi(x, t) = \begin{cases} A x e^{-(x/x_0 + i\omega t)} & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}, \quad A \in \mathbb{C}, \omega \in \mathbb{R}, x_0 \in \mathbb{R}^+ \quad (81)$$

- a) Determinare la costante A .
 b) E' la particella in uno stato legato?
 c) Determinare la funzione energia potenziale tale per cui questa funzione d'onda soddisfa l'equazione di Schrödinger, assumendo $V \rightarrow 0$ per $x \rightarrow +\infty$.
 d) Verificare il principio di indeterminazione, facendo il calcolo nello spazio delle configurazioni.

(The Wave Function)

Soluzione

Nei calcoli seguenti utilizzeremo l'integrale per parti:

$$\int x^n e^{-2x/x_0} dx = -\frac{x_0}{2} x^n e^{-2x/x_0} + n \frac{x_0}{2} \int x^{n-1} e^{-2x/x_0} dx, \quad (82)$$

da cui

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} x e^{-2x/x_0} dx &= \frac{x_0^2}{4}, & \int_0^{+\infty} x^2 e^{-2x/x_0} dx &= \frac{x_0^3}{4} \\ \int_0^{+\infty} x^3 e^{-2x/x_0} dx &= \frac{3x_0^4}{8}, & \int_0^{+\infty} x^4 e^{-2x/x_0} dx &= \frac{3x_0^5}{4} \end{aligned} \quad (83)$$

La costante A può essere calcolata imponendo la condizione di normalizzazione della funzione d'onda:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow 1 = |A|^2 \int_0^{+\infty} x^2 e^{-2x/x_0} dx = |A|^2 \frac{x_0^3}{4}, \quad (84)$$

da cui

$$A = e^{i\theta} 2 x_0^{-3/2}, \quad (85)$$

dove θ è una fase arbitraria da cui non dipendono le leggi fisiche e può quindi essere posta $\theta = 0$, per semplicità. La funzione d'onda per $x > 0$ risulta quindi essere:

$$\Psi(x, t) = 2 \frac{x}{x_0^{3/2}} e^{-(x/x_0 + i\omega t)} \quad (86)$$

La particella si trova in uno stato legato, infatti:

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \Psi(x, t) = 0 \quad \forall t. \quad (87)$$

La densità di probabilità associata alla posizione è data da:

$$\rho(x) = |\psi(x)|^2 = \frac{4x^2}{x_0^3} e^{-2x/x_0}, \quad (88)$$

Per determinare la funzione energia potenziale nella regione $x > 0$, partiamo dall'equazione di Schrödinger $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V \Psi$ e valutiamo i vari termini:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\omega \Psi, \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{2}{x x_0} \Psi + \frac{1}{x_0^2} \Psi, \quad (89)$$

ottenendo:

$$V \Psi = \omega \hbar \Psi - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{2}{x x_0} \Psi + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{x_0^2} \Psi \Rightarrow V = \frac{\hbar^2}{m x_0} \frac{1}{x}, \quad (90)$$

dove nell'ultimo passaggio abbiamo usato $V \rightarrow 0$ per $x \rightarrow +\infty$, ossia $x_0^2 = -\hbar/(2m\omega)$ (ricordare che lo stato è legato quindi $\omega < 0$). Abbiamo ottenuto un potenziale Coulombiano, dove x_0 ha l'espressione del raggio di Bohr. Vedremo più avanti il legame tra l'Eq. 81 e la funzione d'onda radiale dello stato fondamentale dell'atomo di idrogeno.

Per verificare il principio di indeterminazione dobbiamo valutare il prodotto $\sigma_x \sigma_p$, dove $\sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ e $\sigma_p^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$. Calcoliamo tali valori medi nello spazio delle configurazioni:

$$\begin{aligned} \langle x \rangle_x &= \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi|^2 dx = \frac{4}{x_0^3} \underbrace{\int_0^{+\infty} x^3 e^{-2x/x_0} dx}_{\frac{3x_0^4}{8}} = \frac{3}{2} x_0 \\ \langle x^2 \rangle_x &= \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\psi|^2 dx = \frac{4}{x_0^3} \underbrace{\int_0^{+\infty} x^4 e^{-2x/x_0} dx}_{\frac{3x_0^5}{4}} = 3x_0^2. \end{aligned} \quad (91)$$

Ricordando che l'operatore impulso nello spazio delle configurazioni è dato da $-i\hbar \partial/\partial x$ si ha:

$$\begin{aligned} \langle p \rangle_x &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi(x) dx = -\frac{4i\hbar}{x_0^3} \underbrace{\int_0^{+\infty} \left(x - \frac{x^2}{x_0} \right) e^{-2x/x_0} dx}_{\frac{x_0^2}{4} - \frac{x_0^3}{4x_0}} = 0 \quad (92) \\ \langle p^2 \rangle_x &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \right) \psi(x) dx = -\frac{4\hbar^2}{x_0^3} \underbrace{\int_0^{+\infty} \left(\frac{x^2}{x_0^2} - \frac{2x}{x_0} \right) e^{-2x/x_0} dx}_{\frac{x_0^3}{4x_0^2} - \frac{x_0^2}{2x_0}} = \frac{\hbar^2}{x_0^2}. \end{aligned}$$

Possiamo quindi verificare il principio di indeterminazione:

$$\sigma_x \sigma_p = \sqrt{3x_0^2 - \frac{9}{4}x_0^2} \frac{\hbar}{x_0} = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar > \frac{\hbar}{2}, \quad (93)$$

12 Oscillatore armonico /1

Considerare lo stato stazionario n -esimo dell'oscillatore armonico lineare.

- Calcolare i valori di aspettazione $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle p \rangle$ e $\langle p^2 \rangle$
- Dimostrare che i valori di aspettazione di energia cinetica e potenziale sono uguali tra loro.
- Verificare il principio di indeterminazione.

(Time-independent one-dimensional Schrödinger equation) GS2.12

Soluzione

Gli operatori di creazione e distruzione sono definiti da:

$$\hat{a}^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m \omega}} (m \omega \hat{x} - i \hat{p}) \quad , \quad \hat{a} \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m \omega}} (m \omega \hat{x} + i \hat{p}) \quad , \quad (94)$$

da cui

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \quad , \quad \hat{p} = i \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \quad . \quad (95)$$

La loro azione sullo stato stazionario n -esimo è:

$$\hat{a}^\dagger \psi_n = \sqrt{n+1} \psi_{n+1} \quad , \quad \hat{a} \psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1} \quad . \quad (96)$$

Ricordando inoltre che gli stati stazionari dell'oscillatore armonico sono ortogonali tra loro ($\int \psi_m^* \psi_n dx = \delta_{mn}$), possiamo procedere al calcolo dei valori di aspettazione richiesti:

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \hat{x} \psi_n = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \psi_n dx \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\sqrt{n+1} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \psi_{n+1} dx + \sqrt{n} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \psi_{n-1} \right) dx = 0 \quad . \end{aligned} \quad (97)$$

Da questo risultato possiamo anche dedurre $\langle p \rangle = m d\langle x \rangle / dt = 0$ (o ripetere l'esercizio usando Eq. 95). Per calcolare $\langle x^2 \rangle$ e $\langle p^2 \rangle$ ricaviamo altre relazioni utili:

$$\begin{aligned} \hat{a}^{\dagger 2} \psi_n &= \hat{a}^\dagger (\sqrt{n+1} \psi_{n+1}) = \sqrt{n+1} \sqrt{n+2} \psi_{n+2} \\ \hat{a}^\dagger \hat{a} \psi_n &= \hat{a}^\dagger (\sqrt{n} \psi_{n-1}) = n \psi_n \\ \hat{a} \hat{a}^\dagger \psi_n &= \hat{a} (\sqrt{n+1} \psi_{n+1}) = (n+1) \psi_n \\ \hat{a}^2 \psi_n &= \hat{a} (\sqrt{n} \psi_{n-1}) = \sqrt{n} \sqrt{n-1} \psi_{n-2} \quad . \end{aligned} \quad (98)$$

Da cui:

$$\begin{aligned}
\langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \hat{x}^2 \psi_n = \frac{\hbar}{2m\omega} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* (\hat{a}^\dagger + \hat{a})^2 \psi_n dx \\
&= \frac{\hbar}{2m\omega} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* (\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a} \hat{a}) \psi_n dx \\
&= \frac{\hbar}{2m\omega} \left(0 + n \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n|^2 dx + (n+1) \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n|^2 dx + 0 \right) = \frac{\hbar}{2m\omega} (2n+1) = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right)
\end{aligned} \tag{99}$$

$$\begin{aligned}
\langle p^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \hat{p}^2 \psi_n = -\frac{\hbar m \omega}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* (\hat{a}^\dagger - \hat{a})^2 \psi_n dx \\
&= -\frac{\hbar m \omega}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* (\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger \hat{a} - \hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a} \hat{a}) \psi_n dx \\
&= -\frac{\hbar m \omega}{2} (0 - n - (n+1) + 0) = \frac{\hbar m \omega}{2} (2n+1) = \hbar m \omega \left(n + \frac{1}{2} \right).
\end{aligned} \tag{100}$$

Il valore di aspettazione dell'energia cinetica è dato da:

$$\langle K \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} = \frac{1}{2} \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \tag{101}$$

Ricordando che l'energia degli stati stazionari dell'oscillatore armonico è $\langle H \rangle = \hbar \omega (n+1/2)$ si ottiene:

$$\langle V \rangle = \langle H \rangle - \langle K \rangle = \frac{1}{2} \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \tag{102}$$

Per verificare il principio di indeterminazione dobbiamo valutare il prodotto $\sigma_x \sigma_p$, dove $\sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ e $\sigma_p^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$. Da quanto valutato in precedenza otteniamo:

$$\sigma_x \sigma_p = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \sqrt{n + \frac{1}{2}} \sqrt{\hbar m \omega} \sqrt{n + \frac{1}{2}} = \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{103}$$

13 Oscillatore armonico /2

All'istante $t = 0$, un oscillatore armonico lineare si trova nello stato

$$|\psi\rangle_0 = \frac{1}{2} \left(i \sqrt{3} + a^\dagger \right) |0\rangle \tag{104}$$

- Determinare lo stato che descrive il sistema ad un generico istante $t > 0$.
- Calcolare il valor medio dell'energia a $t = 0$ e $t > 0$.

- c) Si tratta di uno stato stazionario? Perché?
d) Calcolare il valor medio dell'impulso a $t = 0$ e $t > 0$.

Ricordando:

$$\hat{a}^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (m\omega \hat{x} - i\hat{p}) \quad , \quad \hat{a} \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (m\omega \hat{x} + i\hat{p}) \quad , \quad (105)$$

(Time-independent one-dimensional Schrödinger equation)

Soluzione

Facendo agire l'operatore di creazione lo stato iniziale si può scrivere come:

$$|\psi\rangle_0 = \frac{1}{2} (i\sqrt{3}|0\rangle + |1\rangle) \quad . \quad (106)$$

Sapendo che l'evoluzione temporale degli stati stazionari è codificata dal fattore $e^{-iE_n t/\hbar}$, con $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ si ha:

$$|\psi\rangle_t = \frac{1}{2} e^{-i\omega t/2} (i\sqrt{3}|0\rangle + e^{-i\omega t}|1\rangle) \quad . \quad (107)$$

Il valore medio dell'energia non dipende dal tempo ed è dato da:

$$\langle H \rangle = \left(\frac{1}{2} i\sqrt{3}\right)^2 E_0 + \left(\frac{1}{2}\right)^2 E_1 = \frac{3\hbar\omega}{4} \frac{\omega}{2} + \frac{1}{4} \frac{3\hbar\omega}{2} = \frac{3}{4} \hbar\omega \quad . \quad (108)$$

$|\psi\rangle_0$ non è uno stato stazionario in quanto non è autostato dell'hamiltoniana.

L'espressione dell'operatore impulso in termini degli operatori di creazione e distruzione è data da $\hat{p} = i\sqrt{\hbar m\omega/2}(\hat{a}^\dagger - \hat{a})$. Calcoliamo il suo valore medio:

$$\begin{aligned} \langle \hat{p} \rangle &= \frac{1}{4} i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (-i\sqrt{3}\langle 0| + e^{i\omega t}\langle 1|) (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) (i\sqrt{3}|0\rangle + e^{-i\omega t}|1\rangle) \\ &= i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{32}} (-i\sqrt{3}\langle 0| + e^{i\omega t}\langle 1|) (i\sqrt{3}|1\rangle + e^{-i\omega t}[-|0\rangle + \sqrt{2}|2\rangle]) \\ &= i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{32}} (i\sqrt{3}e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}i\sqrt{3}) = -\sqrt{\frac{3\hbar m\omega}{8}} \cos(\omega t) \quad , \quad (109) \end{aligned}$$

che chiaramente si riduce a $-\sqrt{\frac{3\hbar m\omega}{8}}$ per $t = 0$.

14 Oscillatore armonico /3

Considerare un oscillatore armonico di costante elastica k nello stato fondamentale e calcolare la probabilità di trovarlo fuori dalla regione classicamente permessa. Sapendo che classicamente l'energia è data da $E = k x_{\max}^2/2$, un valore non nullo di tale probabilità è in contraddizione con la conservazione dell'energia?

(*Time-independent one-dimensional Schrödinger equation*)

Soluzione

Classicamente, la regione permessa per un oscillatore armonico di pulsazione $\omega = \sqrt{k/m}$ è compresa tra $-x_{\max}$ e $+x_{\max}$ dove

$$x_{\max} = \sqrt{\frac{2E}{k}} = \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{2E}{m}}. \quad (110)$$

Nello stato fondamentale $E = \hbar\omega/2$ da cui $x_{\max} = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$. La funzione d'onda è data da:

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-m\omega x^2/(2\hbar)} = \frac{\pi^{1/4}}{\sqrt{\pi x_{\max}}} e^{-x^2/(2x_{\max}^2)}. \quad (111)$$

La probabilità di trovare l'oscillatore armonico fuori dalla regione classicamente permessa è quindi:

$$\begin{aligned} P(|x| > x_{\max}) &= 2 \int_{x_{\max}}^{+\infty} dx |\psi_0(x)|^2 = \frac{2}{\sqrt{\pi} x_{\max}} \int_{x_{\max}}^{+\infty} dx e^{-x^2/x_{\max}^2} \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_1^{+\infty} dy e^{-y^2} = \text{erfc}[1] = 15.7\%. \end{aligned} \quad (112)$$

dove erfc è la cosiddetta funzione degli errori complementare.

La probabilità è non nulla, ma tale risultato non costituisce una violazione della conservazione dell'energia. Questo perchè la posizione è un'osservabile incompatibile con l'energia (cioè \hat{x} e \hat{H} non commutano), quindi una misura della posizione altera lo stato del sistema, facendolo collassare in uno stato con energia non definita (autostato della posizione). Detto in altre parole, non posso avere una misura simultanea di energia dello stato fondamentale e posizione fuori dalla regione classicamente permessa.

15 Stati coerenti dell'oscillatore armonico /1

Considerare gli autostati dell'operatore di distruzione $\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$.

a) Calcolare i valori di aspettazione $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle p \rangle$ e $\langle p^2 \rangle$ nello stato $|\alpha\rangle$

- b) Dimostrare che tali stati, detti coerenti, minimizzano il prodotto delle indeterminazioni.
c) Determinare l'espansione di $|\alpha\rangle$ in termini degli autostati di energia.
d) Calcolare l'evoluzione temporale degli autovalori di \hat{a} (partendo dall'evoluzione temporale degli autostati dell'energia $|\psi_n\rangle \rightarrow e^{-iE_n t/\hbar}|\psi_n\rangle$) e determinare l'evoluzione di $\langle x \rangle$.

(Formalism and Harmonic Oscillator) GS3.42

Soluzione

Gli operatori di creazione e distruzione sono definiti da:

$$\hat{a}^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (m\omega \hat{x} - i\hat{p}) \quad , \quad \hat{a} \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (m\omega \hat{x} + i\hat{p}) \quad , \quad (113)$$

da cui

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \quad , \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \quad . \quad (114)$$

Con queste definizioni possiamo calcolare i valori di aspettazione:

$$\langle x \rangle = \langle \alpha | \hat{x} | \alpha \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle \alpha | \hat{a}^\dagger + \hat{a} | \alpha \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\langle \hat{a} \alpha | \alpha \rangle + \langle \alpha | \hat{a} \alpha \rangle) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\alpha^* + \alpha) \quad (115)$$

$$\langle p \rangle = \langle \alpha | \hat{p} | \alpha \rangle = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \langle \alpha | \hat{a}^\dagger - \hat{a} | \alpha \rangle = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (\langle \hat{a} \alpha | \alpha \rangle - \langle \alpha | \hat{a} \alpha \rangle) = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (\alpha^* - \alpha) \quad (116)$$

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \langle \alpha | \hat{x}^2 | \alpha \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \alpha | \hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a}^2 | \alpha \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \alpha | \hat{a}^{\dagger 2} + 2\hat{a}^\dagger \hat{a} + \mathbb{I} + \hat{a}^2 | \alpha \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} (\langle \hat{a}^2 \alpha | \alpha \rangle + 2\langle \hat{a} \alpha | \hat{a} \alpha \rangle + \langle \alpha | \alpha \rangle + \langle \alpha | \hat{a}^2 \alpha \rangle) \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} [(\alpha^*)^2 + 2\alpha^* \alpha + 1 + \alpha^2] = \frac{\hbar}{2m\omega} [1 + (\alpha + \alpha^*)^2] \end{aligned} \quad (117)$$

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle &= \langle \alpha | \hat{p}^2 | \alpha \rangle = -\frac{\hbar m\omega}{2} \langle \alpha | \hat{a}^{\dagger 2} - \hat{a}^\dagger \hat{a} - \hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a}^2 | \alpha \rangle \\ &= -\frac{\hbar m\omega}{2} \langle \alpha | \hat{a}^{\dagger 2} - 2\hat{a}^\dagger \hat{a} - \mathbb{I} + \hat{a}^2 | \alpha \rangle = -\frac{\hbar m\omega}{2} (\langle \hat{a}^2 \alpha | \alpha \rangle - 2\langle \hat{a} \alpha | \hat{a} \alpha \rangle - \langle \alpha | \alpha \rangle + \langle \alpha | \hat{a}^2 \alpha \rangle) \\ &= -\frac{\hbar m\omega}{2} [(\alpha^*)^2 - 2\alpha^* \alpha - 1 + \alpha^2] = \frac{\hbar m\omega}{2} [1 - (\alpha - \alpha^*)^2] \quad ; \end{aligned} \quad (118)$$

Nei passaggi di cui sopra abbiamo usato il commutatore $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \mathbb{I}$.

Calcoliamo ora le dispersioni:

$$\sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} [1 + (\alpha + \alpha^*)^2] - \frac{\hbar}{2m\omega} (\alpha^* + \alpha)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \quad (119)$$

$$\sigma_p^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = \frac{\hbar m \omega}{2} [1 - (\alpha - \alpha^*)^2] + \frac{\hbar m \omega}{2} (\alpha^* - \alpha)^2 = \frac{\hbar m \omega}{2} \quad (120)$$

Da cui possiamo verificare che il loro prodotto è minimizzato:

$$\sigma_x \sigma_p = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} = \frac{\hbar}{2}. \quad (121)$$

Gli autostati di energia dell'oscillatore armonico sono descritti da (si veda lezione) $|\psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a}^{\dagger n} |\psi_0\rangle$ e l'espansione in tale base di uno stato coerente è $|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} c_n |\psi_n\rangle$. Possiamo determinare i coefficienti attraverso:

$$c_n = \langle \psi_n | \alpha \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle \hat{a}^{\dagger n} \psi_0 | \alpha \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle \psi_0 | \hat{a}^n \alpha \rangle = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \langle \psi_0 | \alpha \rangle = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} c_0, \quad (122)$$

avendo usato l'ortogonalità $\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{nm}$. Richiedendo la normalizzazione della funzione d'onda dello stato coerente $\langle \alpha | \alpha \rangle = 1$:

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = \sum_{m=0}^{+\infty} c_m^* \langle \psi_m | \sum_{n=0}^{+\infty} c_n |\psi_n\rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} |c_n|^2 = |c_0|^2 \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = |c_0|^2 e^{|\alpha|^2} = 1, \quad (123)$$

possiamo ottenere c_0 (a meno di una fase irrilevante) e quindi c_n , da cui:

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-|\alpha|^2/2} |\psi_n\rangle \quad (124)$$

Da $|\psi_n\rangle \rightarrow e^{-i E_n t/\hbar} |\psi_n\rangle$ si può ottenere la dipendenza temporale dello stato coerente:

$$\begin{aligned} |\alpha(t)\rangle &= \sum_{n=0}^{+\infty} c_n e^{-i E_n t/\hbar} |\psi_n\rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-|\alpha|^2/2} e^{-i(n+1/2)\omega t} |\psi_n\rangle \\ &= e^{-i\omega t/2} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} e^{-|\alpha|^2/2} |\psi_n\rangle. \end{aligned} \quad (125)$$

A parte un fattore di fase che non entra nella determinazione dell'autovalore, abbiamo la stessa espressione di $|\alpha(t=0)\rangle$, ma con $\alpha(t) = \alpha e^{-i\omega t}$. L'autovalore α è complesso, scriviamolo come $\alpha = A e^{i\phi}$ e andiamo a sostituire $\alpha(t)$ nell'espressione di $\langle x \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle x \rangle(t) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [\alpha^*(t) + \alpha(t)] = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (A e^{i\phi} e^{-i\omega t} + A e^{-i\phi} e^{i\omega t}) \\ &= \frac{\tilde{A}}{2} (e^{i(\phi-\omega t)} + e^{-i(\phi-\omega t)}) = \tilde{A} \cos(\omega t - \phi). \end{aligned} \quad (126)$$

Abbiamo quindi ottenuto che il valore di aspettazione di x oscilla “classicamente”. Inoltre si può notare che il pacchetto d’onda rimane con una dispersione σ_x costante (non si “sparpaglia”).

16 Stati coerenti dell’oscillatore armonico /2

Uno stato coerente $|\alpha\rangle$ dell’oscillatore armonico semplice unidimensionale è definito da $\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$, dove \hat{a} è l’operatore di distruzione e $\alpha \in \mathbb{C}$.

a) Mostrare che $|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} e^{\alpha a^\dagger} |0\rangle$ è uno stato coerente. $|0\rangle$ è lo stato fondamentale dell’oscillatore armonico; utilizzare la definizione di esponenziale di un operatore e calcolare preliminarmente $[a, e^{\alpha a^\dagger}]$ utilizzando $[A, B^n] = \sum_{k=1}^n B^{k-1} [A, B] B^{n-k}$.

b) Scrivere $|\alpha\rangle$ come sovrapposizione di autostati dell’Hamiltoniana (si ricordi che $a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$) e mostrare che $|\alpha\rangle$ di cui al punto a) è opportunamente normalizzato.

(*Formalism and Harmonic Oscillator*)

Soluzione

Dallo sviluppo dell’esponenziale otteniamo $e^{\alpha a^\dagger} = \sum_n (\alpha a^\dagger)^n / n!$, da cui:

$$\begin{aligned} [a, e^{\alpha a^\dagger}] &= \left[a, \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha a^\dagger)^n}{n!} \right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} [a, (a^\dagger)^n] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} \sum_{k=1}^n (a^\dagger)^{k-1} [a, (a^\dagger)^n] (a^\dagger)^{n-k} \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} \sum_{k=1}^n (a^\dagger)^{n-1} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} n (a^\dagger)^{n-1} = \alpha \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha^{n-1}}{(n-1)!} (a^\dagger)^{n-1} = \alpha \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} (a^\dagger)^n = \alpha e^{\alpha a^\dagger}. \end{aligned} \quad (127)$$

Sapendo che $a|0\rangle = 0$, possiamo ricavare:

$$a|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} a e^{\alpha a^\dagger} |0\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} [a, e^{\alpha a^\dagger}] |0\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \alpha e^{\alpha a^\dagger} |0\rangle = \alpha |\alpha\rangle, \quad (128)$$

che dimostra che $|\alpha\rangle$ è uno stato coerente.

Riscriviamo ora $|\alpha\rangle$ come sovrapposizione di autostati dell’Hamiltoniana $|\alpha\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$:

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha a^\dagger)^n}{n!} |0\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n \sqrt{n!}}{n!} |n\rangle \quad (129)$$

$$c_n = e^{-|\alpha|^2/2} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}. \quad (130)$$

Il modulo di $|\alpha\rangle$ è dato da:

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = \sum_{m,n} c_m^* c_n \langle m | n \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 = e^{-|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(|\alpha|^2)^n}{n!} = e^{-|\alpha|^2} e^{|\alpha|^2} = 1, \quad (131)$$

da cui si evince che lo stato è correttamente normalizzato.

17 Potenziale deltiforme

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

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} W \delta(x), \quad (132)$$

dove $\delta(x)$ è la funzione delta di Dirac.

- Esistono stati legati? In caso affermativo, determinarne energia e funzione d'onda.
- Senza effettuare calcoli e considerando i risultati del punto precedente, qual è il valor medio di x ? Qual è la probabilità di trovare la particella a $x < 0$?
- Determinare il minor valore x_0 tale che la probabilità di trovare la particella con $x < x_0$ sia $1/4$.

(Delta-function well) GS chapter 2.5.2

Soluzione

Cerchiamo una soluzione all'equazione di Schrödinger stazionaria con $E < 0$ (stati legati):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \frac{\hbar^2}{2m} W \delta(x) \psi(x) = E \psi(x). \quad (133)$$

Consideriamo le regione per $x \neq 0$ e definiamo $k^2 = -2mE/\hbar^2$:

$$\begin{cases} \frac{d^2\psi_I}{dx^2} - k^2 \psi_I = 0 \Rightarrow \psi_I(x) = A e^{kx} + B e^{-kx} \Rightarrow \psi_I(x) = A e^{kx} & x < 0 \\ \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} - k^2 \psi_{II} = 0 \Rightarrow \psi_{II}(x) = C e^{kx} + D e^{-kx} \Rightarrow \psi_{II}(x) = D e^{-kx} & x > 0 \end{cases} \quad (134)$$

dove A e D sono costanti complesse e abbiamo posto $B = C = 0$ per evitare divergenze. Imponendo la condizione di continuità della funzione d'onda in $x = 0$ si ottiene $A = D$ e quindi $\psi(x) = A \exp(-k|x|)$. La funzione delta nel potenziale determina una discontinuità nella derivata prima data. Integrando l'equazione di Schrödinger tra $-\epsilon$ e $+\epsilon$ (con $\epsilon \rightarrow 0$), si ottiene:

$$\frac{d\psi}{dx}\Big|_{0^+} - \frac{d\psi}{dx}\Big|_{0^-} = -W \psi(0) \Rightarrow 2k = W \Rightarrow E = -\frac{\hbar^2 W^2}{8m}. \quad (135)$$

Abbiamo scoperto che esiste una soluzione, quindi esiste uno stato legato, ma è uno solo ed ha l'energia data da Eq. 135.

Siccome $|\psi|^2$ è una funzione pari, è immediato vedere che $\langle x \rangle = 0$ e che la probabilità di trovare la particella a $x < 0$ è 50%.

Per determinare completamente la funzione d'onda dobbiamo fissare la costante A , e possiamo farlo con la condizione di normalizzazione:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x)|^2 = 1 \Rightarrow |A|^2 \left(\int_{-\infty}^0 dx e^{2kx} + \int_0^{+\infty} dx e^{-2kx} \right) = 1 \Rightarrow A = \sqrt{k}. \quad (136)$$

Ricordando $k = W/2$, possiamo scrivere:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{W}{2}} e^{-W|x|/2}. \quad (137)$$

Imponendo che la probabilità di trovare la particella con $x < x_0$ sia 1/4 troviamo:

$$\int_{-\infty}^{x_0} dx |\psi(x)|^2 = \frac{1}{4} \Rightarrow \frac{e^{Wx_0}}{2} = \frac{1}{4} \Rightarrow x_0 = -\frac{\ln(2)}{W}. \quad (138)$$

18 Rappresentazione matriciale

Considerare l'operatore Hamiltoniano rappresentato dalla matrice:

$$H_{m,n} = \begin{pmatrix} a & 0 & b \\ 0 & c & 0 \\ b & 0 & a \end{pmatrix}, \quad (139)$$

con $a, b, c \in \mathbb{R}$. Determinare $|S(t)\rangle$, partendo dagli stati iniziali:

$$\text{a) } |S_a(0)\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \text{b) } |S_b(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (140)$$

(Formalism) GS3.44

Soluzione

L'evoluzione temporale relativa all'autostato n -esimo $|s_n\rangle$ dell'operatore Hamiltoniano è data da $e^{-iE_n t/\hbar}|s_n\rangle$, dove E_n sono gli autovalori di \hat{H} . Per risolvere il problema cerchiamo di riscrivere gli stati iniziali forniti nel testo in termini degli autostati dell'Hamiltoniano.

Cominciamo calcolando quindi gli autovalori e autovettori della matrice H . L'equazione caratteristica $\det(H - E\mathbb{I}) = 0$ è data da:

$$\begin{vmatrix} a-E & 0 & b \\ 0 & c-E & 0 \\ b & 0 & a-E \end{vmatrix} = (a-E)(c-E)(a-E) - b^2(c-E) = (c-E)[(a-E)^2 - b^2] = 0. \quad (141)$$

Si ottiene $E_1 = c$, $E_2 = a+b$ e $E_3 = a-b$. Per calcolare gli autovettori $|\alpha\rangle$, bisogna risolvere $H|s_n\rangle = E_n|s_n\rangle$ (**esercizio per casa**), e si ottiene:

$$|s_1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |s_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |s_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (142)$$

Abbiamo quindi $|S_a(0)\rangle = |s_1\rangle$ e $|S_b(0)\rangle = (|s_2\rangle + |s_3\rangle)/\sqrt{2}$, da cui ricaviamo:

$$|S_a(t)\rangle = e^{-iE_1 t/\hbar}|s_1\rangle = e^{-ict/\hbar} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (143)$$

$$\begin{aligned} |S_b(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[e^{-iE_2 t/\hbar}|s_2\rangle + e^{-iE_3 t/\hbar}|s_3\rangle \right] = \frac{1}{2} \left[e^{-i(a+b)t/\hbar} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + e^{-i(a-b)t/\hbar} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \right] \\ &= \frac{1}{2} e^{-iat/\hbar} \begin{pmatrix} e^{-ibt/\hbar} + e^{ibt/\hbar} \\ 0 \\ e^{-ibt/\hbar} - e^{ibt/\hbar} \end{pmatrix} = e^{-iat/\hbar} \begin{pmatrix} \cos(bt/\hbar) \\ 0 \\ -i \sin(bt/\hbar) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (144)$$

19 Oscillatore armonico 3D

Considerare l'hamiltoniana dell'oscillatore armonico tridimensionale isotropo, data da:

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + \frac{m\omega^2}{2} \vec{r}^2. \quad (145)$$

Determinare le soluzioni dell'equazione di Schrödinger e lo spettro energetico.

(*Quantum Mechanics in Three Dimensions*) GS4.46

Soluzione

L'operatore hamiltoniano può essere scritto come la somma di tre operatori corrispondenti al caso dell'oscillatore armonico unidimensionale:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^3 \hat{H}_i = \sum_{i=1}^3 \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{m\omega^2}{2} x_i^2 \quad , \quad (x_1, x_2, x_3) = (x, y, z) . \quad (146)$$

Per tali operatori 1D conosciamo la soluzione dell'equazione di Schrödinger $\hat{H}_i \psi_i(x_i) = E_i \psi_i(x_i)$, dove si ha $E_i = \hbar\omega(n + 1/2)$ e

$$\psi_i = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^{n_i} n_i!}} H_{n_i}(\xi_i) e^{-\xi_i^2/2} , \quad (147)$$

con $\xi_i = \sqrt{m\omega/\hbar} x_i$ e H_{n_i} dato dal polinomio di Hermite di grado n_i (si vedano lezioni su oscillatore armonico 1D).

L'equazione di Schrödinger 3D $\hat{H} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$ è chiaramente separabile e la soluzione è data dal prodotto delle funzioni d'onda unidimensionali $\psi(\vec{r}) = \psi_1(x_1)\psi_2(x_2)\psi_3(x_3)$. Sostituendo tale espressione nell'equazione di Schrödinger 3D, è immediato verificare che $E = E_1 + E_2 + E_3$. La funzione d'onda 3D è quindi:

$$\psi_n(\vec{r}) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{3/4} \frac{1}{\sqrt{2^{n_1+n_2+n_3} n_1! n_2! n_3!}} H_{n_1}(\xi_1) H_{n_2}(\xi_2) H_{n_3}(\xi_3) e^{-r^2/2} . \quad (148)$$

L'energia dell'oscillatore armonico 1D è $E_i = \hbar\omega(n_i + 1/2)$, che implica $E = \hbar\omega(n_1 + n_2 + n_3 + 3/2)$. Notare che lo stato fondamentale ha energia $E = 3/2 \hbar\omega$ e che lo spettro degli stati eccitati è degenere. Infatti, chiamando $N = n_1 + n_2 + n_3$, si hanno tre possibili combinazioni per $N = 1$ corrispondenti a $(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$, $(0, 0, 1)$ per (n_1, n_2, n_3) , 6 combinazioni per $N = 2$, e così via. Si può vedere che in generale la degenerazione ammonta a $(N + 1)(N + 2)/2$.

20 Funzione d'onda a simmetria sferica

In uno spazio tridimensionale, considerare un sistema quantistico descritto dalla funzione d'onda:

$$\psi(r, \theta, \phi) = A e^{-\alpha r} \quad , \quad A \in \mathbb{C} \quad , \quad \alpha \in \mathbb{R}^+ . \quad (149)$$

- Determinare la costante A .
- Determinare σ_r^2 .
- Determinare $\langle x \rangle$, $\langle y \rangle$ e $\langle z \rangle$.
- Calcolare la probabilità di trovare il sistema nell'emisfero superiore dello spazio, all'interno del cono di asse z e apertura $\pi/3$.
- Determinare la funzione energia potenziale $V(r)$ tale per cui questa funzione d'onda

soddisfa l'equazione di Schrödinger per una particella di massa m , assumendo $V(r) \rightarrow 0$ per $r \rightarrow +\infty$.

(Quantum Mechanics in Three Dimensions) GS4.3

Soluzione

La costante A può essere calcolata imponendo la condizione di normalizzazione della funzione d'onda (notare che nell'esercizio vengono adottate coordinate sferiche):

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{+\infty} dr r^2 |\psi(r, \theta, \phi)|^2 = 1 \\ \Rightarrow & 1 = |A|^2 4\pi \int_0^{+\infty} r^2 e^{-2\alpha r} dr = |A|^2 \frac{4\pi}{(2\alpha)^3} \int_0^{+\infty} r'^2 e^{-r'} dr' \\ = & |A|^2 \frac{4\pi}{(2\alpha)^3} 2 = |A|^2 \frac{\pi}{\alpha^3} \Rightarrow A = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}}, \end{aligned} \quad (150)$$

dove abbiamo definito $r' = 2\alpha r$, utilizzato $\int dr r^n e^{-r} = n!$ (che può essere dimostrata integrando n -volte per parti) e nell'ultimo passaggio posto a zero una (irrilevante) fase.

I valori di aspettazione $\langle r \rangle$ e $\langle r^2 \rangle$ possono essere calcolati con integrazioni simili:

$$\langle r \rangle = \frac{\alpha^3}{\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{+\infty} r^3 e^{-2\alpha r} dr = \frac{\alpha^3}{\pi} 4\pi \frac{1}{(2\alpha)^4} 3! = \frac{3}{2\alpha} \quad (151)$$

$$\langle r^2 \rangle = \frac{\alpha^3}{\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{+\infty} r^4 e^{-2\alpha r} dr = \frac{\alpha^3}{\pi} 4\pi \frac{1}{(2\alpha)^5} 4! = \frac{3}{\alpha^2}. \quad (152)$$

Per quanto riguarda lo scarto quadratico, abbiamo quindi:

$$\sigma_r^2 = \langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2 = \frac{3}{\alpha^2} - \frac{9}{4\alpha^2} = \frac{3}{4\alpha^2} \quad (153)$$

Il valore di $\langle r_i \rangle$ con $r_i = x, y, z$ è invece nullo, come si può facilmente capire scrivendo in coordinate cartesiane $|\psi^2| \propto e^{-2\alpha\sqrt{x^2+y^2+z^2}}$, la quale moltiplicata per ciascuna componente (x, y, z) dà origine ad una funzione dispari sul rispettivo asse, avente quindi integrale tra $-\infty$ e $+\infty$ nullo.

Per calcolare la probabilità di trovare il sistema in una certa regione dello spazio, bisogna integrare il modulo quadro della funzione d'onda in tale regione. Nel caso del punto c), la

regione è limitata da $0 \leq \theta \leq \pi/3$:

$$P = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi/3} d\theta \sin \theta \int_0^{+\infty} dr r^2 |\psi(r, \theta, \phi)|^2 = \frac{1}{4\pi} \underbrace{\int_0^{2\pi} d\phi}_{2\pi} \underbrace{\int_0^{\pi/3} d\theta \sin \theta}_{1 - \cos \pi/3} = \frac{1}{4}. \quad (154)$$

Per determinare il potenziale, notiamo innanzitutto che la funzione d'onda dipende solo da r e quindi solo la parte radiale dell'equazione di Schrödinger è rilevante:

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\psi}{dr} \right) + V \psi = E \psi. \quad (155)$$

Sviluppando le derivate:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\psi}{dr} \right) = \frac{2}{r} \frac{d\psi}{dr} + \frac{d^2\psi}{dr^2} = \left(-\frac{2\alpha}{r} + \alpha^2 \right) \psi, \quad (156)$$

si ottiene:

$$V = E + \frac{\hbar}{2m} \left(\alpha^2 - \frac{2\alpha}{r} \right). \quad (157)$$

Imponendo la condizione $V(r) \rightarrow 0$ per $r \rightarrow +\infty$ si ha $E = -\hbar \alpha^2 / (2m)$ e

$$V = -\frac{\hbar \alpha}{m r}, \quad (158)$$

cioè un potenziale alla Coulomb, risultato che poteva già essere intuito senza il calcolo specifico, ricordando che la forma della funzione d'onda è identica allo stato fondamentale dell'atomo d'idrogeno.

21 Commutatori e Momento angolare

Mostrare che, per un potenziale centrale, l'operatore hamiltoniano commuta con le tre componenti del momento angolare.

(Quantum Mechanics in Three Dimensions) GS4.22

Soluzione

L'operatore hamiltoniano è dato da $\hat{H} = \hat{p}^2 / (2m) + V$ e consideriamo V dipendente solo da r . Dobbiamo quindi verificare che le tre componenti del momento angolare commutino con p^2 ed r (una funzione di r può essere vista attraverso il suo sviluppo in serie di Taylor,

da cui si capisce che commutare con r implica commutare con $V(r)$. Consideriamo il caso di \hat{L}_z . Tale operatore è definito da $\hat{L}_z = \hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x$. Useremo i commutatori canonici:

$$[\hat{r}_i, \hat{p}_j] = i \hbar \delta_{ij} = -[\hat{p}_i, \hat{r}_j] \quad , \quad [\hat{r}_i, \hat{r}_j] = 0 = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] . \quad (159)$$

Consideriamo il commutatore di \hat{L}_z col termine cinetico di \hat{H} :

$$\begin{aligned} [\hat{L}_z, \hat{p}^2] &= [\hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x, \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2] = [\hat{x} \hat{p}_y, \hat{p}_x^2] - [\hat{y} \hat{p}_x, \hat{p}_y^2] \\ &= \hat{p}_x [\hat{x}, \hat{p}_x] \hat{p}_y + [\hat{x}, \hat{p}_x] \hat{p}_y \hat{p}_x - \hat{p}_y [\hat{y}, \hat{p}_y] \hat{p}_x - [\hat{y}, \hat{p}_y] \hat{p}_x \hat{p}_y \\ &= i \hbar (\hat{p}_x \hat{p}_y + \hat{p}_y \hat{p}_x - \hat{p}_y \hat{p}_x - \hat{p}_x \hat{p}_y) = 0 . \end{aligned} \quad (160)$$

Il commutatore di \hat{L}_z con r (applicato su una funzione test f) è dato da:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_z, \hat{r}] f &= -i \hbar [x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}, r] f = -i \hbar \left(x \frac{\partial(r f)}{\partial y} - y \frac{\partial(r f)}{\partial x} - r x \frac{\partial f}{\partial y} + r y \frac{\partial f}{\partial x} \right) \\ &= -i \hbar \left(x \frac{\partial r}{\partial y} - y \frac{\partial r}{\partial x} \right) f = -i \hbar \left(x \frac{y}{r} - y \frac{x}{r} \right) f = 0 . \end{aligned} \quad (161)$$

Esercizio per casa: Ripetere la dimostrazione per \hat{L}_x e \hat{L}_y .

22 Commutatori e Momento angolare/2

Dimostrare:

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i \hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k , \quad (162)$$

ricordando che $\hat{L}_i = \epsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k$ e $\epsilon_{ijk} \epsilon_{klm} = \delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}$.
(*Quantum Mechanics in Three Dimensions*)

Soluzione

$$\begin{aligned} [\hat{L}_i, \hat{L}_j] &= [\epsilon_{ikl} \hat{x}_k \hat{p}_l, \epsilon_{jrs} \hat{x}_r \hat{p}_s] = \epsilon_{ikl} \epsilon_{jrs} [\hat{x}_k \hat{p}_l, \hat{x}_r \hat{p}_s] = \epsilon_{ikl} \epsilon_{jrs} (\hat{x}_k [\hat{p}_l, \hat{x}_r \hat{p}_s] + [\hat{x}_k, \hat{x}_r \hat{p}_s] \hat{p}_l) \\ &= \epsilon_{ikl} \epsilon_{jrs} \left(\hat{x}_k \underbrace{[\hat{p}_l, \hat{x}_r]}_{-i \hbar \delta_{lr}} \hat{p}_s + \hat{x}_r \underbrace{[\hat{x}_k, \hat{p}_s]}_{i \hbar \delta_{ks}} \hat{p}_l \right) = i \hbar (-\epsilon_{ikl} \epsilon_{jls} \hat{x}_k \hat{p}_s + \epsilon_{ikl} \epsilon_{jrk} \hat{x}_r \hat{p}_l) \\ &= i \hbar (\epsilon_{ikl} \epsilon_{ljs} \hat{x}_k \hat{p}_s - \epsilon_{kil} \epsilon_{jrk} \hat{x}_r \hat{p}_l) = i \hbar [(\delta_{ks} \delta_{ij} - \delta_{is} \delta_{kj}) \hat{x}_k \hat{p}_s - (\delta_{ji} \delta_{rl} - \delta_{jl} \delta_{ri}) \hat{x}_r \hat{p}_l] \\ &= i \hbar (\delta_{ij} \hat{x}_k \hat{p}_k - \hat{x}_j \hat{p}_i - \delta_{ij} \hat{x}_l \hat{p}_l + \hat{x}_i \hat{p}_j) = i \hbar (\hat{x}_i \hat{p}_j - \hat{x}_j \hat{p}_i) . \end{aligned} \quad (163)$$

Tale espressione coincide con:

$$i \hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_l = i \hbar \epsilon_{ijk} \epsilon_{krs} \hat{x}_r \hat{p}_s = i \hbar (\delta_{ir} \delta_{js} - \delta_{is} \delta_{jr}) \hat{x}_r \hat{p}_s = i \hbar (\hat{x}_i \hat{p}_j - \hat{x}_j \hat{p}_i) . \quad (164)$$

23 Commutatori e Momento angolare/3

Calcolare $A_{\ell,m}^{\pm}$ di:

$$\hat{L}_{\pm} |\ell, m\rangle = A_{\ell,m}^{\pm} |\ell, m \pm 1\rangle, \quad (165)$$

utilizzando $\hat{L}_{\pm} \equiv \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$.

(Quantum Mechanics in Three Dimensions) GS4.21

Soluzione

Per calcolare i coefficienti richiesti utilizziamo $\langle \hat{L}_{\pm}(\ell, m) | \hat{L}_{\pm}(\ell, m) \rangle = |A_{\ell,m}^{\pm}|^2 \langle \ell, m \pm 1 | \ell, m \pm 1 \rangle = |A_{\ell,m}^{\pm}|^2$. Dalla definizione di \hat{L}_{\pm} e ricordando che \hat{L}_x e \hat{L}_y sono hermitiani (sono relativi a due osservabili), si ottiene $(\hat{L}_{\pm})^{\dagger} = \hat{L}_{\mp}$. Possiamo inoltre facilmente calcolare $\hat{L}_{\pm} \hat{L}_{\mp} = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 \mp i(\hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x) = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 \pm \hbar \hat{L}_z$. Attraverso tali risultati intermedi possiamo ora valutare:

$$\begin{aligned} \langle \hat{L}_{\mp}(\ell, m) | \hat{L}_{\mp}(\ell, m) \rangle &= \langle \ell, m | \hat{L}_{\pm} \hat{L}_{\mp}(\ell, m) \rangle = \langle \ell, m | [\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 \pm \hbar \hat{L}_z](\ell, m) \rangle \\ &= \langle \ell, m | (\hbar^2 [\ell(\ell+1) - m(m \mp 1)])(\ell, m) \rangle = \hbar^2 [\ell(\ell+1) - m(m \mp 1)]. \end{aligned} \quad (166)$$

Si è ottenuto dunque:

$$A_{\ell,m}^{\pm} = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m \pm 1)}. \quad (167)$$

24 Funzione d'onda e armoniche sferiche /1

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

$$\psi(\vec{r}) = A \frac{x + iy + z}{r} g(r) \quad \text{con} \quad A \in \mathbb{C}, \quad \int_0^{+\infty} r^2 |g(r)|^2 dr = 1. \quad (168)$$

- Determinare la costante A .
- Calcolare i possibili risultati di una misura di L_z e L^2 della particella, la probabilità di tali risultati e il valore medio delle due osservabili.
- Se lo stato iniziale è descritto da Eq. 168 e il sistema è soggetto all'hamiltoniana $\hat{H} = \hat{H}_0 + a \hat{L}_z$, dove \hat{H}_0 è un'hamiltoniana con potenziale centrale, indipendente dal tempo, come cambiano le risposte di cui al punto b) per un tempo $t > 0$?
- Esercizio per casa:** Calcolare la probabilità di trovare il sistema nell'emisfero superiore a $t = 0$. [Soluzione: $P = 1/2$]

(Quantum Mechanics in Three Dimensions)

Soluzione

Ricordiamo le prime armoniche sferiche (normalizzate in modo che $\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin \theta Y_\ell^m Y_{\ell'}^{m'} d\theta d\phi = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}$):

$$Y_0^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}, \quad Y_1^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_1^{\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi} \quad (169)$$

e le relazioni tra coordinate cartesiane e sferiche:

$$x = r \sin \theta \cos \phi, \quad y = r \sin \theta \sin \phi, \quad z = r \cos \theta. \quad (170)$$

Riscriviamo quindi la funzione d'onda:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= A \frac{x + iy + z}{r} g(r) = A (\sin \theta (\cos \phi + i \sin \phi) + \cos \theta) g(r) \\ &= A (\sin \theta e^{i\phi} + \cos \theta) g(r) = A \left[-\sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_1^1(\theta, \phi) + \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_1^0(\theta, \phi) \right] g(r). \end{aligned} \quad (171)$$

Richiedendo che sia opportunamente normalizzata otteniamo

$$1 = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{+\infty} dr r^2 |\psi(r, \theta, \phi)|^2 = |A|^2 \left(\frac{8\pi}{3} + \frac{4\pi}{3} \right) = 4\pi |A|^2, \quad (172)$$

ossia $A = 1/\sqrt{4\pi}$ e dunque

$$\psi(r, \theta, \phi) = \left[-\sqrt{\frac{2}{3}} Y_1^1(\theta, \phi) + \sqrt{\frac{1}{3}} Y_1^0(\theta, \phi) \right] g(r). \quad (173)$$

Ricordando che le armoniche sferiche sono autofunzioni di \hat{L}^2 e \hat{L}_z , $\hat{L}^2 Y_\ell^m = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_\ell^m$ e $\hat{L}_z Y_\ell^m = \hbar m Y_\ell^m$, i possibili risultati di una misura sono $L^2 = 2\hbar^2$ e $L_z = 0$ o $L_z = \hbar$. Il loro valor medio è dato da:

$$\begin{aligned} \langle \hat{L}^2 \rangle &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{+\infty} dr r^2 \psi(r, \theta, \phi)^* \hat{L}^2 \psi(r, \theta, \phi) \\ &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \left[\frac{2}{3} Y_1^1(\theta, \phi)^* \hat{L}^2 Y_1^1(\theta, \phi) + \frac{1}{3} Y_1^0(\theta, \phi)^* \hat{L}^2 Y_1^0(\theta, \phi) \right] \\ &= \frac{2}{3} 2\hbar^2 + \frac{1}{3} 2\hbar^2 = 2\hbar^2. \end{aligned} \quad (174)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{L}_z \rangle &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{+\infty} dr r^2 \psi(r, \theta, \phi)^* \hat{L}_z \psi(r, \theta, \phi) \\ &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \left[\frac{2}{3} Y_1^1(\theta, \phi)^* \hat{L}_z Y_1^1(\theta, \phi) + \frac{1}{3} Y_1^0(\theta, \phi)^* \hat{L}_z Y_1^0(\theta, \phi) \right] \\ &= \frac{2}{3} \hbar + \frac{1}{3} 0 = \frac{2}{3} \hbar. \end{aligned} \quad (175)$$

La probabilità di ciascun autovalore è data dal loro “peso” nel calcolo del valor medio e quindi si ha che $L^2 = 2\hbar^2$ con $P = 1$, mentre $L_z = 0$ con $P = 1/3$ e $L_z = \hbar$ con $P = 2/3$.

Dall'Esercizio 21 sappiamo che $[\hat{H}_0, \hat{L}_z] = 0$ se \hat{H}_0 è un'hamiltoniana con potenziale centrale. Ricordando che \hat{L}^2 e \hat{L}_z commutano, abbiamo che tali grandezze sono costanti del moto e quindi la misura ad un generico t ha la stessa probabilità come a $t = 0$.

25 Funzione d'onda e armoniche sferiche /2

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

$$\psi(\vec{r}) = A \frac{x + y + 2z}{r} e^{-\alpha r} \quad \text{con} \quad A \in \mathbb{C}, \alpha \in \mathbb{R}^+. \quad (176)$$

- Determinare la costante A .
- Calcolare i possibili risultati di una misura di L_z e L^2 della particella, la probabilità di tali risultati e il valore medio delle due osservabili.

Ricordando:

$$Y_0^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}, \quad Y_1^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_1^{\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi} \quad (177)$$

(*Quantum Mechanics in Three Dimensions*)

Soluzione

Ricordando le relazioni tra coordinate cartesiane e sferiche, la funzione d'onda si scrive come:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= A (\sin \theta \cos \phi + \sin \theta \sin \phi + 2 \cos \theta) e^{-\alpha r} \\ &= \sqrt{\frac{4\pi}{3}} A e^{-\alpha r} \left(\frac{i-1}{\sqrt{2}} Y_1^1 + \frac{i+1}{\sqrt{2}} Y_1^{-1} + 2 Y_1^0 \right). \end{aligned} \quad (178)$$

Determiniamo A richiedendo che Ψ sia opportunamente normalizzata:

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{+\infty} dr r^2 |\psi(r, \theta, \phi)|^2 = \frac{4\pi |A|^2}{3} (1 + 1 + 4) \underbrace{\int_0^{+\infty} dr r^2 e^{-2\alpha r}}_{2/(8\alpha^3)} \\ &= \frac{2\pi}{\alpha^3} |A|^2 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{\alpha^3}{2\pi}}. \end{aligned} \quad (179)$$

Prendendo il modulo quadro dei coefficienti che moltiplicano le armoniche sferiche in Eq. 178 e dividendo per la loro somma, si può facilmente derivare che $|c_{11}|^2 = 1/6$, $|c_{1-1}|^2 = 1/6$ e $|c_{10}|^2 = 2/3$. Questi corrispondono alle probabilità di ottenere, rispettivamente \hbar , $-\hbar$ e 0 nella misura di L_z . Il suo valor medio è dato da $\langle \hat{L}_z \rangle = \hbar/6 - \hbar/6 + 0 \times 2/3 = 0$. Per quanto riguarda L^2 si ha invece $2\hbar^2$ con probabilità uguale a 1.

26 Potenziale sferico

La funzione d'onda di una particella in un potenziale sferico è descritta da:

$$\psi(\vec{r}) = (x + y + 3z) f(r) \quad . \quad (180)$$

- a) E' un autostato di \vec{L}^2 ?
 b) Calcolare i possibili risultati di una misura di L_z e \vec{L}^2 della particella, la probabilità di tali risultati e il valore medio delle due osservabili.

(Quantum Mechanics in Three Dimensions) GS4.3

Soluzione

Utilizzando le prime armoniche sferiche e ricordando le relazioni tra coordinate cartesiane e sferiche:

$$x = r \sin \theta \cos \phi, \quad y = r \sin \theta \sin \phi, \quad z = r \cos \theta, \quad (181)$$

possiamo riscrivere:

$$x = \sqrt{\frac{2\pi}{3}} r [Y_1^{-1}(\theta, \phi) - Y_1^1(\theta, \phi)], \quad y = \sqrt{\frac{2\pi}{3}} i r [Y_1^{-1}(\theta, \phi) + Y_1^1(\theta, \phi)], \quad z = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_1^0(\theta, \phi). \quad (182)$$

La funzione d'onda in termini di armoniche sferiche diventa dunque:

$$\psi(\vec{r}) = (x + y + 3z) f(r) = \sqrt{\frac{2\pi}{3}} \left[3\sqrt{2} Y_1^0(\theta, \phi) + (i-1) Y_1^1(\theta, \phi) + (i+1) Y_1^{-1}(\theta, \phi) \right] r f(r) \quad (183)$$

Ricordiamo che le armoniche sferiche sono autofunzioni di \hat{L}^2 e \hat{L}_z , $\hat{L}^2 Y_\ell^m = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_\ell^m$ e $\hat{L}_z Y_\ell^m = \hbar m Y_\ell^m$. Essendo presenti solo armoniche sferiche con $\ell = 1$, ψ è un autostato di \vec{L}^2 e la sua misura fornisce $2\hbar^2$ con probabilità 1. I possibili risultati di una misura di L_z sono invece $L_z = 0, \hbar, -\hbar$ corrispondenti a $m = 0, +1, -1$. La probabilità è

data dal “peso” relativo di ciascuna armonica, ossia:

$$\begin{aligned}
 P_{m=0} &= \frac{(3\sqrt{2})^2}{(3\sqrt{2})^2 + (i-1)(-i-1) + (i+1)(-i+1)} = \frac{9}{11} \\
 P_{m=1} &= \frac{(i-1)(-i-1)}{22} = \frac{1}{11} \quad , \quad P_{m=-1} = \frac{(i+1)(-i+1)}{22} = \frac{1}{11} .
 \end{aligned} \tag{184}$$

Il valor medio si ottiene attraverso la media pesata:

$$\langle L_z \rangle = \frac{9}{11} 0 + \frac{1}{11} \hbar + \frac{1}{11} (-\hbar) = 0 . \tag{185}$$

27 Particella in 3D

Lo stato di una particella di massa m in tre dimensioni è descritto dalla funzione d’onda

$$\psi(\vec{r}) = A x f(x^2 + y^2 + z^2) \quad \text{con} \quad A \in \mathbb{C} . \tag{186}$$

a) Quali condizioni devo imporre su f affinché Eq. (186) possa essere interpretata come una funzione d’onda?

b) Calcolare i possibili risultati di una misura di L_z e \vec{L}^2 della particella, la probabilità di tali risultati e il valore medio delle due osservabili.

c) Se si effettua una misura di \vec{L}^2 , quale sarà la funzione d’onda immediatamente dopo la misura?

d) Se il sistema è soggetto all’hamiltoniana $\hat{H} = a \hat{L}_z^2$ (dove a è una costante reale opportunamente dimensionata), assumendo che al tempo $t = 0$ la funzione d’onda sia $\psi(\vec{r})$ determinare $\psi(\vec{r}, t)$ a tempi $t > 0$. Come cambiano le risposte di cui al punto b) per un tempo $t > 0$?

(Quantum Mechanics in Three Dimensions) GS4.3

Soluzione

Introduciamo coordinate sferiche (da cui $x = r \sin \theta \cos \phi$) e riscriviamo la funzione d’onda in termini di armoniche sferiche:

$$\psi(r, \theta, \phi) = A r \sin \theta \cos \phi f(r^2) = A r f(r^2) \sqrt{\frac{8\pi}{3}} \frac{1}{2} (-Y_1^1 + Y_1^{-1}) . \tag{187}$$

Dalla richiesta di normalizzazione della funzione d’onda ricaviamo la condizione da imporre su f :

$$1 = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{+\infty} dr r^2 |\psi(r, \theta, \phi)|^2 \Rightarrow A^2 \frac{4\pi}{3} \int_0^{+\infty} dr r^4 |f(r)|^2 = 1 . \tag{188}$$

Avendo riscritto la funzione d'onda come combinazione di armoniche sferiche, le quali sono autofunzioni di \hat{L}^2 e \hat{L}_z , con $\hat{L}^2 Y_\ell^m = \hbar^2 \ell(\ell + 1) Y_\ell^m$ e $\hat{L}_z Y_\ell^m = \hbar m Y_\ell^m$, possiamo facilmente determinare i possibili risultati di una misura e le relative probabilità. Si ha $\vec{L}^2 = 2\hbar^2$, con probabilità uguale a 1 e quindi $\langle \hat{L}^2 \rangle = 2\hbar^2$, mentre $L_z = +\hbar$ o $L_z = -\hbar$, entrambi con probabilità pari a 1/2 e $\langle \hat{L}_z \rangle = 0$.

Effettuando una misura di \vec{L}^2 , la funzione d'onda non cambia essendo un autostato di \hat{L}^2 .

Dall'espressione dell'operatore Hamiltoniano ricaviamo $\hat{H} Y_1^1 = a\hbar^2 Y_1^1$ e $\hat{H} Y_1^{-1} = a\hbar^2 Y_1^{-1}$; quindi Eq. (187) a $t > 0$ diventa:

$$\psi(r, \theta, \phi, t) = A r f(r^2) \sqrt{\frac{2\pi}{3}} (-Y_1^1 + Y_1^{-1}) e^{-i a \hbar t}. \quad (189)$$

L'operatore \hat{H} commuta sia con \hat{L}^2 sia con \hat{L}_z , per cui le risposte al punto b) non variano.

28 Molecola

Considerare l'energia potenziale di una molecola di massa m descritta da:

$$V(r) = -2V_0 \left(\frac{a}{r} - \frac{a^2}{2r^2} \right), \quad (190)$$

dove a è una scala tipica della molecola e V_0 fornisce la normalizzazione dell'energia potenziale. Determinare i livelli energetici della molecola con l'assunzione $V_0 \gg \frac{\hbar^2}{2ma}$

(Quantum Mechanics in Three Dimensions)

Soluzione

Siamo in un caso di potenziale radiale. L'equazione di Schrödinger è quindi separabile e la parte radiale è data da:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{du^2} + \left[V + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} \right] u = E u, \quad (191)$$

dove abbiamo introdotto $u(r) = r R(r)$ con la parte radiale della funzione d'onda definita da $\psi(r, \theta, \phi) = R(r) Y(\theta, \phi)$. Nel caso del problema considerato si ha:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{du^2} + \left[\frac{-2V_0 a}{r} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\gamma^2 + \ell(\ell + 1)}{r^2} \right] u = E u, \quad (192)$$

avendo introdotto $\gamma^2 = 2V_0 m a^2 / \hbar^2$ (notare che l'assunzione presente nel testo implica $\gamma \gg 1$).

Nel caso dell'atomo di idrogeno si ha:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{du^2} + \left[\frac{-\tilde{k}}{r} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] u = E u, \quad (193)$$

con $\tilde{k} = e^2/(4\pi\epsilon_0)$. E' chiaro che definendo $\tilde{k}' = 2V_0 a$ e $\ell' = \sqrt{\gamma^2 + (\ell + 1/2)^2} - 1/2$ l'Eq. 192 diventa

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{du^2} + \left[\frac{-\tilde{k}'}{r} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell'(\ell'+1)}{r^2} \right] u = E u \quad (194)$$

e possiamo utilizzare la soluzione relativa all'atomo di idrogeno vista a lezione. I livelli energetici sono quindi:

$$E_n = -\frac{m \tilde{k}'^2}{2\hbar^2 n^2} = -V_0 \frac{\gamma^2}{n^2}. \quad (195)$$

Ricordando la derivazione della soluzione dell'equazione radiale dell'atomo di idrogeno si deve imporre la condizione $n \geq \ell' + 1$ (affinchè la serie si tronchi e non diverga). Scriviamo tale relazione come $n = \ell' + 1 + n_r$, dove n_r è un intero positivo. L'energia può essere quindi scritta come:

$$\begin{aligned} E_n &= -V_0 \frac{\gamma^2}{\left[\sqrt{\gamma^2 + (\ell + 1/2)^2} + 1/2 + n_r \right]^2} = -\frac{V_0}{\left[\sqrt{1 + (\ell + 1/2)^2 \gamma^{-2}} + (1/2 + n_r)/\gamma \right]^2} \\ &\simeq -V_0 \left[1 - 2 \frac{n_r + 1/2}{\gamma} - \frac{(\ell + 1/2)^2}{\gamma^2} + 3 \frac{(n_r + 1/2)^2}{\gamma^2} \right] \end{aligned} \quad (196)$$

Nel passaggio tra la prima e la seconda riga si è utilizzato lo sviluppo in serie di Taylor (fino al second'ordine) in $1/\gamma$. Il termine rappresenta il valore del minimo del potenziale. Il secondo termine è proporzionale a V_0/γ che può essere riscritto come $\hbar\omega$ cioè come un oscillatore armonico intorno al minimo e rappresenta un termine vibrazionale di pulsazione $\sqrt{\frac{2V_0}{m a^2}}$. Il terzo e quarto termine rappresentano l'energia rotazionale proporzionale a $V_0/\gamma^2 = \hbar/(2I)$, dove $I = m a^2$ è il momento d'inerzia della molecola.

29 Atomo di idrogeno /1

Dello stato di un atomo di idrogeno si sa che, effettuando una misura dell'energia, si ha probabilità $1/3$ di trovare il valore E_1 , corrispondente allo stato fondamentale, e probabilità $2/3$ di trovare il valore E_2 , corrispondente al primo stato eccitato. Inoltre, operando una misura di momento angolare, le probabilità di trovare per la terza componente i valori $+\hbar$

e $-\hbar$ sono uguali ad $1/3$ in entrambi i casi.

- 1) Determinare la funzione d'onda che descrive lo stato di questo sistema in termini delle autofunzioni dell'atomo d'idrogeno.
- 2) Quali sono i valori permessi per il numero quantico azimutale ℓ relativo a questo stato e quali sono le probabilità associate a questi valori?
- 3) Si tratta di uno stato a parità definita?
- 4) Quanto vale il valor medio dell'energia di questo sistema ad un generico istante $t > 0$?

(*Quantum Mechanics in Three Dimensions*)

Soluzione

Ricordiamo che per le autofunzioni dell'atomo di idrogeno vale $\hat{H} \psi_{nlm} = E_n \psi_{nlm}$ e $\hat{L}_z \psi_{nlm} = m\hbar \psi_{nlm}$ e che possiamo espandere la funzione d'onda dello stato in questione come $\psi = \sum_{nlm} c_{nlm} \psi_{nlm}$, tenendo conto che $0 \leq \ell \leq n - 1$ e $-\ell \leq m \leq \ell$. Dal testo del problema abbiamo $n \leq 2$ e dunque:

$$\psi = c_{100} \psi_{100} + c_{200} \psi_{200} + c_{210} \psi_{210} + c_{211} \psi_{211} + c_{21-1} \psi_{21-1} \quad (197)$$

Siccome si ha probabilità $1/3$ di trovare il valore E_1 , dobbiamo avere $|c_{100}|^2 = 1/3$. Probabilità di $1/3$ di trovare la terza componente uguale a $+\hbar$ e $-\hbar$ implica $|c_{211}|^2 = 1/3$ e $|c_{21-1}|^2 = 1/3$. Inoltre la somma in quadratura dei coefficienti degli stati corrispondenti a $n = 2$ deve dare $2/3$, da cui è immediato vedere $|c_{200}|^2 = 0$ e $|c_{210}|^2 = 0$. Si ha quindi:

$$\begin{aligned} c_{100} &= \sqrt{\frac{1}{3}}, \quad c_{211} = \sqrt{\frac{1}{3}} e^{i\alpha}, \quad c_{21-1} = \sqrt{\frac{1}{3}} e^{i\beta} \\ \psi &= \sqrt{\frac{1}{3}} \left(\psi_{100} + e^{i\alpha} \psi_{211} + e^{i\beta} \psi_{21-1} \right), \end{aligned} \quad (198)$$

dove abbiamo scelto di porre uguale a zero la fase relativa al coefficiente c_{100} . I valori permessi per il numero quantico azimutale ℓ sono $\ell = 0$ con probabilità $P_{\ell=0} = |c_{100}|^2 = 1/3$ e $\ell = 1$ con probabilità $P_{\ell=1} = |c_{211}|^2 + |c_{21-1}|^2 = 2/3$. Lo stato non ha parità definita in quanto ψ_{100} è pari (ℓ pari), mentre ψ_{211} e ψ_{21-1} sono dispari (ℓ dispari). L'energia è una costante del moto e il suo valor medio vale $\langle E \rangle = \frac{1}{3} E_1 + \frac{2}{3} E_2$, per qualsiasi t .

30 Atomo di idrogeno /2

Di un atomo di idrogeno si sa che:

- a) è in uno stato con $n = 2$,
- b) lo stato contiene solo autostati di L_z relativi agli autovalori $+\hbar$ e $-\hbar$,

- c) il valore di aspettazione di L_z è zero,
d) la probabilità di trovare l'elettrone nel primo quadrante del piano xy è del 25%.
Scrivere le possibili funzioni d'onda.

(*Quantum Mechanics in Three Dimensions*)

Soluzione

Considerando che $0 \leq \ell \leq n - 1$ e $-\ell \leq m \leq \ell$ dalle prime due condizioni ricaviamo $n = 2$, $\ell = 1$ e $m = \pm 1$, cioè $\psi = c_{211}\psi_{211} + c_{21-1}\psi_{21-1}$. Ricordando $\hat{L}_z \psi_{n\ell m} = m\hbar \psi_{n\ell m}$, calcoliamo il valore di aspettazione di L_z :

$$\langle L_z \rangle = |c_{211}|^2 \hbar - |c_{21-1}|^2 \hbar = 0 \Rightarrow |c_{211}| = |c_{21-1}|. \quad (199)$$

Dalla normalizzazione della funzione d'onda $\int dV |\psi|^2 = 1$:

$$\begin{aligned} |c_{211}|^2 + |c_{21-1}|^2 &= 1 \Rightarrow c_{211} = \sqrt{\frac{1}{2}}, c_{21-1} = \sqrt{\frac{1}{2}} e^{i\alpha} \\ \psi &= \sqrt{\frac{1}{2}} (\psi_{211} + e^{i\alpha} \psi_{21-1}). \end{aligned} \quad (200)$$

Per fissare α dobbiamo ricorrere all'ultima condizione ossia richiedere che l'integrale di $|\psi|^2$ limitato al primo quadrante (cioè $0 \leq \phi \leq \pi/2$) valga 1/4:

$$\begin{aligned} P(0 \leq \phi \leq \pi/2) &= \int_0^{\pi/2} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{+\infty} dr r^2 |\psi(r, \theta, \phi)|^2 \\ &= \frac{1}{2} \int_0^{\pi/2} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta |Y_1^1(\theta, \phi) + e^{i\alpha} Y_1^{-1}(\theta, \phi)|^2 \underbrace{\int_0^{+\infty} dr r^2 [R_{21}(r)]^2}_1 \\ &= \frac{1}{2} \int_0^{\pi/2} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta | -e^{i\phi} + e^{i\alpha} e^{-i\phi} |^2 \\ &= \frac{3}{16\pi} \underbrace{\int_{-1}^1 d(\cos \theta) (1 - \cos^2 \theta)}_{2-2/3=4/3} \int_0^{\pi/2} d\phi | -e^{i\phi} + e^{i\alpha} e^{-i\phi} |^2 \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_0^{\pi/2} d\phi (1 + 1 - e^{-i(2\phi-\alpha)} - e^{i(2\phi-\alpha)}) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi/2} d\phi [1 - \cos(2\phi - \alpha)] \\ &= \frac{1}{2\pi} \left(\frac{\pi}{2} - \sin \alpha \right) = \frac{1}{4} - \frac{1}{2\pi} \sin \alpha \\ P(0 \leq \phi \leq \pi/2) &= \frac{1}{4} \Rightarrow \sin \alpha = 0 \Rightarrow \alpha = n\pi \Rightarrow e^{i\alpha} = \pm 1. \end{aligned} \quad (201)$$

Abbiamo quindi due possibilità che soddisfano tutte le condizioni, ossia:

$$\psi = \sqrt{\frac{1}{2}}(\psi_{211} + \psi_{21-1}) \quad \text{e} \quad \psi = \sqrt{\frac{1}{2}}(\psi_{211} - \psi_{21-1}) . \quad (202)$$

31 Atomo di idrogeno /3

Considerare un atomo di idrogeno con funzione d'onda a $t = 0$, data da:

$$\Psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{211} + \psi_{21-1}) , \quad (203)$$

dove $\psi_{n\ell m}$ indica uno stato stazionario.

- Scrivere esplicitamente $\Psi(\vec{r}, t)$ nella forma più compatta possibile
- Calcolare il valore d'aspettazione dell'energia potenziale (anche numericamente).
- Determinare il valore d'aspettazione di H , L^2 e L_z (anche numericamente).

(*Quantum Mechanics in Three Dimensions*) GS4.18

Soluzione

Dall'espressione degli stati stazionari ψ_{211} e ψ_{21-1} :

$$\psi_{21\pm 1} = R_{21}(r) Y_1^{\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \frac{1}{\sqrt{6}a} \frac{r}{2a^2} e^{-\frac{r}{2a}} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi} , \quad (204)$$

ricaviamo

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{211} e^{-iE_2 t/\hbar} + \psi_{21-1} e^{-iE_2 t/\hbar}) = -\frac{1}{\sqrt{2}\pi a} \frac{r}{8a^2} e^{-\frac{r}{2a}} \sin \theta (e^{i\phi} - e^{-i\phi}) e^{-iE_2 t/\hbar} \\ &= -\frac{i}{\sqrt{2}\pi a} \frac{r}{4a^2} e^{-\frac{r}{2a}} \sin \theta \sin \phi e^{-iE_2 t/\hbar} . \end{aligned} \quad (205)$$

L'energia potenziale dell'elettrone può essere espressa attraverso $V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{\hbar^2}{m a r}$, dove a è il raggio di Bohr. Il suo valor medio è dato da:

$$\begin{aligned} \langle V \rangle &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{+\infty} dr r^2 |\Psi(r, \theta, \phi)|^2 \left(-\frac{\hbar^2}{m a r} \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{32\pi m a^6} \underbrace{\int_0^{2\pi} \sin^2 \phi d\phi}_\pi \underbrace{\int_0^\pi d\theta \sin^3 \theta}_{4/3} \underbrace{\int_0^{+\infty} dr r^3 e^{-r/a}}_{3! a^4} = -\frac{\hbar^2}{4 m a^2} \\ &= \frac{E_1}{2} = \frac{13.6 \text{ eV}}{2} = -6.8 \text{ eV} . \end{aligned} \quad (206)$$

Notare che non dipende dal tempo.

Siccome la funzione d'onda è una sovrapposizione di stati con $n = 2$, il valore di aspettazione di \hat{H} è $E_2 = E_1/4 = -3.4$ eV. Anche nel caso di L^2 abbiamo un unico possibile valore, corrispondente a $\ell = 1$, cioè $\langle \hat{L}^2 \rangle = 2\hbar^2 \simeq 2 \times 10^{-68}$ m² kg/s. Il valor medio di \hat{L}_z è dato da $\langle \hat{L}_z \rangle = \frac{1}{2}(\hbar - \hbar) = 0$, avendo usato $\hat{L}_z \psi_{nlm} = m\hbar \psi_{nlm}$.

32 Atomo di idrogeno /4 (esercizio per casa)

La funzione d'onda dello stato fondamentale dell'atomo d'idrogeno è:

$$\psi_{100} = \sqrt{\frac{1}{\pi r_0^3}} e^{-r/r_0} . \quad (207)$$

- Determinare a quale distanza dal nucleo la densità di probabilità di trovare l'elettrone è massima.
- Determinare il valore d'aspettazione della distanza dell'elettrone dal nucleo.
- Calcolare lo scarto quadratico medio della distribuzione.

(Quantum Mechanics in Three Dimensions) GS4.15

Soluzione

Il massimo richiesto si ha in $r = r_0$ ($r = 0$ corrisponde ad un minimo).

Il valor medio della distanza radiale é $\langle r \rangle = 3/2 r_0$. Il valor medio del quadrato della distanza radiale é $\langle r^2 \rangle = 3 r_0^2$, da cui $\sigma_r = \sqrt{3/4} r_0$.

33 Atomo di idrogeno /5

Considerare un atomo di idrogeno con funzione d'onda a $t = 0$, data da:

$$\Psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{10}} \left(2\psi_{100} + \psi_{210} + \sqrt{2}\psi_{211} + \sqrt{3}\psi_{21-1} \right) , \quad (208)$$

dove ψ_{nlm} indica uno stato stazionario.

- Qual è il valore di aspettazione dell'energia per questo sistema?
- Determinare $\Psi(\vec{r}, t)$.
- Qual è la probabilità di trovare il sistema con $\ell = 1$ e $m = +1$ in funzione del tempo?
- Supponiamo di effettuare una misura da cui otteniamo $\vec{L}^2 = 2\hbar^2$ e $L_x = +\hbar$. Descrivere la funzione d'onda nell'istante immediatamente successivo alla misura.

(Quantum Mechanics in Three Dimensions)

Soluzione

Essendo la funzione d'onda in Eq. 208 espressa in termini di autostati dell'operatore hamiltoniano $\hat{H} \psi_{nlm} = E_n \psi_{nlm}$, possiamo scrivere il valore di aspettazione come:

$$\langle E \rangle = \frac{1}{10} (4 E_1 + E_2 + 2 E_2 + 3 E_2) = \frac{1}{10} (4 E_1 + 6 E_2) = \frac{11}{20} E_1 = -7.5 \text{ eV} , \quad (209)$$

con $E_n = -13.6/n^2 \text{ eV}$.

L'evoluzione temporale è fornita da:

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{-i \hat{H} t/\hbar} \Psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{10}} \left[2 e^{-i E_1 t/\hbar} \psi_{100} + e^{-i E_2 t/\hbar} (\psi_{210} + \sqrt{2} \psi_{211} + \sqrt{3} \psi_{21-1}) \right] \quad (210)$$

Calcoliamo ora la probabilità di trovare il sistema con $\ell = 1$ e $m = +1$ (mentre n può in linea di principio essere generico, con $n > 1$, anche se nel caso specifico non si hanno componenti con $n > 2$):

$$P_{n11} = |\langle \psi_{n11} | \Psi \rangle|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{10}} e^{-i E_2 t/\hbar} \sqrt{2} \langle \psi_{211} | \psi_{211} \rangle \right|^2 = \frac{1}{5} , \quad (211)$$

indipendente dal tempo.

Dalla richiesta $\vec{L}^2 = 2 \hbar^2$ si ha $\psi' = (c_0 \psi_{210} + c_1 \psi_{211} + c_{-1} \psi_{21-1})$.

Ricordando

$$\hat{L}_x = \frac{\hat{L}_+ + \hat{L}_-}{2} , \quad \hat{L}_\pm |\ell, m\rangle = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m \pm 1)} |\ell, m \pm 1\rangle . \quad (212)$$

si può determinare l'azione dell'operatore \hat{L}_x sulla funzione d'onda:

$$\frac{\hat{L}_+ + \hat{L}_-}{2} (c_0 \psi_{210} + c_1 \psi_{211} + c_{-1} \psi_{21-1}) = \frac{\hbar}{2} \left[\sqrt{2} c_0 (\psi_{211} + \psi_{21-1}) + \sqrt{2} (c_1 + c_{-1}) \psi_{210} \right] \quad (213)$$

Imponendo $\hat{L}_x \psi' = +\hbar \psi'$ si ottiene $c_1 = c_{-1} = c_0/\sqrt{2}$. Quindi la funzione d'onda immediatamente dopo la misura è $\psi' = c_0/\sqrt{2} (\sqrt{2} \psi_{210} + \psi_{211} + \psi_{21-1})$. Possiamo fissare c_0 attraverso l'usuale normalizzazione della funzione d'onda $\langle \psi' | \psi' \rangle = 1$, da cui:

$$\psi' = \frac{1}{2} \left(\sqrt{2} \psi_{210} + \psi_{211} + \psi_{21-1} \right) . \quad (214)$$

34 Operatore momento angolare

Si consideri un sistema quantistico descritto dall'operatore Hamiltoniano:

$$H_0 = A \vec{L}^2 + B L_z \quad (215)$$

dove \vec{L}^2 è il quadrato dell'operatore di momento angolare orbitale ed L_z la sua terza componente, mentre A e B sono costanti positive opportunamente dimensionate.

a) Si determinino lo spettro degli autovalori di H_0 ed i corrispondenti autostati. Sono degeneri?

b) Supponendo che il sistema venga perturbato da un termine $H' = \epsilon L_x^2$, si calcolino le correzioni indotte dalla perturbazione ai livelli energetici per fissato ℓ al primo ordine perturbativo.

c) Scrivere la formula per la correzione al second'ordine. Senza fare calcoli, il livello $\ell = 0$ viene spostato?

(*Quantum Mechanics in Three Dimensions*)

Soluzione

Sappiamo che le armoniche sferiche $|\ell, m\rangle$ sono autofunzioni \hat{L}^2 e \hat{L}_z e quindi possiamo scrivere:

$$\begin{aligned} \hat{H}^0 |\ell, m\rangle &= A \hat{L}^2 |\ell, m\rangle + B \hat{L}_z |\ell, m\rangle = \hbar^2 A \ell(\ell+1) |\ell, m\rangle + \hbar B m |\ell, m\rangle \\ &= [\hbar^2 A \ell(\ell+1) + \hbar B m] |\ell, m\rangle = E_{\ell, m}^0 |\ell, m\rangle . \end{aligned} \quad (216)$$

Lo spettro energetico non è degenero, perchè $E_{\ell, m}^0$ assume valori sempre diversi al variare di ℓ e m .

Per calcolare le correzioni legate al termine $\hat{H}' = \epsilon \hat{L}_x^2$ ricordiamo:

$$\hat{L}_x = \frac{\hat{L}_+ + \hat{L}_-}{2} , \quad \hat{L}_{\pm} |\ell, m\rangle = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m \pm 1)} |\ell, m \pm 1\rangle . \quad (217)$$

Si ha quindi $\hat{L}_x^2 = (\hat{L}_+^2 + \hat{L}_-^2 + \hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_- \hat{L}_+)/4$. Al prim'ordine perturbativo, la correzione è data da $E_{\ell m}^1 = \langle \ell, m | \hat{H}' | \ell, m \rangle$. Notando che $\langle \ell, m | \hat{L}_{\pm}^2 | \ell, m \rangle = 0$, si ha:

$$\begin{aligned} E_{\ell m}^1 &= \langle \ell, m | \hat{H}' | \ell, m \rangle = \frac{\epsilon}{4} [\langle \ell, m | \hat{L}_+ \hat{L}_- | \ell, m \rangle + \langle \ell, m | \hat{L}_- \hat{L}_+ | \ell, m \rangle] \\ &= \frac{\hbar^2 \epsilon}{4} [\ell(\ell+1) - m(m-1) + \ell(\ell+1) - m(m+1)] = \frac{\hbar^2 \epsilon}{2} [\ell(\ell+1) - m^2] . \end{aligned} \quad (218)$$

Andando al second'ordine, la correzione al livello $E_{\ell m}$ è:

$$E_{\ell m}^2 = \sum_{m' \neq m} \frac{|\langle \ell m' | \hat{H}' | \ell m \rangle|^2}{E_{\ell m}^0 - E_{\ell m'}^0} = \epsilon^2 \sum_{m' \neq m} \frac{|\langle \ell m' | \hat{L}_x^2 | \ell m \rangle|^2}{E_{\ell m}^0 - E_{\ell m'}^0} \quad (219)$$

Il livello $\ell = 0$ non viene spostato, in quanto è ammesso un solo valore di m cioè $m = 0$.

35 Precessione di spin

Un elettrone in un campo magnetico omogeneo diretto lungo l'asse x è soggetto all'Hamiltoniana

$$H = -\gamma B_0 S_x.$$

Nella base in cui S_z è diagonale, se all'istante $t = 0$ il suo spin è up, dopo quanto tempo si trova per la prima volta in uno stato di spin down?

Soluzione

Ricordando che gli autostati di S_z e S_x sono:

$$\chi_+^{(z)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \chi_-^{(z)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \chi_+^{(x)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \chi_-^{(x)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad (220)$$

possiamo scrivere lo stato iniziale come $\chi(0) = \chi_+^{(z)} = (\chi_+^{(x)} + \chi_-^{(x)})/\sqrt{2}$. Sappiamo inoltre che $S_x \chi_+^{(x)} = +(\hbar/2) \chi_+^{(x)}$ e $S_x \chi_-^{(x)} = -(\hbar/2) \chi_-^{(x)}$. Possiamo dunque ricavare:

$$\begin{aligned} \chi(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{i\gamma B_0 S_x t/\hbar} \chi_+^{(x)} + e^{i\gamma B_0 S_x t/\hbar} \chi_-^{(x)} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{i\gamma B_0 t/2} \chi_+^{(x)} + e^{-i\gamma B_0 t/2} \chi_-^{(x)} \right) \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{i\gamma B_0 t/2} + e^{-i\gamma B_0 t/2} \\ e^{i\gamma B_0 t/2} - e^{-i\gamma B_0 t/2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\gamma B_0 t/2) \\ i \sin(\gamma B_0 t/2) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (221)$$

Per ottenere $\chi(t) = \chi_-^{(z)}$ (a meno di una fase) devo imporre $\cos(\gamma B_0 t/2) = 0$, cioè $\gamma B_0 t_1/2 = \pi/2$. Si ha quindi $t_1 = \pi/(\gamma B_0)$.

36 Degenerazione spettro particella libera

Considerare l'hamiltoniana di una particella libera in una dimensione $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m)$.

- E' simmetrica per traslazioni ed inversioni di parità? Perché?
- Mostrare che gli operatori traslazione e inversione di parità non commutano.
- Considerare le autofunzioni di \hat{H} e impulso e derivare l'effetto su di esse dell'azione dell'operatore parità. Ciò implica una degenerazione nello spettro energetico della particella? Perché?
- Considerare le autofunzioni di \hat{H} e operatore parità e derivare l'effetto su di esse dell'azione dell'operatore impulso. Ciò implica una degenerazione nello spettro energetico della particella? Perché?

(Symmetries and Conservation Laws) GS6.18

Soluzione

E' immediato vedere che l'hamiltoniana è simmetrica per traslazioni ed inversioni di parità, in quanto \hat{p}^2 commuta con \hat{p} (generatore traslazioni, e quindi con \hat{T}) e $\hat{\Pi}$ (operatore parità). Calcoliamo il commutatore degli operatori traslazione e inversione di parità, applicato ad una funzione test:

$$\begin{aligned} [\hat{\Pi}, \hat{T}] \psi(x) &= \hat{\Pi} \hat{T} \psi(x) - \hat{T} \hat{\Pi} \psi(x) = \hat{\Pi} \psi(x-a) - \hat{T} \psi(-x) = \psi(-x-a) - \psi(-(x-a)) \\ &= \psi(-x-a) - \psi(-x+a). \end{aligned} \quad (222)$$

Quindi i due operatori non commutano.

Le autofunzioni di (simultaneamente) \hat{H} e \hat{p} sono:

$$\psi_p(x) = \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \Rightarrow \hat{\Pi} \psi_p(x) = \psi_{-p}(x). \quad (223)$$

L'operatore parità trasforma quindi ψ_p in uno stato differente ψ_{-p} che però deve avere la stessa energia (in quanto $[\hat{H}, \hat{\Pi}] = 0$), quindi implica una degenerazione nello spettro energetico della particella.

Le autofunzioni di (simultaneamente) \hat{H} e $\hat{\Pi}$ sono:

$$\psi_+(x) = \frac{\cos(px/\hbar)}{\sqrt{\pi\hbar}} \quad \text{e} \quad \psi_-(x) = \frac{\sin(px/\hbar)}{\sqrt{\pi\hbar}}. \quad (224)$$

Sotto l'azione dell'operatore delle traslazioni trasformano come:

$$\begin{aligned} \hat{T} \psi_+(x) &= \hat{T} \frac{\cos(px/\hbar)}{\sqrt{\pi\hbar}} = \frac{\cos(p(x-a)/\hbar)}{\sqrt{\pi\hbar}} = \cos(pa/\hbar) \frac{\cos(px/\hbar)}{\sqrt{\pi\hbar}} + \sin(pa/\hbar) \frac{\sin(px/\hbar)}{\sqrt{\pi\hbar}} \\ &= \cos(pa/\hbar) \psi_+(x) + \sin(pa/\hbar) \psi_-(x) \\ \hat{T} \psi_-(x) &= \hat{T} \frac{\sin(px/\hbar)}{\sqrt{\pi\hbar}} = \frac{\sin(p(x-a)/\hbar)}{\sqrt{\pi\hbar}} = \cos(pa/\hbar) \frac{\sin(px/\hbar)}{\sqrt{\pi\hbar}} - \sin(pa/\hbar) \frac{\cos(px/\hbar)}{\sqrt{\pi\hbar}} \\ &= \cos(pa/\hbar) \psi_-(x) - \sin(pa/\hbar) \psi_+(x) \end{aligned} \quad (225)$$

L'operatore delle traslazioni mischia i due stati ψ_+ e ψ_- che quindi devono avere la stessa energia (in quanto $[\hat{H}, \hat{p}] = 0$).

37 Particella libera e pacchetto d'onde

Calcolare il commutatore $[\hat{x}(0), \hat{x}(t)]$ per una particella libera e dimostrare che il pacchetto d'onde si sparpaglia al trascorrere del tempo.

(Symmetries and Conservation Laws)

Soluzione

In questo problema si usa la rappresentazione di Heisenberg. Per legare $\hat{x}(0)$ e $\hat{x}(t)$ utilizziamo l'equazione del moto in rappresentazione di Heisenberg (notare analogia con teorema di Ehrenfest in rappresentazione di Schrödinger):

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}], \quad (226)$$

dove, per la particella libera si ha $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m)$.

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{i}{\hbar} \left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{x} \right] = \frac{i}{2\hbar m} \left(\underbrace{\hat{p} [\hat{p}, \hat{x}] + [\hat{p}, \hat{x}] \hat{p}}_{-i\hbar} \right) = \frac{\hat{p}}{m} = \frac{\hat{p}_0}{m}, \quad (227)$$

dove abbiamo usato $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ (i due operatori sono da considerare allo stesso tempo t , anche se in questo caso è banale essendo $\hat{p} = \hat{p}_0$) e nell'ultimo passaggio $[\hat{H}, \hat{p}] = 0$, cioè l'operatore impulso non dipende dal tempo. Si ha dunque $\hat{x}(t) = \hat{x}(0) + t\hat{p}_0/m$. Il commutatore tra operatori posizione ad istanti diversi è:

$$[\hat{x}(0), \hat{x}(t)] = [\hat{x}(0), \hat{x}(0) + \frac{\hat{p}_0}{m}t] = \frac{t}{m} [\hat{x}(0), \hat{p}_0] = \frac{i\hbar t}{m}, \quad (228)$$

quindi tali operatori non commutano. Il principio di indeterminazione ci dice che:

$$\sigma_{\hat{x}(0)}^2 \sigma_{\hat{x}(t)}^2 \geq \left(\frac{1}{2i} [\hat{x}(0), \hat{x}(t)] \right)^2 = \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2}. \quad (229)$$

Il prodotto delle indeterminazione cresce quindi al crescere del tempo, ossia anche se il pacchetto è ben localizzato all'istante iniziale (cioè $\sigma_{\hat{x}(0)}$ è piccolo) al trascorrere del tempo si sparpaglia rapidamente.

38 Operatore posizione e oscillatore armonico

Considerare una particella di massa m soggetta all'hamiltoniana unidimensionale:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2}. \quad (230)$$

Determinare l'operatore posizione nella rappresentazione di Heisenberg.

(Symmetries and Conservation Laws) GS6.7

Soluzione

Consideriamo l'azione dell'operatore \hat{x}_H (dove il pedice H, S denota la rappresentazione di Heisenberg/Schrödinger) su uno stato stazionario dell'oscillatore armonico ψ_n , utilizzando la relazione tra la rappresentazione di Heisenberg e quella di Schrödinger e l'espressione di \hat{x}_S in termini di operatori di creazione e distruzione:

$$\begin{aligned}
 \hat{x}_H(t) \psi_n(x) &= \hat{U}^\dagger(t) \hat{x}_S \hat{U}(t) \psi_n(x) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) e^{-i\hat{H}t/\hbar} \psi_n(x) \\
 &= e^{i\hat{H}t/\hbar} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(x) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} e^{-iE_n t/\hbar} e^{i\hat{H}t/\hbar} [\sqrt{n+1} \psi_{n+1}(x) + \sqrt{n} \psi_{n-1}(x)] \\
 &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} e^{-iE_n t/\hbar} [\sqrt{n+1} e^{iE_{n+1} t/\hbar} \psi_{n+1}(x) + \sqrt{n} e^{iE_{n-1} t/\hbar} \psi_{n-1}(x)] \\
 &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [\sqrt{n+1} e^{i\omega t} \psi_{n+1}(x) + \sqrt{n} e^{-i\omega t} \psi_{n-1}(x)] \\
 &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [e^{i\omega t} \hat{a}^\dagger \psi_n(x) + e^{-i\omega t} \hat{a} \psi_n(x)] = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [e^{i\omega t} \hat{a}^\dagger + e^{-i\omega t} \hat{a}] \psi_n(x), \tag{231}
 \end{aligned}$$

da cui

$$\hat{x}_H(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [e^{i\omega t} \hat{a}^\dagger + e^{-i\omega t} \hat{a}]. \tag{232}$$

Scrivendo gli operatori di creazione e distruzione in termini di $\hat{x}_S = \hat{x}_H(0)$ e $\hat{p}_S = \hat{p}_H(0)$ tramite Eq. 95, si ottiene:

$$\hat{x}_H(t) = \hat{x}_H(0) \cos \omega t + \frac{\hat{p}_H(0)}{m\omega} \sin \omega t, \tag{233}$$

ossia l'operatore posizione soddisfa le equazioni del moto classiche.

39 Spinore

Un elettrone si trova in uno stato descritto dallo spinore

$$\chi = A \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{nella base in cui } S_z \text{ è diagonale: } S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{234}$$

- Determinare A .
- Se si effettua una misura di S_z , quali sono le probabilità di trovare “spin su” e “spin giù”?
- Se invece si misura S_x , quali valori si ottengono e con quali sono le probabilità?

d) Quali sono i valori medi di S_z e di S_x calcolati sullo stato χ ?

$$\text{Ricordare che in questa base } S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (235)$$

(*Quantum Mechanics in Three Dimensions*)

Soluzione

Ricordando che gli autostati di S_z sono:

$$\chi_+^{(z)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \chi_-^{(z)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (236)$$

possiamo scrivere $\chi = A(\sqrt{3}\chi_+^{(z)} + \chi_-^{(z)})$ e richiedendo $\chi^\dagger\chi = 1$ si ottiene $A = 1/2$. Dalla decomposizione appena scritta, cioè $\chi = c_+^{(z)}\chi_+^{(z)} + c_-^{(z)}\chi_-^{(z)}$, con $c_+^{(z)} = \sqrt{3}/2$ e $c_-^{(z)} = 1/2$, otteniamo:

$$P(S_z = +\frac{\hbar}{2}) = |c_+^{(z)}|^2 = 3/4 \quad \text{e} \quad P(S_z = -\frac{\hbar}{2}) = |c_-^{(z)}|^2 = 1/4. \quad (237)$$

Dall'espressione di S_x possiamo calcolare gli autovalori e autovettori. Si ottiene $+\hbar/2$ e $-\hbar/2$, con autovettori:

$$\chi_+^{(x)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \chi_-^{(x)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad (238)$$

da cui

$$c_+^{(x)} = (\chi_+^{(x)})^\dagger \chi = \frac{\sqrt{3}+1}{2\sqrt{2}}, \quad c_-^{(x)} = (\chi_-^{(x)})^\dagger \chi = \frac{\sqrt{3}-1}{2\sqrt{2}}. \quad (239)$$

La misura S_x può dare quindi $+\hbar/2$ con probabilità $P(S_x = +\frac{\hbar}{2}) = |c_+^{(x)}|^2 = (\sqrt{3}+1)^2/8 \simeq 0.933$ o $-\hbar/2$ con probabilità $P(S_x = -\frac{\hbar}{2}) = |c_-^{(x)}|^2 = (\sqrt{3}-1)^2/8 \simeq 0.067$. Possiamo ora facilmente calcolare i due valori medi:

$$\langle S_z \rangle = |c_+^{(z)}|^2 \frac{\hbar}{2} - |c_-^{(z)}|^2 \frac{\hbar}{2} = \frac{\hbar}{4}, \quad \langle S_x \rangle = |c_+^{(x)}|^2 \frac{\hbar}{2} - |c_-^{(x)}|^2 \frac{\hbar}{2} = \frac{\sqrt{3}\hbar}{4} \quad (240)$$

40 Spinore/2 (esercizio per casa)

Una particella di spin $1/2$ è descritta dall'hamiltoniana $\hat{H} = A\hat{\sigma}_x$, dove A è una costante opportunamente dimensionata. All'istante $t = 0$ il suo stato di spin è dato da

$$\chi(0) = \frac{\sqrt{3}}{2} \chi_+^{(z)} + \frac{1}{2} \chi_-^{(z)}, \quad (241)$$

dove $\chi_+^{(z)}$ e $\chi_-^{(z)}$ sono gli autostati di S_z .

Determinare lo stato in cui si troverà la particella a $t > 0$, sempre in termini di $\chi_+^{(z)}$ e $\chi_-^{(z)}$.

(Quantum Mechanics in Three Dimensions)

Soluzione

$$\chi(t) = \left[\frac{\sqrt{3}}{2} \cos(At/\hbar) - \frac{1}{2} i \sin(At/\hbar) \right] \chi_+^{(z)} + \left[\frac{1}{2} \cos(At/\hbar) - \frac{\sqrt{3}}{2} i \sin(At/\hbar) \right] \chi_-^{(z)}. \quad (242)$$

41 Spinore/3

Un elettrone si trova in uno stato descritto dallo spinore $\chi = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$, con α e β reali. Il valor medio della terza componente dell'operatore di spin S_z vale $+\hbar/2$.

a) Dopo aver trovato il valore esplicito di α e β , determinare la probabilità di ottenere il valore $+\hbar/2$ se si misura lo spin della particella lungo l'asse x .

b) Se l'elettrone viene immerso in un campo magnetico costante e uniforme, di intensità B diretto lungo x , il sistema sarà descritto dalla Hamiltoniana $H = \mu \vec{B} \cdot \vec{S}$. Immaginando che all'istante $t = 0$ l'elettrone si trovi nello stato determinato nel punto a), trovare lo stato in cui esso si troverà nel generico istante $t > 0$.

(Quantum Mechanics in Three Dimensions)

Soluzione

Come già visto in precedenza, l'autostato di \hat{S}_z con autovalore $+\hbar/2$ è $\chi_+^{(z)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e quindi

$\alpha = 1$ e $\beta = 0$. Ricordiamo che gli autostati di \hat{S}_x sono $\chi_{\pm}^{(x)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}$. Espandendo χ

in questa base, si ha $\chi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_+^{(x)} + \chi_-^{(x)})$. La probabilità di ottenere il valore $+\hbar/2$ se si misura lo spin della particella lungo l'asse x è quindi $P(S_x = +\frac{\hbar}{2}) = |c_+^{(x)}|^2 = 1/2$.

Il campo magnetico può essere scritto in componenti come $\vec{B} = (B, 0, 0)$ e quindi $H = \mu B S_x$, ossia gli autostati dell'hamiltoniana sono proporzionali agli autostati di S_x . Si ha che $\hat{H}\psi = E\psi$ diventa $\hat{H}\chi_{\pm}^{(x)} = E_{\pm}\chi_{\pm}^{(x)} = \mu B \hat{S}_x \chi_{\pm}^{(x)} = \pm\hbar/2 \mu B \chi_{\pm}^{(x)}$ e quindi $E_{\pm} = \pm\hbar \mu B/2$. L'evoluzione temporale degli stati stazionari è data dal termine $e^{-iEt/\hbar}$, da cui:

$$\begin{aligned} \chi(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\chi_+^{(x)}(t) + \chi_-^{(x)}(t) \right] = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\chi_+^{(x)} e^{-iE_+ t/\hbar} + \chi_-^{(x)} e^{-iE_- t/\hbar} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\chi_+^{(x)} e^{-i\mu B t/2} + \chi_-^{(x)} e^{i\mu B t/2} \right) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-i\mu B t/2} + e^{i\mu B t/2} \\ e^{-i\mu B t/2} - e^{i\mu B t/2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos(\mu B t/2) \\ -i \sin(\mu B t/2) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (243)$$

42 Misura di spin

Si effettua una misura di $S_x + S_z$ per una particella di spin $1/2$. Quali sono i possibili risultati della misura? Immediatamente dopo, si misura S_y . Qual è la probabilità di trovare il valore $+\hbar/2$?

(Quantum Mechanics in Three Dimensions)

Soluzione

Definendo \vec{n} un versore nel piano xz che forma un angolo di $\theta = \pi/4$ con l'asse z , si può scrivere $S_x + S_z = \sqrt{2} \vec{S} \cdot \vec{n}$. Siccome la particella ha spin $1/2$, gli autovalori di $\vec{S} \cdot \vec{n}$ sono $\pm\hbar/2$. La misura di $S_x + S_z$ può dare quindi $\pm\hbar\sqrt{2}/2$. Dopo tale misura lo spin della particella è nel piano xz , quindi si ha uguale probabilità di trovarlo in uno dei due versi dell'asse y . Pertanto la probabilità di ottenere il valore $+\hbar/2$ è $P = 1/2$.

43 Rotazioni di spinori

Nella base di autostati di S_z uno spinore arbitrario ha la forma $\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$.

- Calcolare il valor medio di \hat{S}_x nello stato χ e la probabilità che una misura di S_x dia $+\hbar/2$.
- Usando l'operatore di rotazione, si determini lo spinore χ' che si ottiene da χ dopo una rotazione di un angolo $\pi/2$ attorno all'asse delle z . Calcolare il valor medio di \hat{S}_x in χ' ,

spiegando perchè è reale.

c) Usando il medesimo operatore di rotazione, determinare l'operatore trasformato S'_x e il suo valor medio in χ , e discutere la relazione con i risultati del punto b).

d) Quale fenomeno fisico permette la rotazione di cui al punto b) e in che modo?

Soluzione

Ricordando che $\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_x$, calcoliamo esplicitamente il suo valor medio:

$$\langle \hat{S}_x \rangle_\chi = \chi^\dagger \hat{S}_x \chi = \frac{\hbar}{2} (a^* \ b^*) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} (a^* \ b^*) \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} (a^* b + b^* a). \quad (244)$$

Sappiamo che i due possibili autovalori di \hat{S}_x sono $+\hbar/2$ e $-\hbar/2$, quindi il valor medio può essere scritto come $\langle \hat{S}_x \rangle_\chi = +\hbar/2 P_\uparrow - \hbar/2 P_\downarrow$, dove P_\uparrow (P_\downarrow) rappresenta la probabilità di avere spin up (down). Chiaramente dobbiamo avere $P_\uparrow + P_\downarrow = 1$, quindi:

$$\begin{cases} \frac{\hbar}{2} (+P_\uparrow - P_\downarrow) = \frac{\hbar}{2} (a^* b + b^* a) \\ P_\uparrow + P_\downarrow = 1 \end{cases} \Rightarrow P_\uparrow = \frac{1 + a^* b + b^* a}{2} \quad (245)$$

L'operatore di rotazione dello spin rispetto all'asse z è dato da $\hat{R}_z = \exp\left[-\frac{i\theta}{\hbar} \hat{S}_z\right]$. Lo spinore χ' è quindi dato da:

$$\begin{aligned} \chi' &= \exp\left[-\frac{i\pi}{2\hbar} \hat{S}_z\right] \chi = \exp\left[-\frac{i\pi}{4} \hat{\sigma}_z\right] \chi = \left(\cos \frac{\pi}{4} \mathbb{I} - i \sin \frac{\pi}{4} \sigma_z\right) \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \left(\frac{\sqrt{2}}{2} \mathbb{I} - i \frac{\sqrt{2}}{2} \sigma_z\right) \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \\ &= \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} (1-i)a \\ (1+i)b \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (246)$$

dove nel terzo passaggio si è usata la formula di Eulero e le proprietà delle matrici di Pauli, $\sigma_z^{2n} = \mathbb{I}$ e $\sigma_z^{2n+1} = \sigma_z$:

$$\begin{aligned} \exp\left[-\frac{i\theta}{2} \sigma_z\right] &= \cos\left(\frac{\theta}{2} \sigma_z\right) - i \sin\left(\frac{\theta}{2} \sigma_z\right) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(\theta/2)^{2n}}{(2n)!} \sigma_z^{2n} - \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(\theta/2)^{2n+1}}{(2n+1)!} \sigma_z^{2n+1} \\ &= \mathbb{I} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(\theta/2)^{2n}}{(2n)!} - \sigma_z \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(\theta/2)^{2n+1}}{(2n+1)!} = \mathbb{I} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) - i \sigma_z \sin\left(\frac{\theta}{2}\right). \end{aligned}$$

Il valor medio di \hat{S}_x in χ' è

$$\langle \hat{S}_x \rangle_{\chi'} = \frac{\hbar}{4} ((1+i)a^* \ (1-i)b^*) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (1-i)a \\ (1+i)b \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{4} [(1-i)^2 b^* a + (1+i)^2 a^* b] = -\frac{\hbar}{2} i (b^* a - a^* b). \quad (247)$$

Notiamo che $b^* a$ è il complesso coniugato di $a^* b$; ciò implica che il termine tra parentesi sia un immaginario puro e quindi il risultato sia reale, come deve essere.

Ruotando l'operatore \hat{S}_x si ottiene

$$\begin{aligned}\hat{S}'_x &= U^\dagger(\theta) \hat{S}_x U(\theta) = \left(\cos \frac{\pi}{4} \mathbb{I} + i \sin \frac{\pi}{4} \sigma_z \right) \hat{S}_x \left(\cos \frac{\pi}{4} \mathbb{I} - i \sin \frac{\pi}{4} \sigma_z \right) \\ &= \frac{\hbar}{4} \begin{pmatrix} 1+i & 0 \\ 0 & 1-i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1-i & 0 \\ 0 & 1+i \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} = -\hat{S}_y\end{aligned}\quad (248)$$

Calcoliamo ora il suo valore medio in χ

$$\langle \hat{S}'_x \rangle_\chi = -\frac{\hbar}{2} (a^* \quad b^*) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} i (b^* a - a^* b) = \langle \hat{S}_x \rangle_{\chi'} . \quad (249)$$

Il valor medio dell'operatore non cambia se la rotazione viene applicata allo spinore piuttosto che all'operatore stesso.

Il fenomeno fisico associato a tale rotazione è la precessione dello spin in un campo magnetico diretto lungo z .

44 Composizione momenti angolari

Un elettrone in un atomo di idrogeno si trova in uno stato descritto da:

$$\psi = R_{21}(\sqrt{1/3} Y_1^0 \chi_+^{(z)} + \sqrt{2/3} Y_1^1 \chi_-^{(z)}) . \quad (250)$$

- Determinare valori e relative probabilità per una misura di L^2 , L_z , S^2 , S_z .
- Considerando il momento angolare totale dato da $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, determinare valori e relative probabilità per una misura di J^2 e J_z (consultando la tabella dei coefficienti di Clebsch-Gordan).
- Determinare la densità di probabilità della posizione dell'elettrone e la densità di probabilità dP/dr di trovare l'elettrone ad una distanza r e con "spin su" (integrata sull'angolo solido).

(*Quantum Mechanics in Three Dimensions*) GS4.64

Soluzione

Ricordiamo le proprietà delle armoniche sferiche: $\hat{L}^2 Y_\ell^m = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_\ell^m$ e $\hat{L}_z Y_\ell^m = \hbar m_\ell Y_\ell^m$. Si trova che $\ell = 1$ e quindi L^2 può assumere solo il valore $2\hbar^2$ con probabilità $P = 1$. Abbiamo invece $m_\ell = 1$ (quindi valore misurato di L_z pari a \hbar) con probabilità $P = |c_{m_\ell=1}|^2 = 2/3$ e $m_\ell = 0$ (cioè valore misurato di L_z pari a 0) con probabilità $P = |c_{m_\ell=0}|^2 = 1/3$. Lo stato è descritto come sovrapposizione di spinori, autostati di \hat{S}^2 e S_z

che soddisfano analoga algebra: $\hat{S}^2 \chi_{\pm}^{(z)} = 3/4 \hbar^2 \chi_{\pm}^{(z)}$ e $\hat{S}_z \chi_{\pm}^{(z)} = \pm \hbar/2 \chi_{\pm}^{(z)}$. Si ha quindi che S^2 può assumere solo il valore $3/4 \hbar^2$ con probabilità $P = 1$, mentre valore misurato di S_z pari a $\hbar/2$ ha probabilità $P = |c_{m_s=1/2}|^2 = 1/3$ e valore misurato di S_z pari a $-\hbar/2$ ha probabilità $P = |c_{m_s=-1/2}|^2 = 2/3$.

Riscriviamo lo stato con una notazione che mette in evidenza i numeri quantici associati ai momenti angolari: $\sqrt{1/3} |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle |10\rangle + \sqrt{2/3} |\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle |11\rangle$. Associando il numero quantico m a \hat{J}_z si ha che $m = m_\ell + m_s$, mentre il momento angolare totale può assumere valori $j = \ell - 1/2, \ell + 1/2$. Si ottiene (prendendo i coefficienti di Clebsch-Gordan da tabella):

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{1}{3}} |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle |10\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle |11\rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}} \left[\sqrt{\frac{2}{3}} |\frac{3}{2} \frac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle \right] + \sqrt{\frac{2}{3}} \left[\sqrt{\frac{1}{3}} |\frac{3}{2} \frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle \right] \\ &= \frac{2\sqrt{2}}{3} |\frac{3}{2} \frac{1}{2}\rangle + \frac{1}{3} |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle. \end{aligned} \quad (251)$$

Possiamo quindi ora determinare che $j = 3/2$, ossia valore di J^2 pari a $15/4 \hbar^2$ ha probabilità $P = |c_{j=3/2}|^2 = 8/9$, mentre $j = 1/2$, ossia valore di J^2 pari a $3/4 \hbar^2$ ha probabilità $P = |c_{j=1/2}|^2 = 1/9$. Abbiamo invece $m = 1/2$ (quindi valore misurato di J_z pari a $\hbar/2$) con probabilità $P = 1$.

La densità di probabilità della posizione dell'elettrone è data dal modulo quadro della funzione d'onda:

$$\begin{aligned} |\psi|^2 &= R_{21}^2 \left\{ \frac{1}{3} |Y_1^0|^2 \underbrace{(\chi_+^{(z)})^\dagger \chi_+^{(z)}}_1 + \frac{\sqrt{2}}{3} \left[Y_1^{0*} Y_1^1 \underbrace{(\chi_+^{(z)})^\dagger \chi_-^{(z)}}_0 + Y_1^{1*} Y_1^0 \underbrace{(\chi_-^{(z)})^\dagger \chi_+^{(z)}}_0 \right] + \frac{2}{3} |Y_1^1|^2 \underbrace{(\chi_-^{(z)})^\dagger \chi_-^{(z)}}_1 \right\} \\ &= \frac{1}{3} R_{21}^2 (|Y_1^0|^2 + 2|Y_1^1|^2) = \frac{1}{3} \frac{1}{24} \frac{r^2}{a^5} e^{-r/a} \underbrace{\left(\frac{3}{4\pi} \cos^2 \theta + 2 \frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta \right)}_{3/(4\pi)} = \frac{r^2}{96\pi a^5} e^{-r/a}. \end{aligned} \quad (252)$$

La richiesta di trovare l'elettrone con con "spin su" seleziona la parte contenente $\chi_+^{(z)}$ nella funzione d'onda. Integrando sull'angolo solido si ottiene:

$$\frac{dP}{dr} = \frac{1}{3} r^2 R_{21}^2 \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta |Y_1^0|^2 = \frac{1}{3} r^2 R_{21}^2 = \frac{r^4}{72 a^5} e^{-r/a}. \quad (253)$$

45 Singoletto

Si consideri un sistema formato da un elettrone e un positrone in stato di singoletto.

a) Scrivere lo stato $|\psi\rangle$ del sistema in termini degli stati di spin up $|\uparrow\rangle$ e down $|\downarrow\rangle$ delle due particelle.

b) Calcolare $\vec{S}_e \cdot \vec{a} |\uparrow\rangle_e$ e $\vec{S}_e \cdot \vec{a} |\downarrow\rangle_e$, dove \vec{S}_e è l'operatore di spin dell'elettrone e \vec{a} un versore

arbitrario. Quali sono i possibili risultati di una misura di $\vec{S}_e \cdot \vec{a}$?

c) Calcolare il valor medio di $(\vec{S}_e \cdot \vec{a})(\vec{S}_p \cdot \vec{b})$ nello stato $|\psi\rangle$, dove \vec{S}_p è l'operatore di spin del positrone e \vec{b} un versore arbitrario.

Ricordare:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

(*Quantum Mechanics in Three Dimensions*)

Soluzione

Lo stato di singoletto implica spin totale nullo. Dalla richiesta di avere terza componente nulla si ottiene $c_1 |\uparrow_e \downarrow_p\rangle + c_2 |\downarrow_e \uparrow_p\rangle$. Per fissare i due coefficienti c_1 e c_2 si può richiedere $\hat{S}_\pm |\psi\rangle = 0$, dove $\hat{S}_\pm = \hat{S}_\pm^e + \hat{S}_\pm^p$, da cui si ricava:

$$|\psi\rangle = |00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_e \downarrow_p\rangle - |\downarrow_e \uparrow_p\rangle). \quad (254)$$

Scrivendo $\vec{a} = (a_x, a_y, a_z)$ e $\vec{S}_e = \hbar/2(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ si può facilmente calcolare $\vec{S}_e \cdot \vec{a}$. L'azione su $|\uparrow\rangle_e$ è data da:

$$\vec{S}_e \cdot \vec{a} |\uparrow\rangle_e = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} a_z & a_x - i a_y \\ a_x + i a_y & -a_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} a_z \\ a_x + i a_y \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} [a_z |\uparrow\rangle_e + (a_x + i a_y) |\downarrow\rangle_e]. \quad (255)$$

L'azione su $|\downarrow\rangle_e$ conduce invece a:

$$\vec{S}_e \cdot \vec{a} |\downarrow\rangle_e = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} a_z & a_x - i a_y \\ a_x + i a_y & -a_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} a_x - i a_y \\ -a_z \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} [(a_x - i a_y) |\uparrow\rangle_e - a_z |\downarrow\rangle_e]. \quad (256)$$

Facendo una misura di spin (lungo una direzione generica) per una particella a spin 1/2, i risultati della misura non possono che essere $\pm\hbar/2$.

Utilizzando quanto appena ricavato (che chiaramente vale in maniera analoga anche per il positrone) si può procedere al calcolo del valor medio di $(\vec{S}_e \cdot \vec{a})(\vec{S}_p \cdot \vec{b})$ nello stato

$|\psi\rangle = |00\rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle 00| (\vec{S}_e \cdot \vec{a}) (\vec{S}_p \cdot \vec{b}) |00\rangle &= \frac{1}{2} (\langle \uparrow_e \downarrow_p | - \langle \downarrow_e \uparrow_p |) (\vec{S}_e \cdot \vec{a}) (\vec{S}_p \cdot \vec{b}) (|\uparrow_e \downarrow_p\rangle - |\downarrow_e \uparrow_p\rangle) \\
&= \frac{1}{2} (\langle \uparrow_e \downarrow_p | - \langle \downarrow_e \uparrow_p |) \left((\vec{S}_e \cdot \vec{a}) |\uparrow_e\rangle (\vec{S}_p \cdot \vec{b}) |\downarrow_p\rangle - (\vec{S}_e \cdot \vec{a}) |\downarrow_e\rangle (\vec{S}_p \cdot \vec{b}) |\uparrow_p\rangle \right) \\
&= \frac{\hbar^2}{8} (\langle \uparrow_e \downarrow_p | - \langle \downarrow_e \uparrow_p |) \{ [a_z |\uparrow\rangle_e + (a_x + i a_y) |\downarrow\rangle_e] [(b_x - i b_y) |\uparrow\rangle_p - b_z |\downarrow\rangle_p] + \\
&\quad - [(a_x - i a_y) |\uparrow\rangle_e - a_z |\downarrow\rangle_e] [b_z |\uparrow\rangle_p + (b_x + i b_y) |\downarrow\rangle_p] \} \\
&= \frac{\hbar^2}{8} (-a_z b_z - a_x b_x - a_y b_y + i a_y b_x - i a_x b_y - a_z b_z - a_x b_x - a_y b_y - i a_y b_x + i a_x b_y) \\
&= -\frac{\hbar^2}{4} (a_z b_z + a_x b_x + a_y b_y) = -\frac{\hbar^2}{4} \vec{a} \cdot \vec{b}. \tag{257}
\end{aligned}$$

46 Composizione momenti angolari per fermioni identici

Si consideri un sistema costituito da due fermioni identici di spin $1/2$. Indichiamo con $\vec{r} = \vec{x}_2 - \vec{x}_1$ la loro posizione relativa. Determinare i possibili autovalori dello spin totale S^2 (con $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$) e del momento angolare totale J^2 (con $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$) nei casi in cui la funzione d'onda spaziale del sistema sia data da (in coordinate polari sferiche):

- a) $\psi(r, \theta, \phi) = C_1 r^2 e^{-r^2/a^2}$
- b) $\psi(r, \theta, \phi) = C_2 r^2 \cos \theta e^{-r^2/a^2}$
- c) $\psi(r, \theta, \phi) = C_3 r^2 \sin \theta e^{i\phi} e^{-r^2/a^2}$
- d) $\psi(r, \theta, \phi) = C_4 r^2 (3 \cos(2\theta) + 1) e^{-r^2/a^2}$

dove C_i sono fattori costanti di normalizzazione.

(Identical Particles)

Soluzione

Notiamo che lo scambio della particella 1 con la particella 2 implica $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$. Per risolvere il problema dobbiamo ricordare che sistemi di fermioni devono avere funzione d'onda anti-simmetrica per scambio di due particelle e che le armoniche sferiche sono simmetriche per ℓ pari (cioè sono funzioni pari per $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$), mentre sono anti-simmetriche per ℓ dispari. Un sistema di due fermioni può dar vita ad un singoletto $(|\uparrow_1 \downarrow_2\rangle - |\downarrow_1 \uparrow_2\rangle)/\sqrt{2}$, che è anti-simmetrico per $1 \rightarrow 2$, oppure ad un tripletto $(|\uparrow_1 \uparrow_2\rangle, |\downarrow_1 \downarrow_2\rangle, (|\uparrow_1 \downarrow_2\rangle + |\downarrow_1 \uparrow_2\rangle)/\sqrt{2})$, che invece è simmetrico. Se la parte spaziale della funzione d'onda del sistema è simmetrica per lo scambio, allora lo stato di spin sarà singoletto, cioè $s = 0$ e autovalore di S^2 uguale a zero. Viceversa sarà tripletto se la parte spaziale è anti-simmetrica, e quindi $s = 1$ e

autovalore di S^2 pari a $2\hbar^2$. I numeri quantici j sono compresi tra $\ell + s$ e $|\ell - s|$. Per il singoletto abbiamo quindi $j = \ell$, cioè autovalore di J^2 pari a $\ell(\ell + 1)\hbar^2$. Per il tripletto abbiamo $j = \ell + 1, \ell, \ell - 1$ e autovalore di J^2 pari a $j(j + 1)\hbar^2$. Possiamo quindi valutare i vari casi:

- a) Funzione d'onda spaziale simmetrica per $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ e $\ell = 0$: $S^2 \rightarrow 0, J^2 \rightarrow 0$.
- b) Funzione d'onda spaziale proporzionale a Y_1^0 quindi anti-simmetrica con $\ell = 1$: $S^2 \rightarrow 2\hbar^2, J^2 \rightarrow 6\hbar^2, 2\hbar^2, 0$.
- c) Funzione d'onda spaziale proporzionale a Y_1^1 quindi analogo al punto b).
- d) Funzione d'onda spaziale proporzionale a Y_2^0 (scrivendo $\cos(2\theta) = 2\cos^2\theta - 1$) quindi simmetrica con $\ell = 2$: $S^2 \rightarrow 0, J^2 \rightarrow 6\hbar^2$.

47 Bosoni identici in buca di potenziale

Due bosoni identici si trovano in una buca di potenziale infinita asimmetrica e interagiscono debolmente tra di loro con un potenziale $V(x_a, x_b) = -a V_0 \delta(x_a - x_b)$, dove V_0 è una costante con dimensioni di energia e a è la larghezza della buca.

- a) Ignorando l'interazione tra le particelle, trovare l'energia e la funzione d'onda del livello fondamentale e quella del primo stato eccitato.
- b) Usare la teoria delle perturbazioni al prim'ordine per stimare l'effetto dell'interazione tra le particelle sui primi due livelli energetici.

(Identical Particles) GS7.3

Soluzione

Ricordiamo le autofunzioni normalizzate e gli autovalori dell'energia per la buca di potenziale asimmetrica di larghezza a :

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \quad E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m a^2}, \quad (258)$$

Partiamo dal caso senza interazione reciproca. L'equazione di Schrödinger può essere scritta come:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi^0}{dx_a^2} + V(x_a)\psi^0 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi^0}{dx_b^2} + V(x_b)\psi^0 = E\psi^0, \quad (259)$$

cioè come la somma di due equazioni di Schrödinger a una particella, e può essere risolta separando le variabili, $\psi^0 = \psi_A^0(x_a)\psi_B^0(x_b)$ (e abbiamo incluso un apice 0 per indicare che stiamo considerando il caso "non-perturbato", cioè senza interazione reciproca). Lo stato fondamentale del sistema è dato dalla situazione in cui entrambe le funzioni d'onda corrispondono allo stato fondamentale ad una particella (notare che ciò non sarebbe possibile

nel caso di fermioni), mentre il primo stato eccitato del sistema a due particelle corrisponde ad una combinazione in cui una particella è nello stato fondamentale e una nel primo stato eccitato. Considerando che, nel caso di bosoni, la funzione d'onda deve essere simmetrica per scambio $\psi(x_a, x_b) = \psi(x_b, x_a)$, si arriva a:

$$\begin{aligned}\psi_1^0(x_a, x_b) &= \psi_1(x_a) \psi_1(x_b) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi x_a}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi x_b}{a}\right) \\ \psi_2^0(x_a, x_b) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(x_a) \psi_2(x_b) + \psi_2(x_a) \psi_1(x_b)] \\ &= \frac{\sqrt{2}}{a} \left[\sin\left(\frac{\pi x_a}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi x_b}{a}\right) + \sin\left(\frac{2\pi x_a}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi x_b}{a}\right) \right].\end{aligned}\quad (260)$$

L'energia è data dalla somma delle energia negli stati a singola particella, cioè:

$$E_1^0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{m a^2}, \quad E_2^0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2} + \frac{4\hbar^2 \pi^2}{2m a^2} = \frac{5\hbar^2 \pi^2}{m a^2}. \quad (261)$$

Le correzioni ai livelli energetici al prim'ordine possono essere calcolate attraverso il valore d'aspettazione della perturbazione calcolato rispetto allo stato non-perturbato, $E_1^1 = \langle \psi_1^0 | \hat{H}' | \psi_1^0 \rangle$ e $E_2^1 = \langle \psi_2^0 | \hat{H}' | \psi_2^0 \rangle$.

$$\begin{aligned}E_1^1 &= \langle \psi_1^0 | \hat{H}' | \psi_1^0 \rangle = \frac{4}{a^2} \int_0^a dx_a \int_0^a dx_b \sin^2\left(\frac{\pi x_a}{a}\right) \sin^2\left(\frac{\pi x_b}{a}\right) [-a V_0 \delta(x_a - x_b)] \\ &= -\frac{4V_0}{a} \int_0^a dx \sin^4\left(\frac{\pi x}{a}\right) = -\frac{4V_0}{a} \frac{a}{\pi} \underbrace{\int_0^\pi dy \sin^4 y}_{3\pi/8} = -\frac{3V_0}{2}.\end{aligned}\quad (262)$$

$$\begin{aligned}E_2^1 &= \langle \psi_2^0 | \hat{H}' | \psi_2^0 \rangle \\ &= -\frac{2V_0}{a} \int_0^a dx_a \int_0^a dx_b \left[\sin\left(\frac{\pi x_a}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi x_b}{a}\right) + \sin\left(\frac{2\pi x_a}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi x_b}{a}\right) \right]^2 \delta(x_a - x_b) \\ &= -\frac{8V_0}{a} \int_0^a dx \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) = -\frac{8V_0}{a} \frac{a}{\pi} \int_0^\pi dy \sin^2 y \sin^2(2y) \\ &= -\frac{32V_0}{\pi} \underbrace{\int_0^\pi dy (\sin^4 y - \sin^6 y)}_{3\pi/8 - 5\pi/16} = -2V_0.\end{aligned}\quad (263)$$

48 Oscillatore armonico perturbato

Calcolare al primo ordine perturbativo in α e β le correzioni ai livelli energetici per l'oscillatore armonico di Hamiltoniano:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2 + \alpha \hat{x}^3 + \beta \hat{x}^4. \quad (264)$$

Soluzione

Abbiamo $\hat{H}^0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2$, $\hat{H}'(\alpha) = \alpha \hat{x}^3$ e $\hat{H}'(\beta) = \beta \hat{x}^4$. Conviene riscrivere gli operatori \hat{x}^3 e \hat{x}^4 in termini di operatori di creazione e distruzione. Ricordiamo:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \quad , \quad \hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad , \quad \hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad , \quad (265)$$

e che gli stati stazionari non perturbati dell'oscillatore armonico sono ortogonali tra loro: $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$. Si ha quindi:

$$\begin{aligned} \hat{x}^3 &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2} (\hat{a}^\dagger + \hat{a})(\hat{a}^\dagger + \hat{a})(\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \\ &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2} \left[(\hat{a}^\dagger)^3 + (\hat{a}^\dagger)^2\hat{a} + \hat{a}(\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}^2 + \hat{a}^2\hat{a}^\dagger + \hat{a}^3 \right] \end{aligned} \quad (266)$$

Per calcolare la correzione all'energia al prim'ordine perturbativo occorre calcolare il il valore d'aspettazione della perturbazione calcolato rispetto allo stato non-perturbato. Da Eqs. 265 sappiamo che il valore medio di un numero dispari di operatori di creazione e/o distruzione è nullo. Pertanto $E_n^1(\alpha) = \langle n|\alpha \hat{x}^3|n\rangle = 0$.

$$\begin{aligned} \hat{x}^4 &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \left[(\hat{a}^\dagger)^3 + (\hat{a}^\dagger)^2\hat{a} + \hat{a}(\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}^2 + \hat{a}^2\hat{a}^\dagger + \hat{a}^3 \right] (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \\ &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \left[(\hat{a}^\dagger)^4 + (\hat{a}^\dagger)^2\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}(\hat{a}^\dagger)^3 + \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}(\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}^\dagger\hat{a}^2\hat{a}^\dagger + \hat{a}^2(\hat{a}^\dagger)^2 + \right. \\ &\quad \left. + \hat{a}^3\hat{a}^\dagger + (\hat{a}^\dagger)^3\hat{a} + (\hat{a}^\dagger)^2\hat{a}^2 + \hat{a}(\hat{a}^\dagger)^2\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}^2 + \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}^3 + \hat{a}^2\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^4 \right] \end{aligned} \quad (268)$$

Consideriamo solo i termini con due operatori di creazione e due di distruzione (tutti gli altri termini hanno valore d'aspettazione nullo) e calcoliamo:

$$\begin{aligned}
E_n^1(\beta) &= \langle n | \beta \hat{x}^4 | n \rangle \\
&= \beta \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 \langle n | \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \hat{a}^2 \hat{a}^\dagger + \hat{a}^2 (\hat{a}^\dagger)^2 + (\hat{a}^\dagger)^2 \hat{a}^2 + \hat{a} (\hat{a}^\dagger)^2 \hat{a} + \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a} | n \rangle \\
&= \beta \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 \langle n | (n+1)^2 + n(n+1) + (n+1)(n+2) + (n-1)n + (n+1)n + n^2 | n \rangle \\
&= 3\beta \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 (2n^2 + 2n + 1). \tag{269}
\end{aligned}$$

49 Oscillatore armonico perturbato /2

Si consideri un oscillatore armonico descritto dall'operatore Hamiltoniano

$$\hat{H}^0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2. \tag{270}$$

dove $\omega = \sqrt{k/m}$. Se la costante elastica k subisce una variazione tale che $k \rightarrow k(1 + \epsilon)$, come viene modificato lo spettro dei livelli energetici?

- Trovare il risultato esatto.
- Interpretando la variazione indotta sul potenziale elastico come una perturbazione (cioè $\epsilon \ll 1$), calcolare la correzione sui livelli energetici al primo e al secondo ordine perturbativo.
- Sviluppare il risultato esatto trovato nel punto a) in serie di potenze di ϵ e confrontare l'espressione così ottenuta con i risultati del punto b).

(Time-independent Perturbation Theory) GS7.2

Soluzione

Sappiamo che per l'oscillatore armonico i livelli energetici sono dati da $E_n^0 = \hbar\omega(n + 1/2)$. Se $\omega \rightarrow \omega' = \sqrt{k(1 + \epsilon)/m}$ si ha semplicemente:

$$E_n' = \hbar\omega' \left(n + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \sqrt{1 + \epsilon} \left(n + \frac{1}{2} \right) = E_n^0 \sqrt{1 + \epsilon}. \tag{271}$$

Interpretando la variazione indotta sul potenziale elastico come una perturbazione $\hat{H}' = \frac{1}{2} m\omega^2 \epsilon \hat{x}^2$ e usando Eq. 265, al prim'ordine perturbativo si ha:

$$\begin{aligned}
E_n^1 &= \langle n | \hat{H}' | n \rangle = \frac{1}{2} m\omega^2 \epsilon \langle n | \hat{x}^2 | n \rangle = \frac{1}{2} m\omega^2 \epsilon \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n | (\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a}^2 | n \rangle \\
&= \frac{1}{4} \hbar\omega \epsilon (2n + 1) = \frac{1}{2} \hbar\omega \epsilon \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{2} \epsilon E_n^0. \tag{272}
\end{aligned}$$

Al secondo ordine perturbativo si ha:

$$\begin{aligned}
E_n^2 &= \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m | \hat{H}' | n \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} = \frac{1}{16} \hbar^2 \omega^2 \epsilon^2 \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m | (\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a}^2 | n \rangle|^2}{\hbar \omega (n - m)} \\
&= \frac{1}{16} \hbar \omega \epsilon^2 \left(\frac{|\langle n-2 | \sqrt{n} \sqrt{n-1} | n-2 \rangle|^2}{2} + \frac{|\langle n+2 | \sqrt{n+1} \sqrt{n+2} | n+2 \rangle|^2}{-2} \right) \\
&= \frac{1}{16} \hbar \omega \epsilon^2 [-2(n + \frac{1}{2})] = -\frac{1}{8} \epsilon^2 E_n^0. \tag{273}
\end{aligned}$$

Sviluppando in serie di Taylor il risultato di Eq. 271 si ottiene:

$$E_n' = E_n^0 \sqrt{1 + \epsilon} = E_n^0 \left(1 + \frac{1}{2} \epsilon - \frac{1}{8} \epsilon^2 + \dots \right), \tag{274}$$

e quindi, ordine per ordine, il risultato coincide con quanto ricavato attraverso la teoria perturbativa.

50 Oscillatore armonico perturbato /3

Considerare una particella carica soggetta ad un potenziale armonico unidimensionale. Supponiamo di attivare un debole campo elettrico E , tale che il potenziale sia modificato da un termine $H' = -q E x$. Calcolare la correzione ai livelli energetici al primo e secondo ordine perturbativo e confrontarla col risultato esatto.

(Time-independent Perturbation Theory)

Soluzione

Al prim'ordine perturbativo si ha:

$$E_n^1 = \langle n | \hat{H}' | n \rangle = -q E \langle n | \hat{x} | n \rangle = 0, \tag{275}$$

per via della definizione dell'operatore \hat{x} in termini di operatori di creazione e distruzione e dell'ortogonalità degli stati stazionari dell'oscillatore armonico.

Al secondo ordine perturbativo si ha:

$$\begin{aligned}
E_n^2 &= \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m | \hat{H}' | n \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} = (q E)^2 \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m | \hat{x} | n \rangle|^2}{(n - m) \hbar \omega} = \frac{(q E)^2}{2m \omega^2} \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m | \hat{a}^\dagger + \hat{a} | n \rangle|^2}{n - m} \\
&= \frac{(q E)^2}{2m \omega^2} \sum_{m \neq n} \frac{(n+1) \delta_{m,n+1} + n \delta_{m,n-1}}{n - m} = \frac{(q E)^2}{2m \omega^2} \left[\frac{n+1}{n - (n+1)} + \frac{n}{n - (n-1)} \right] \\
&= \frac{(q E)^2}{2m \omega^2} [-(n+1) + n] = -\frac{(q E)^2}{2m \omega^2} \tag{276}
\end{aligned}$$

Operando il cambio di variabile $x' = x - qE/(m\omega^2)$, l'equazione di Schrödinger diventa:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_n}{dx'^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x'^2 \psi_n = \underbrace{\left[E_n + \frac{(qE)^2}{2m\omega^2} \right]}_{(n+1/2)\hbar\omega} \psi_n, \quad (277)$$

da cui possiamo concludere:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega - \frac{(qE)^2}{2m\omega^2}. \quad (278)$$

Abbiamo quindi scoperto che è sufficiente la correzione al second'ordine, mentre tutte le altre correzioni perturbative danno un contributo nullo.

51 Momento angolare e perturbazioni

Si consideri un sistema quantistico descritto dall'operatore Hamiltoniano:

$$\hat{H}^0 = \frac{\hat{L}^2}{2I} + \frac{\hat{L}_z^2}{2I_z} \quad (279)$$

dove \hat{L}^2 è il quadrato dell'operatore di momento angolare orbitale ed \hat{L}_z la sua terza componente, mentre I e I_z sono costanti positive opportunamente dimensionate.

- Si determini lo spettro degli autovalori di \hat{H}^0 ed i corrispondenti autostati. Quali di essi sono degeneri? A che cosa è dovuta la degenerazione dello spettro?
- Se il sistema si trova in uno stato che è autostato di \hat{L}^2 , si individui il suo livello di energia minima.
- Supponendo che il sistema venga perturbato da un termine $\hat{H}' = \epsilon \hat{L}_x$, si calcolino le correzioni indotte dalla perturbazione sul livello di minima energia per $\ell = 1$, al primo livello perturbativo non banale.

(Time-independent Perturbation Theory)

Soluzione

Sappiamo che le armoniche sferiche $|\ell, m\rangle$ sono autofunzioni \hat{L}^2 e \hat{L}_z (e quindi \hat{L}_z^2), e possiamo quindi scrivere:

$$\begin{aligned} \hat{H}^0 |\ell, m\rangle &= \frac{\hat{L}^2}{2I} |\ell, m\rangle + \frac{\hat{L}_z^2}{2I_z} |\ell, m\rangle = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2I} |\ell, m\rangle + \frac{\hbar^2 m^2}{2I_z} |\ell, m\rangle \\ &= \left(\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2I} + \frac{\hbar^2 m^2}{2I_z} \right) |\ell, m\rangle = E_{\ell, m}^0 |\ell, m\rangle. \end{aligned} \quad (280)$$

La degenerazione dello spettro è dovuta al termine proporzionale a m^2 . Infatti, ad ogni energia $E_{\ell,|m|}^0 = \left(\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2I} + \frac{\hbar^2 m^2}{2I_z} \right)$ corrispondono due stati degeneri $|\ell, -|m|\rangle$ e $|\ell, +|m|\rangle$. Il minimo dell'energia a ℓ fissato è chiaramente dato dalla condizione $m = 0$, cioè $E_{\ell,0}^0 = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2I}$ e corrisponde allo stato $|\ell, 0\rangle$. Tale stato è non-degenere. Per calcolare le correzioni legate al termine $\epsilon \hat{L}_x$ ricordiamo:

$$\hat{L}_x = \frac{\hat{L}_+ + \hat{L}_-}{2} \quad , \quad \hat{L}_{\pm} |\ell, m\rangle = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m \pm 1)} |\ell, m \pm 1\rangle . \quad (281)$$

Notando che $\langle \ell, m | \hat{L}_{\pm} | \ell, m \rangle = 0$, è chiaro che al prim'ordine perturbativo $E_{\ell m}^1 = \langle \ell, m | \epsilon \hat{L}_x | \ell, m \rangle = 0$ (ricordiamo che tale formulazione della teoria delle perturbazioni non sarebbe possibile se lo stato fosse degenere). Andando al second'ordine, la correzione al livello E_{10} è:

$$\begin{aligned} E_{10}^2 &= \sum_{m \neq 0} \frac{|\langle 1m | \hat{H}' | 10 \rangle|^2}{E_{10}^0 - E_{1m}^0} = \frac{\epsilon^2}{4} \left(\frac{|\langle 11 | \hat{L}_+ + \hat{L}_- | 10 \rangle|^2}{E_{10}^0 - E_{11}^0} + \frac{|\langle 1-1 | \hat{L}_+ + \hat{L}_- | 10 \rangle|^2}{E_{10}^0 - E_{1-1}^0} \right) \\ &= \frac{\epsilon^2}{4} \left(\frac{|\langle 11 | \hbar \sqrt{2} | 11 \rangle|^2}{-\hbar^2/(2I_z)} + \frac{|\langle 1-1 | \hbar \sqrt{2} | 1-1 \rangle|^2}{-\hbar^2/(2I_z)} \right) = -2\epsilon^2 I_z . \end{aligned} \quad (282)$$

52 Potenziale armonico

Una particella di massa m è soggetta ad un potenziale armonico di costante elastica k . Ad un certo istante, la sua funzione d'onda è data da

$$\psi(x) = A x^2 e^{-m\omega x^2/(2\hbar)} \quad , \quad A \in \mathbb{R}^+ \quad , \quad \omega = \sqrt{k/m} . \quad (283)$$

- Esprimere $\psi(x)$ in termini di stati stazionari.
- ψ ha parità definita? Calcolare i valori medi su ψ di impulso ed energia (evitare il calcolo di integrali!).
- Se si introduce un termine di perturbazione $\hat{H}' = \frac{1}{2} m\omega^2 \epsilon \hat{x}^2$, quali sono le correzioni al valor medio dell'energia del punto *b*?

(*Time-independent Perturbation Theory*)

Soluzione

Dalle espressioni degli stati stazionari e dei polinomi di Hermite riportate nelle formule utili, è immediato vedere che:

$$x^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \xi^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \left(\frac{H_2}{4} + \frac{H_0}{2} \right) \quad , \quad e^{-m\omega x^2/(2\hbar)} = e^{-\xi^2/2} \quad , \quad (284)$$

da cui si ricava

$$\begin{aligned}\psi(x) &= A \frac{\hbar}{m\omega} \left(\frac{H_2}{4} + \frac{H_0}{2} \right) e^{-\xi^2/2} = A \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{5/4} \pi^{1/4} \left(\frac{2\sqrt{2}}{4} \psi_2 + \frac{1}{2} \psi_0 \right) \quad (285) \\ &= A \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{5/4} \frac{\pi^{1/4}}{2} \left(\sqrt{2} \psi_2 + \psi_0 \right) = A' \left(\sqrt{2} \psi_2 + \psi_0 \right) = \sqrt{\frac{2}{3}} \psi_2 + \sqrt{\frac{1}{3}} \psi_0.\end{aligned}$$

Nell'ultimo passaggio è stata fissata la costante A' richiedendo $\int dx |\psi|^2 = 1$ e utilizzando l'ortonormalità degli stati stazionari.

La funzione d'onda è pari, infatti $\psi(x) = \psi(-x)$. L'operatore impulso è invece dispari, quindi $\langle \hat{p} \rangle = 0$. L'energia degli stati stazionari è data da $E_n = \hbar\omega (n + 1/2)$. Il valore medio dell'energia è:

$$\langle E \rangle = \left(\sqrt{\frac{2}{3}} \right)^2 E_2 + \left(\sqrt{\frac{1}{3}} \right)^2 E_0 = \hbar\omega \left(\frac{2}{3} \frac{5}{2} + \frac{1}{3} \frac{1}{2} \right) = \frac{11}{6} \hbar\omega. \quad (286)$$

Introducendo il termine perturbativo, l'operatore Hamiltoniano diventa:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2 (1 + \epsilon). \quad (287)$$

Quindi procede tutto in maniera analoga a quanto sopra operando la sostituzione $\omega^2 \rightarrow \omega^2 (1 + \epsilon)$. Il valor medio dell'energia diventa

$$\langle E \rangle = \frac{11}{6} \hbar\omega \sqrt{1 + \epsilon}. \quad (288)$$

53 Atomo di idrogeno perturbato

Un atomo di idrogeno è soggetto alla perturbazione

$$H' = \gamma \frac{a_0^2}{r^2}.$$

Ricordando che la funzione d'onda dello stato fondamentale è

$$\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$$

calcolare l'effetto della perturbazione sull'energia dello stato fondamentale, $E_1 = -e^2/a_0$, al prim'ordine.

(*Time-independent Perturbation Theory*)

Soluzione

La correzione al livello energetico al prim'ordine può essere calcolata attraverso il valore d'aspettazione della perturbazione calcolato rispetto allo stato non-perturbato, $E_1^1 = \langle \psi_{100} | \hat{H}' | \psi_{100} \rangle$:

$$\begin{aligned} E_1^1 &= \langle \psi_{100} | \hat{H}' | \psi_{100} \rangle = \int d^3r \psi_{100}^* H' \psi_{100} = 4\pi \int dr r^2 \frac{e^{-2r/a_0}}{\pi a_0^3} \gamma \frac{a_0^2}{r^2} \\ &= \frac{4\pi \gamma a_0^2}{\pi a_0^3} \int dr e^{-2r/a_0} = \frac{4\gamma a_0}{a_0} \frac{1}{2} = 2\gamma. \end{aligned} \quad (289)$$