

# Introduzione

Questo fascicolo è una raccolta di parte del Corso di Esercitazioni di Istituzioni di Fisica Teorica tenuto agli studenti del 3° anno del Corso di Laurea in Fisica negli Anni Accademici 2001-2002, 2002-2003 e 2003-2004.

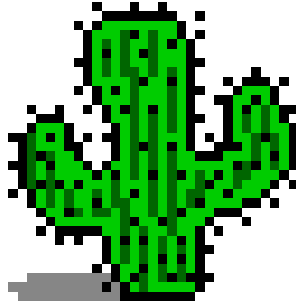
Lo scopo principale del Corso di Esercitazioni è quello di preparare gli studenti all'esame scritto di Istituzioni di Fisica Teorica. È per questo che il materiale qui raccolto consiste in:

1. integrazioni ed approfondimenti di alcuni argomenti trattati nei Corsi di Teoria dal Prof. Giansiracusa e dal Prof. Lombardo.
2. richiami delle formule necessarie per la soluzione degli esercizi proposti.
3. risoluzione completa di alcuni degli esercizi (opportunamente scelti) assegnati nei compiti di esame degli ultimi anni. In questo senso questa raccolta è complementare alla raccolta del Dr. Giovanni Piccitto, che si trova in rete all'indirizzo <http://192.167.0.131/SDAF/spazioweb/piccitto/>, che invece affronta un numero molto maggiore di esercizi, non riportando la soluzione completa, ma fornendo dei suggerimenti per l'impostazione della soluzione. Si raccomanda pertanto un uso parallelo di queste due raccolte.

Si ringraziano il Dr. Giovanni Piccitto per una lettura critica del fascicolo, il Dr. Giuseppe Angilella per la sua indispensabile consulenza con il Latex, e Filippo Caruso per l'aiuto nella trascrizione in Latex di buona parte degli appunti. Suggerimenti e correzioni sono sempre benvenuti.

Catania, 24 Maggio 2003  
Vito Claudio Latora

**Notazione.** I due seguenti simboli posti ai margini della pagina:



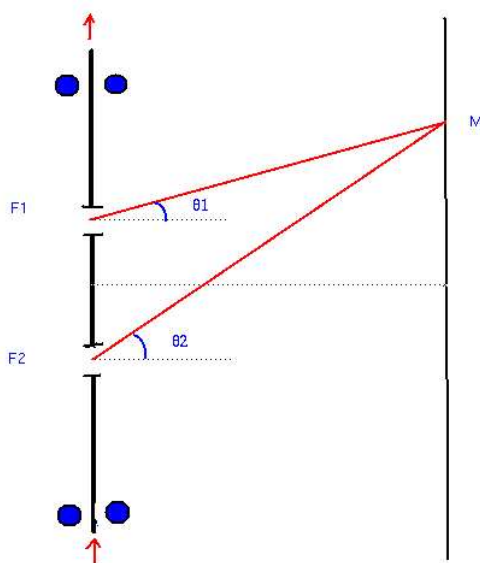
indicano rispettivamente un passaggio delicato (spinoso) a cui fare attenzione, e un punto in cui bisogna fermarsi a riflettere (mumble-cat).

# Capitolo 1

## Concetti Generali

1. **Esperimenti con proiettili, onde ed elettroni.** Si consiglia di leggere il capitolo 1 di Ref.[5] Vol III, per quella che rimane tuttora una delle più belle ed interessanti introduzioni alla meccanica quantistica.
2. **La matematica dell'interferenza.** (Vedi Ref.[5] Vol I, 29-5).
3. **Complementarietà Onda-Materia e Relazioni di Indeterminazione.** Gli aspetti ondulatori e corpuscolari della luce sono mutuamente esclusivi, nel senso che è impossibile determinare attraverso quale fenditura passa ciascun fotone senza distruggere, con questa operazione, il fenomeno di interferenza. Apportando una leggera modifica all'esperimento di Young delle due fenditure, una modifica che consente di determinare se il fotone passa da  $F_1$  o da  $F_2$ , è possibile fare vedere come la complementarietà onda-materia e le relazioni di indeterminazione sono intimamente collegate. (Vedi Ref.[1] pag.50).

A tal proposito, consideriamo la seguente modifica all'esperimento di Young delle due fenditure. Assumiamo che la lastra in cui sono presenti le due fenditure  $F_1$  e  $F_2$  sia montata in modo tale da potersi muovere verticalmente, così da potere misurare la componente verticale dell'impulso trasferito alla lastra (vedi figura). Consideriamo un fotone che colpisce lo schermo, dietro le fenditure, nel punto  $M$ . Inizialmente il fotone ha un momento  $p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h\nu}{c}$ . A seconda se il fotone ha attraversato  $F_1$  o  $F_2$  si troverà ad avere un momento rispettivamente uguale a  $p_1 = -\frac{h\nu}{c} \sin \theta_1$  oppure a  $p_2 = -\frac{h\nu}{c} \sin \theta_2$ . Sembrerebbe quindi che con questo dispositivo possiamo determinare da quale punto è passato l'elettrone e nello stesso tempo osservare il fenomeno di interferenza. In realtà quello che succede è che con questo apparato non appena si determina la posizione dell'elettrone le frange di interferenza non sono più visibili. Per capire quello che succede dobbiamo notare che anche la lastra deve essere trattata quanto-meccanicamente. In altri termini, se si vuole conoscere attraverso quale fenditura è passato il fotone, l'incertezza  $\Delta p$  nel momento verticale della lastra deve essere sufficientemente piccola da poter misurare la differenza tra  $p_1$  e  $p_2$ , ovvero  $\Delta p \ll |p_2 - p_1|$ ; perciò, le relazioni di indeterminazione di Heisenberg implicano che la posizione della lastra è conosciuta con incertezza  $\Delta x \geq \frac{h}{|p_2 - p_1|}$ .



Se si indica con  $a$  la distanza fra le due fenditure, con  $d$  la distanza del piano fenditure dal piano schermo, e si assume che  $\theta_1$  e  $\theta_2$  sono piccoli, tramite lo sviluppo in serie della funzione seno si ottiene:  $|p_2 - p_1| \cong \frac{h\nu}{c} |\theta_2 - \theta_1| \cong \frac{h}{\lambda} \frac{a}{d}$ . Nell'ultimo passaggio si è fatto uso di  $\theta_1 \sim \frac{x-a/2}{d}$  e  $\theta_2 \sim \frac{x+a/2}{d}$ ;  $\lambda = \frac{c}{\nu}$  è la lunghezza d'onda della luce. Sostituendo nella relazione precedente, si ottiene  $\Delta x \geq \frac{\lambda d}{a}$ . Ma  $\frac{\lambda d}{a}$  è proprio la separazione delle frange che si vuole osservare! Quindi, se la posizione delle due fenditure è definita solo a meno di un'incertezza più grande della separazione delle frange, è impossibile osservare il fenomeno dell'interferenza e con ciò risulta rispettato il principio di complementarità.

#### 4. Pacchetti d'onda. (Vedi Ref.[1]).

5. **Misure Successive.** L'Hamiltoniana non dipendente dal tempo  $H$  ha autovettori  $|\nu\rangle$  con autovalori non degeneri  $\hbar\omega_\nu$ , cioè  $H|\nu\rangle = \hbar\omega_\nu|\nu\rangle$ . Sia  $A$  un'osservabile definita dal seguente problema agli autovalori, anche esso non degeneri nello stesso spazio di Hilbert:  $A|n\rangle = a_n|n\rangle$ . Supponiamo che inizialmente il sistema è in un autostato  $|\nu\rangle$  di  $H$  e supponiamo di fare una misura dell'osservabile  $A$ . Qual è il valore di aspettazione di  $A$  e quale è la probabilità di trovare  $a_m$  come risultato della misura? Se il valore che si ottiene nella misura è  $a_m$  e la misura viene poi ripetuta dopo un intervallo di tempo  $t$ , qual è la probabilità di trovare di nuovo il valore  $a_m$ ? (Vedi Ref.[4] n. 12).

Inizialmente il sistema è nell'autostato  $|\nu\rangle$  di  $H$ . Se si sceglie come base dello spazio di Hilbert l'insieme di autostati dell'osservabile  $A$  e si sfrutta la relativa relazione dell'identità, si ottengono le seguenti espressioni  $|\nu\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\nu\rangle$  e, analogamente per il bra rispettivo  $\langle\nu| = \sum_{n'} \langle\nu|n'\rangle\langle n'|$ .

Il valor medio dell'operatore  $\hat{A}$  nello stato iniziale è, quindi, dato da:

$$\langle \nu | \hat{A} | \nu \rangle = \sum_n \sum_{n'} \langle \nu | n' \rangle \langle n' | \hat{A} | n \rangle \langle n | \nu \rangle = \sum_n a_n |\langle n | \nu \rangle|^2$$

in cui si è tenuto conto della relazione di ortonormalità degli autovettori di  $A$ :  $\langle n' | n \rangle = \delta_{n'n}$ . La probabilità di trovare  $a_m$  come risultato della misura è quindi:

$$P_m = |\langle m | \nu \rangle|^2$$

Una volta effettuata la misura di  $\hat{A}$  e ottenuto il valore di  $a_m$  il sistema non è più nell'autostato  $|\nu\rangle$  di  $H$ , ma nello stato  $|m\rangle$ . Lo stato, perciò, evolve nel tempo secondo l'equazione di Schrödinger  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |t\rangle = \hat{H} |t\rangle$  dove  $|t=0\rangle = |m\rangle$ . Quindi facendo agire l'operatore di evoluzione temporale sullo stato  $|m\rangle$ , e proiettando questa volta sulla base degli autovettori dell'hamiltoniana, si ottiene:

$$|t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |m\rangle = \sum_{\mu} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |\mu\rangle \langle \mu | m \rangle = \sum_{\mu} e^{-i\omega_{\mu} t} |\mu\rangle \langle \mu | m \rangle$$

Se al tempo  $t$  si fa una seconda misura di  $\hat{A}$ , la probabilità di ritrovare  $a_m$  è, quindi, data da:

$$P'_m = |\langle m | t \rangle|^2 = \left| \sum_{\mu} e^{-i\omega_{\mu} t} \langle m | \mu \rangle \langle \mu | m \rangle \right|^2 = \left| \sum_{\mu} e^{-i\omega_{\mu} t} |\langle m | \mu \rangle|^2 \right|^2$$

**6. Sistemi a due livelli: Trattazione Generale.** I sistemi a due livelli rivestono un ruolo fondamentale in meccanica quantistica, non soltanto per la semplicità della loro trattazione, ma anche perchè in vari casi è possibile ricondurre ad essi dei sistemi fisici reali. Ad esempio, supponiamo di avere un sistema che ha due livelli energetici molto vicini tra loro e di essere interessati a studiare l'effetto della perturbazione esterna sui due livelli. Se la perturbazione è abbastanza piccola si può studiare l'effetto trascurando tutti gli altri livelli energetici; tutti i calcoli verranno, perciò, eseguiti in un sottospazio 2-D dello spazio degli stati del sistema. Vediamo come si studia in generale un sistema a due livelli. (Vedi Ref.[1] pag.405-415).

Consideriamo un sistema con hamiltoniano  $\hat{H}_0$  e scegliamo come base dello spazio degli stati i due autostati  $|\phi_1\rangle$  e  $|\phi_2\rangle$  di  $\hat{H}_0$ . Si ha quindi:  $\hat{H}_0 |\phi_1\rangle = E_1 |\phi_1\rangle$ ,  $\hat{H}_0 |\phi_2\rangle = E_2 |\phi_2\rangle$  ed inoltre  $\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle = 0$ ,  $\langle \phi_1 | \phi_1 \rangle = \langle \phi_2 | \phi_2 \rangle = 1$ . Adesso studiamo gli effetti sul sistema di una perturbazione esterna  $\hat{W}$ . La nuova Hamiltoniana è  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$ . Dobbiamo quindi determinare i due autovettori  $|\psi_+\rangle$  e  $|\psi_-\rangle$  che soddisfano le equazioni:

$$\begin{aligned} \hat{H} |\psi_+\rangle &= E_+ |\psi_+\rangle \\ \hat{H} |\psi_-\rangle &= E_- |\psi_-\rangle \end{aligned}$$

Nella base  $\{|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle\}$ ,  $\hat{H}_0$  e  $\hat{W}$  sono rappresentate dalle due matrici hermitiane:

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} \quad \hat{W} = \begin{pmatrix} W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & W_{22} \end{pmatrix}$$

dove  $W_{11}$  e  $W_{22}$  sono reali, e inoltre  $W_{12} = W_{21}^\dagger$ .

Le conseguenze della perturbazione sono essenzialmente due:



In uno spazio N-dim  
un operatore  
Hermitiano  
ha sempre N  
autovettori lin. indep.  
quindi con questi si  
può formare una base

- 1) Le possibili energie del sistema non sono piú  $E_1$  e  $E_2$  ma  $E_+$  ed  $E_-$ .  
 2)  $\phi_1$  e  $\phi_2$  non sono piú stati stazionari. Se, ad esempio, a  $t = 0$  il sistema è in  $\phi_1$  vi è una certa probabilità di trovare al tempo  $t$  il sistema in  $\phi_2$ . È per questo motivo che  $\hat{W}$  è chiamato *coupling*, visto che induce transizioni tra i due livelli imperturbati. Per risolvere il problema agli autovalori, bisogna diagonalizzare  $\hat{H}$ , rappresentata, nella base  $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle\}$ , dalla matrice

$$\hat{H}_0 = \begin{array}{cc} E_1 + W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & E_2 + W_{22} \end{array}$$

Si ottengono cosí i seguenti risultati:

$$\begin{aligned} E_{\pm} &= \frac{1}{2}(E_1 + W_{11} + E_2 + W_{22}) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22})^2 + 4|W_{12}|^2} \\ |\psi_+\rangle &= \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\phi}{2}}|\phi_1\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\phi}{2}}|\phi_2\rangle \\ |\psi_-\rangle &= -\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\phi}{2}}|\phi_1\rangle + \cos\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\phi}{2}}|\phi_2\rangle \end{aligned}$$

$$\text{dove } \tan\theta = \frac{2|W_{12}|}{E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22}} \quad \text{con } 0 \leq \theta < \pi \quad \text{e} \quad W_{12} = |W_{12}|e^{i\phi}$$

Tutti gli effetti interessanti vengono dagli elementi non diagonali di  $W$ , cioè da  $W_{12}$  e  $W_{21}$ . Infatti se avessimo solo  $W_{11}$  e  $W_{22}$  diversi da zero, gli autostati di  $\hat{H}$  sarebbero gli stessi di  $\hat{H}_0$ , però con energie  $E_1 + W_{11}$  ed  $E_2 + W_{22}$ .

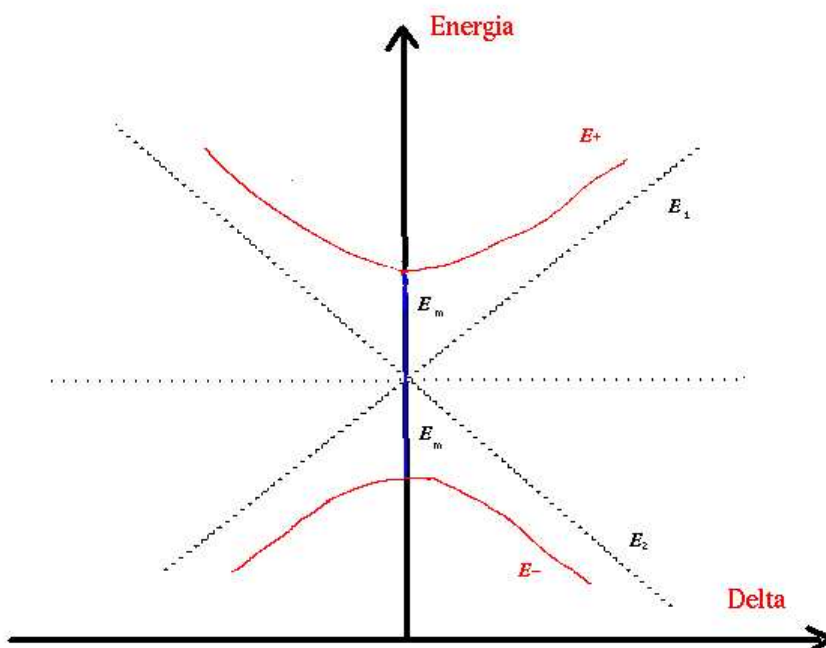
Quindi per semplificare le cose poniamo  $W_{11} = W_{22} = 0$ . Si ottiene:

$$E_{\pm} = \frac{1}{2}(E_1 + E_2) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}$$

Assumendo che  $W_{12}$  è fisso, e definendo:

$$\begin{aligned} E_m &\equiv \frac{1}{2}(E_1 + E_2) \\ \Delta &\equiv \frac{1}{2}(E_1 - E_2) \end{aligned}$$

si ha  $E_{\pm} = E_m \pm \sqrt{\Delta^2 + |W_{12}|^2}$ , relazione rappresentata nella figura seguente. La dipendenza di  $E_+$  ed  $E_-$  da  $E_m$  consiste in un semplice shift dello zero dell'energia. La dipendenza di  $E_+$  ed  $E_-$  da  $\Delta$  mostra invece che l'effetto del *coupling* è molto piú importante quando i due livelli imperturbati hanno la stessa energia o energia simile, e meno importante quando i due livelli hanno energia molto diversa (vedi figura).



7. **Sistemi a due livelli: Esercizio Esame 04-11-1996.** Un sistema quantistico si trova a  $t = 0$  nello stato fondamentale della Hamiltoniana  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$  data da

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \epsilon & 0 \\ 0 & 2\epsilon \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & V \\ V & 0 \end{pmatrix} \quad \text{con} \quad V = \sqrt{2}\epsilon \quad \text{ed} \quad \epsilon < 0$$

All'istante  $t=0$  la perturbazione viene rimossa. Calcolare all'istante  $t > 0$  la probabilità che il sistema si trovi nell'autostato dell'Hamiltoniana  $\hat{H}_0$  con autovalore  $\epsilon$ .

Nella base  $\{|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle\}$  degli autostati dell'Hamiltoniana imperturbata  $\hat{H}_0$ , si hanno le equazioni agli autovalori  $\hat{H}_0|\phi_1\rangle = \epsilon|\phi_1\rangle$  e  $\hat{H}_0|\phi_2\rangle = 2\epsilon|\phi_2\rangle$  con

$$|\phi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |\phi_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Nella stessa base, l'Hamiltoniana perturbata assume la forma:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \epsilon & V \\ V & 2\epsilon \end{pmatrix}$$

Per calcolare gli autostati di  $\hat{H}$  dobbiamo risolvere il problema:  $\hat{H}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$ . Risolvendo l'equazione  $\det(\hat{H} - \lambda I) = 0$  si ottengono gli autovalori  $\lambda_1 = 0$  e  $\lambda_2 = 3\epsilon$ . Gli autovettori corrispondenti (normalizzati) sono:

$$|\psi_1\rangle = -\sqrt{\frac{2}{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad |\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \sqrt{\frac{2}{3}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

All'istante  $t = 0$  il sistema si trova quindi nello stato

$$|\psi_{t=0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \sqrt{\frac{2}{3}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Quando la perturbazione viene spenta lo stato evolve per effetto di  $\hat{H}_0$ , ed al tempo  $t > 0$  il sistema si trova nello stato:

$$|\psi_t\rangle = e^{-i\frac{\hat{H}_0}{\hbar}t}|\psi_{t=0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \sqrt{\frac{2}{3}}e^{-i\frac{2\epsilon}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

e quindi la probabilità che il sistema si trovi nell'hamiltoniana  $\hat{H}_0$  con autovalore  $\epsilon$  è data da:

$$P = |\langle\phi_1|\psi_t\rangle|^2 = |(1 \ 0) \left[ \frac{1}{\sqrt{3}}e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \sqrt{\frac{2}{3}}e^{-i\frac{2\epsilon}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right]|^2 = \frac{1}{3}$$

**8. Pacchetto d'onda di minima indeterminazione: la funzione d'onda di migliore compromesso.** Determinare la forma di  $\psi(x)$  per la quale si realizza il miglior compromesso tra la precisione nella misura della posizione e la precisione nella misura dell'impulso.

Consideriamo una particella in moto unidimensionale. Dobbiamo determinare lo stato  $\psi$  della particella per il quale si ha:

$$(\delta x)_\psi (\delta p)_\psi = \frac{\hbar}{2}$$

dove

$$(\hat{\Delta}x) = \hat{x} - \langle\hat{x}\rangle_\psi = \hat{x} - \bar{x} \quad (\hat{\Delta}p) = \hat{p} - \langle\hat{p}\rangle_\psi = \hat{p} - \bar{p}$$

e

$$(\delta x)_\psi = \sqrt{\langle(\hat{\Delta}x)^2\rangle_\psi} = \sqrt{\langle\hat{x}^2\rangle_\psi - \langle\hat{x}\rangle_\psi^2} \quad (\delta p)_\psi = \sqrt{\langle(\hat{\Delta}p)^2\rangle_\psi} = \sqrt{\langle\hat{p}^2\rangle_\psi - \langle\hat{p}\rangle_\psi^2}$$

Innanzitutto, vediamo come si ricava la relazione di indeterminazione di Heisenberg:

$$(\delta x)_\psi (\delta p)_\psi \geq \frac{\hbar}{2}$$

Per fare questo definiamo:

$$|\psi_x\rangle = (\hat{x} - \langle\hat{x}\rangle_\psi)|\psi\rangle = (\hat{\Delta}x)|\psi\rangle \quad |\psi_p\rangle = (\hat{p} - \langle\hat{p}\rangle_\psi)|\psi\rangle = (\hat{\Delta}p)|\psi\rangle$$

Inoltre, osserviamo che si ha la relazione:

$$2i \operatorname{Im} \langle \psi_x | \psi_p \rangle = \langle \psi | [(\hat{x} - \bar{x}), (\hat{p} - \bar{p})] | \psi \rangle = i\hbar \quad \rightarrow \quad \operatorname{Im} \langle \psi_x | \psi_p \rangle = \frac{\hbar}{2} \quad (1.1)$$

e la relazione:

$$\operatorname{Im} \langle \psi_x | \psi_p \rangle \leq |\langle \psi_x | \psi_p \rangle| \leq \| |\psi_x\rangle \| \cdot \| |\psi_p\rangle \| = (\delta x)_\psi (\delta p)_\psi$$

nella quale si è fatto uso della disuguaglianza di Schwartz. Da queste due espressioni si ottiene la relazione di indeterminazione di Heisenberg  $(\delta x)_\psi (\delta p)_\psi \geq \frac{\hbar}{2}$ .

Per avere la relazione di indeterminazione verificata in senso stretto cioè per avere  $(\delta x)_\psi (\delta p)_\psi = \frac{\hbar}{2}$ , bisogna che siano valide le due espressioni di prima con il segno di uguaglianza. Ovvero devono essere verificate le seguenti due condizioni:

- 1)  $\operatorname{Im} \langle \psi_x | \psi_p \rangle = \operatorname{Im} \langle \psi | \hat{\Delta}x \hat{\Delta}p | \psi \rangle = |\langle \psi | \hat{\Delta}x \hat{\Delta}p | \psi \rangle| \implies \langle \psi | \hat{\Delta}x \hat{\Delta}p | \psi \rangle = i\alpha \quad \alpha \in \mathbb{R}$
- 2)  $\langle \psi | \hat{\Delta}x \hat{\Delta}p | \psi \rangle = \sqrt{\langle (\hat{\Delta}x)^2 \rangle_\psi} \sqrt{\langle (\hat{\Delta}p)^2 \rangle_\psi} \implies \langle \hat{\Delta}p | \psi \rangle = \beta \langle \hat{\Delta}x | \psi \rangle$

Dalla relazione 2) si ottiene  $\langle x | (\hat{\Delta}p) | \psi \rangle = \beta \langle x | (\hat{\Delta}x) | \psi \rangle$ , e di conseguenza  $\langle x | \hat{P} | \psi \rangle - \bar{p} \psi(x) = \beta(x - \bar{x}) \psi(x)$ . Nella rappresentazione delle coordinate questa equazione corrisponde all'equazione differenziale:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x) = \bar{p} + \beta(x - \bar{x}) \psi(x) \quad (1.2)$$

la cui soluzione è:

$$\psi(x) = A e^{\frac{i}{\hbar} [(\bar{p} - \beta \bar{x})x + \frac{1}{2} \beta x^2]}$$

Ritornando alla relazione 1) si ha:

$$i\alpha = \langle \psi | \hat{\Delta}x \hat{\Delta}p | \psi \rangle = \int dx \langle \psi | (\hat{x} - \bar{x}) | x \rangle \langle x | (\hat{p} - \bar{p}) | \psi \rangle = \dots = \beta (\delta x)_\psi^2 \quad (1.3)$$

in cui l'ultimo passaggio è stato ottenuto sfruttando l'equazione (1.2).

Poichè :

$$i\alpha = \langle \psi | \hat{\Delta}x \hat{\Delta}p | \psi \rangle$$

ed inoltre, per l'equazione (1.1),:

$$\operatorname{Im} \langle \psi | \hat{\Delta}x \hat{\Delta}p | \psi \rangle = \frac{\hbar}{2}$$

si ottiene:

$$\alpha = \frac{\hbar}{2}$$

In definitiva dalla (1.3) si ottiene:

$$\beta (\delta x)_\psi^2 = i \frac{\hbar}{2} \implies \beta = i \frac{\hbar}{2 (\delta x)_\psi^2} = i \frac{\hbar}{a^2}$$

dove si è definito  $a^2 = 2 (\delta x)_\psi^2$ .

Riprendendo la funzione d'onda trovata prima ed usando questi ultimi risultati, si ottiene:

$$\psi(x) = A e^{\frac{i}{\hbar} [(\bar{p} - \beta \bar{x})x + \frac{1}{2} \beta x^2]} = A e^{\frac{i}{\hbar} \bar{p}x} e^{\frac{i}{\hbar} (-\beta)(x\bar{x} - \frac{a^2}{2})} e^{-\frac{\hbar}{2a^2}(x^2 - 2x\bar{x} + \bar{x}^2 - \bar{x}^2)}$$

e raccogliendo le costanti

$$\psi(x) = B e^{\frac{i}{\hbar} \bar{p} x} e^{-\frac{(x-\bar{x})^2}{2a^2}}$$

In tale espressione la costante  $B$  è determinata dalla condizione di normalizzazione ed è pari a  $B^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi a^2}}$ . Riassumendo, la funzione d'onda per la quale si realizza il miglior compromesso tra la precisione di misura della posizione e la precisione di misura dell'impulso è rappresentata da una gaussiana:

$$\psi(x) = [2\pi(\delta x)_\psi^2]^{-\frac{1}{4}} e^{\frac{i}{\hbar} \bar{p} x} e^{-\frac{(x-\bar{x})^2}{2(\delta x)_\psi^2}}$$

Analogamente nello spazio degli impulsi si trova:

$$\psi(p) = [2\pi(\delta p)_\psi^2]^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{i}{\hbar} \bar{x} p} e^{-\frac{(p-\bar{p})^2}{2(\delta p)_\psi^2}}$$

## Capitolo 2

# Buche di Potenziale

### 1. Formule Utili

Si consideri una buca di potenziale a pareti infinite tale che  $V(x) = 0$  per  $0 < x < L$  e  $V(x) = +\infty$  per  $x \leq 0$  e  $x \geq L$ . Le autofunzioni e le autoenergie rispettive sono date da:

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.1)$$

2. **Distribuzione di impulso in una buca di potenziale a pareti infinite.** Una particella si trova in uno stato stazionario di una buca di di potenziale infinita di larghezza  $a$  (cioè  $V(x) = 0$  per  $0 < x < a$  e  $V(x) = \infty$  per i restanti valori di  $x$ ).
- a) Calcolare e disegnare la distribuzione in momento  $P(p)$ . Mostrare che per grandi energie i risultati che si ottengono sono in accordo con il limite classico.
- b) Calcolare  $\langle p \rangle$ ,  $\langle p^2 \rangle$  e  $\delta p$ .

In una buca di potenziale a pareti infinite, lo spettro dell'energia è quantizzato con autovalori  $E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$  e con le rispettive autofunzioni  $\phi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$ . Per calcolare la distribuzione di probabilità dei momenti, bisogna prima ottenere l'espressione per la funzione d'onda nello spazio degli impulsi:

$$\begin{aligned} \phi_n(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-i\frac{p}{\hbar}x} \phi_n(x) = \\ &= \frac{1}{2i} \sqrt{\frac{a}{\pi\hbar}} \exp^{i(\frac{n\pi}{2} - \frac{a}{2\hbar}p)} [F(p - \frac{n\pi\hbar}{a}) + (-1)^n F(p + \frac{n\pi\hbar}{a})] \end{aligned}$$

L'ultima relazione è stata ottenuta utilizzando le formule di Eulero per risolvere e semplificare l'integrale. La funzioni

$$F(p) = \frac{\sin(p\frac{a}{2\hbar})}{p\frac{a}{2\hbar}}$$

è detta *funzione di diffrazione*. Si può notare che formula che ci dà  $\phi_n(p)$  contiene una combinazione di due funzioni di diffrazione, la prima di queste centrata a  $p = \frac{n\pi\hbar}{a}$  e la

seconda a  $p = -\frac{n\pi\hbar}{a}$ . Inoltre la larghezza di queste funzioni è uguale a  $\frac{4\pi\hbar}{a}$  e quindi non dipende da  $n$ . Il grafico di  $\phi_n(p)$  per diversi valori di  $n$  si può trovare a pagg. 271-273 di Ref.[1]. Dal grafico si può osservare che per grandi energie la larghezza relativa dei due *picchi* diminuisce e questi risultano centrati nei valori  $p = \pm \frac{n\pi\hbar}{a}$ , in accordo con il limite classico. Infatti, classicamente, si ha:  $\frac{p_{class.}^2}{2m} = E = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$  e quindi:

$$p_{class.} = \pm \frac{n\pi\hbar}{a}$$

Per quanto riguarda il calcolo di  $\langle p \rangle$ ,  $\langle p^2 \rangle$  e  $\delta p$ , valgono le seguenti relazioni:

$$\begin{aligned}\langle p \rangle_n &= \int_{-\infty}^{+\infty} p |\phi_n(p)|^2 dp \\ \langle p^2 \rangle_n &= \int_{-\infty}^{+\infty} p^2 |\phi_n(p)|^2 dp\end{aligned}$$

Si può vedere facilmente che  $\langle p \rangle_n = 0$ , dal momento che si tratta di un integrale di una funzione dispari (infatti  $|\phi_n(p)|^2$  è una funzione pari di  $p$  essendo il modulo quadro di una funzione pari per  $n$  dispari e dispari per  $n$  pari. D'altra parte valutare il secondo integrale è molto più complicato).

Dal punto di vista dei calcoli, è invece più conveniente valutare le quantità richieste facendo uso della funzione d'onda nello spazio delle coordinate. Per il primo integrale si ottiene:

$$\begin{aligned}\langle p_n \rangle &\equiv \langle \phi_n | \hat{p} | \phi_n \rangle = \int dx \langle \phi_n | x \rangle \langle x | \hat{p} | \phi_n \rangle = -i\hbar \int dx \phi_n^*(x) \frac{d}{dx} \phi_n(x) \\ &= -i\hbar \int_0^a dx \frac{2n\pi}{a^2} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) = 0\end{aligned}$$

Per il secondo integrale si ottiene:

$$\begin{aligned}\langle p^2 \rangle_n &\equiv \langle \phi_n | \hat{p}^2 | \phi_n \rangle = \int dx \langle \phi_n | x \rangle \langle x | \hat{p}^2 | \phi_n \rangle = -i\hbar \int dx \phi_n^*(x) \frac{d^2}{dx^2} \phi_n(x) \\ &= -\hbar^2 [\phi_n^*(x) \frac{d}{dx} \phi_n(x)]_0^a - (-\hbar^2) \int_0^a \frac{d}{dx} \phi_n(x) \frac{d}{dx} \phi_n^*(x) dx = \\ &= \hbar^2 \int_0^a \left| \frac{d}{dx} \phi_n(x) \right|^2 dx = \hbar^2 \frac{2n^2\pi^2}{a^3} \int_0^a \cos^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = \hbar^2 \frac{n^2\pi^2}{a^2}\end{aligned}$$

In definitiva quindi,  $\delta p_n = \frac{n\pi\hbar}{a}$ .

3. **Esercizio Esame 22-2-2002.** Una particella si trova confinata nello stato fondamentale di una buca infinita unidimensionale di larghezza  $l$ . La buca venga portata istantaneamente alla larghezza  $2l$ . Determinare la probabilità di transizione allo stato fondamentale della nuova buca.

La particella si trova inizialmente in uno stato  $|\psi_1\rangle$  descritto dalla funzione d'onda:

$$\psi_1(x) = \langle x | \psi_1 \rangle = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{\pi x}{l}\right) & \text{per } 0 \leq x \leq l \\ 0 & \text{per } x < 0 \quad x > l \end{cases}$$

Lo stato fondamentale della nuova buca  $|\psi_2\rangle$  è descritto dalla funzione d'onda:

$$\psi_2(x) = \langle x|\psi_2\rangle = \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{l}} \sin\left(\frac{\pi x}{2l}\right) & \text{per } 0 \leq x \leq l \\ 0 & \text{per } x < 0 \quad x > l \end{cases}$$

L'esercizio chiede di calcolare la probabilità:

$$P = |\langle \psi_2|\psi_1\rangle|^2$$

Dobbiamo quindi valutare il seguente integrale:

$$\langle \psi_2|\psi_1\rangle = \int_0^{2l} \psi_1(x)\psi_2^*(x)dx = \frac{\sqrt{2}}{l} \int_0^l \sin\left(\frac{\pi x}{l}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{2l}\right)dx$$

Con un cambio di variabile e facendo uso della formula seguente:

$$\int \sin(ax) \sin(cx)dx = \frac{\sin(a-c)x}{2(a-c)} - \frac{\sin(a+c)x}{2(a+c)}$$

Si ottiene  $\langle \psi_2|\psi_1\rangle = \frac{4}{3} \frac{\sqrt{2}}{\pi}$  e quindi la probabilità richiesta è:

$$P = \frac{32}{9\pi^2}$$

4. **Esercizio Esame 28-1-2002.** Una particella di massa  $m$  e carica  $q$  è vincolata a muoversi su un'orbita circolare di raggio  $R$ . Considerando il problema quantistico unidimensionale del moto lungo la coordinata  $s$  dell'orbita, calcolare autofunzioni e autoenergie della particella e quindi il momento di dipolo magnetico della spira  $\mu$  ( $\mu$  = area dell'orbita · corrente).

Per calcolare autofunzioni  $\psi(s)$  con  $0 \leq s < 2\pi$  e autoenergie  $E$  della particella dobbiamo risolvere l'equazione differenziale:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{ds^2} \psi(s) = E\psi(s)$$

con le opportune condizioni al contorno. La soluzione generica di questa equazione è del tipo  $\psi(s) = Ce^{\pm iks}$ . La quantizzazione dell'energia deriva proprio dalle condizioni al contorno:

$$\psi(s) = \psi(s + 2\pi R) \quad \forall s \in ]0, 2\pi]$$

che sono soddisfatte se  $k = \frac{n}{R}$  con  $n = 0, 1, 2, \dots$ , e che quindi implicano:

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{2mR^2} \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Le rispettive autofunzioni sono del tipo:

$$\psi(s) = Ce^{\pm i \frac{n}{R} s}$$

Determinando la costante di normalizzazione  $C$  di modo che  $\int_0^{2\pi R} |\psi(s)|^2 ds = 1$  si ottiene:

$$\psi(s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi R}} e^{\pm i \frac{n}{R} s}$$



In realtà in  $\psi(s)$  c'è un ulteriore fattore di fase che si determina fissando il valore di  $\psi(0)$

Per calcolare il momento di dipolo magnetico  $\mu$  della spira, definito come prodotto dell'area dell'orbita per la corrente, dobbiamo valutare l'espressione:

$$\mu = \pi R^2 \cdot \frac{q}{T}$$

dove la corrente, cioè la carica che passa nell'unità di tempo, è uguale a  $q$  diviso per il tempo  $T$  che la particella impiega per compiere un giro. Poichè  $T = \frac{2\pi R}{v}$  dove  $v$  è la velocità, si ottiene:

$$\mu = \frac{q\hbar}{2m} n$$

## Capitolo 3

# Oscillatore Armonico

### 1. Generalità sull Oscillatore Armonico (OA).

Il più semplice esempio di un oscillatore armonico è quello di una particella di massa  $m$  che si muove in un potenziale quadratico del tipo  $V(x) = 1/2kx^2$ , cioè di una particella che si muove soggetta ad una forza di richiamo  $F = -\frac{dV(x)}{dx} = -kx$  diretta lungo l'asse delle  $x$  e verso l'origine  $O$  ( $x = 0$ ). Classicamente il moto che ne risulta è una oscillazione sinusoidale intorno ad  $O$  con frequenza angolare:

$$\omega \equiv \sqrt{\frac{k}{m}}$$

L'oscillatore armonico riveste un ruolo di primaria importanza in fisica, e trova applicazioni ed esempi nei più svariati settori. Per capire il motivo di questa estrema diffusione basta dire che un generico sistema nelle vicinanze di un punto di equilibrio stabile ha equazioni del moto che in prima approssimazione, cioè per piccole oscillazioni, sono quelle dell'oscillatore armonico. Infatti dato un generico potenziale  $V(x)$  è sempre possibile effettuare uno sviluppo in serie di Taylor intorno ad un punto  $x_0$  di minimo. Per  $x \in ]x_0 - \delta, x_0 + \delta[$  abbiamo:

$$\begin{aligned} V(x) &= V(x_0) + \frac{\partial V(x)}{\partial x} \Big|_{x=x_0} (x - x_0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V(x)}{\partial x^2} \Big|_{x=x_0} (x - x_0)^2 + \\ &+ \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 V(x)}{\partial x^3} \Big|_{x=x_0} (x - x_0)^3 + \dots \end{aligned}$$

Dato che  $x_0$  è un punto di minimo la derivata prima in  $x_0$  è nulla e quindi il primo termine non nullo è quello quadratico. Per  $\delta$  sufficientemente piccolo possiamo approssimare il potenziale come

$$\begin{aligned} V(x) &\approx V(x_0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V(x)}{\partial x^2} \Big|_{x=x_0} (x - x_0)^2 \\ &= a + \frac{1}{2} k (x - x_0)^2 \end{aligned} \tag{3.1}$$

e quindi il moto risulta essere una oscillazione sinusoidale di frequenza  $\omega = \sqrt{\frac{1}{m} \frac{\partial^2 V(x)}{\partial x^2} |_{x=x_0}}$ . A questo punto è comprensibile che sistemi fisici di varia natura si comportano come oscillatori armonici. Segue una lista di alcuni degli esempi principali:

1) *La vibrazione dei nuclei di una molecola diatomica.* Infatti il potenziale di interazione fra i due atomi ha una parte attrattiva di tipo Van der Waals ( $V(r) \approx -\frac{1}{r^6}$ ), e un hard core repulsivo a corto raggio dovuto alla repulsione fra i nuclei. Per distanze intermedie il potenziale ha un punto di minimo legato all'overlap fra le nubi atomiche che è responsabile dell'esistenza degli stati legati. Per piccole oscillazioni intorno a questo punto di minimo si può considerare uno sviluppo in serie di potenze come visto sopra ed arrestarsi al termine quadratico.

2) *La vibrazione dei nuclei atomici in un cristallo.* Per semplicità consideriamo un reticolo unidimensionale. Il nucleo  $i$ -esimo all'equilibrio occupa la posizione  $x_i^0 = id$ , dove  $d$  è il passo reticolare. In prima approssimazione il potenziale del sistema si può scrivere come:  $U(x_1, x_2, \dots) \approx U_0 + \sum_i \frac{1}{2}(x_i - x_i^0)^2 U_0''$ , quindi il sistema è descritto da una serie di oscillatori armonici indipendenti. In questa prima approssimazione non abbiamo considerato le interazioni fra gli atomi, ma anche accendendo l'interazione si potrà lo stesso scrivere  $H$  come una somma di Hamiltoniane di oscillatori armonici indipendenti (questo porterà al concetto di fononi, un concetto fondamentale per la fisica dello stato solido).

3) *Le oscillazioni di torsione di una molecola di etilene.* L'etilene  $C_2H_4$  consiste in una molecola planare costituita da un asse principale  $C - C$ . Ad ognuno dei due atomi di carbonio sono legati due atomi di idrogeno che formano fra di loro e rispetto al carbonio tre angoli di 120 gradi. La molecola di etilene quindi all'equilibrio sta su di un piano, ma può spostarsi da questa condizione di equilibrio ruotando intorno all'asse  $C - C$  di un angolo  $\alpha$  e avvertendo un potenziale di richiamo che ha un andamento del tipo  $V(\alpha) = V_0/2(1 - \cos 2\alpha)$ . Per piccole oscillazioni questo potenziale è ben approssimato da un potenziale di tipo armonico.

4) *Il campo elettromagnetico in una cavità (la radiazione di corpo nero).* In una cavità esistono un numero infinito di onde stazionarie detti modi normali della cavità. Il campo elettromagnetico può essere espanso in funzione di questi modi e dalle equazioni di Maxwell si vede che i coefficienti dell'espansione soddisfano un'equazione differenziale identica a quella di un oscillatore armonico con una frequenza  $\omega$  associata ad ogni modo normale. Quindi il campo elettromagnetico è equivalente ad un insieme di oscillatori armonici indipendenti.

## 2. Richiami di Teoria: OA classico vs quantistico

L'Hamiltoniana di un oscillatore armonico classico è:

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

L'equazione del moto  $m \frac{d^2 x}{dt^2} = -kx$  ha come soluzione generale:  $x(t) = x_m \cos(\omega t - \phi)$  dove  $x_m$  e  $\phi$  sono determinate dalle condizioni iniziali. In pratica quello che succede se consideriamo il sistema da un punto di vista classico è che, una volta che abbiamo fissato l'energia totale  $E$  (qualunque valore di  $E > 0$  è possibile), il sistema si muove da  $-x_m$  a  $x_m$  (dove  $x_m = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$ ), spendendo più tempo nelle vicinanze di  $-x_m$  e di  $x_m$  poiché in

prossimit  di questi punti, che sono i punti di inversione del moto, il moto   pi  lento. Se consideriamo il problema da un punto di vista quantistico dobbiamo sostituire le variabili  $x$  e  $p$  con gli operatori autoaggiunti  $\hat{x}$  e  $\hat{p}$ , che soddisfano le regole di commutazione  $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ , e determinare autovalori ed autovettori dell'operatore Hamiltoniano  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$ . Prima di passare al problema matematico della risoluzione del problema quantistico enunciamo i risultati che otterremo in modo da confrontarli con quelli classici:

- 1) Gli autovalori di  $\hat{H}$  sono positivi ( $E > 0$ ).
- 2) Non tutti i valori di energia sono possibili come nel caso classico ma solo alcuni valori ben precisi. Si dice che lo spettro in energia   discreto, e i valori consentiti sono  $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$  dove  $n = 0, 1, 2, \dots$
- 3) Le autofunzioni hanno una parit  ben definita, o sono pari o sono dispari. I valori medi quantistici  $\langle \hat{x} \rangle$  e  $\langle \hat{p} \rangle$  sono uguali a zero (cosi come le medie temporali della posizione e dell'impulso classici  $\bar{x}_{class}$  e  $\bar{p}_{class}$ ) e non cambiano nel tempo.
- 4) Nell'oscillatore armonico quantistico si ha effetto tunnel, cio  una probabilit  non nulla che la particella si trovi nella regione classicamente non consentita.
- 5) Il numero di zeri delle autofunzioni aumenta al crescere dell'energia.

### 3. Richiami di Teoria: il metodo operatoriale di Dirac.

Come abbiamo gi  detto l'oscillatore armonico quantistico   definito dall'operatore Hamiltoniano:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \quad (3.2)$$

dove  $\hat{x}$  e  $\hat{p}$  sono operatori autoaggiunti (hermitiani) che soddisfano le seguenti regole di commutazione  $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ .

Il problema che dobbiamo risolvere   il seguente problema agli autovalori:

$$\begin{aligned} \hat{H}|u_\alpha\rangle &= E_\alpha|u_\alpha\rangle \\ \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2\right)|u_\alpha\rangle &= E_\alpha|u_\alpha\rangle \end{aligned}$$

Per fare questo utilizzeremo un metodo algebrico proposto originariamente da Dirac. Definiamo altri 3 operatori, funzioni degli operatori  $\hat{x}$  e  $\hat{p}$ :

$$\hat{a} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega}\right) \quad (3.3)$$

$$\hat{a}^\dagger \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega}\right) \quad (3.4)$$

$$\hat{N} \equiv \hat{a}^\dagger\hat{a} \quad (3.5)$$

i primi due,  $\hat{a}$  e  $\hat{a}^\dagger$ , detti rispettivamente operatore di distruzione e operatore di creazione, sono degli operatori non-hermitiani, mentre il terzo, l'operatore numero  $\hat{N}$ ,   un operatore

hermitiano. Si prova facilmente che fra i tre operatori appena definiti valgono le seguenti regole di commutazione:

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad [\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a} \quad [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \quad (3.6)$$

È possibile invertire le definizioni di  $\hat{a}$  ed  $\hat{a}^\dagger$  date sopra ed esprimere gli operatori  $\hat{x}$ ,  $\hat{p}$  e quindi  $\hat{H}$  in funzione di  $\hat{a}$  ed  $\hat{a}^\dagger$ :

$$\hat{x} \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \quad (3.7)$$

$$\hat{p} \equiv i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \quad (3.8)$$

$$\hat{H} \equiv \hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}) = \hbar\omega(\hat{N} + \frac{1}{2}) = \hbar\omega(\hat{a}\hat{a}^\dagger - \frac{1}{2}) \quad (3.9)$$

Abbiamo quindi trovato un'importante relazione fra operatore numero  $\hat{N}$  ed  $\hat{H}$  che ci permette di trasformare il problema della determinazione degli autovalori ed autovettori di  $\hat{H}$  nel problema della determinazione degli autovalori ed autovettori dell'operatore numero. Infatti l'equazione:

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$$

implica:

$$\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})|n\rangle$$

Risolviamo quindi il problema agli autovalori per  $\hat{N}$ . Per prima cosa si prova, utilizzando le regole di commutazione fra  $\hat{a}$ ,  $\hat{a}^\dagger$  e  $\hat{N}$ , che valgono le due seguenti relazioni:

$$\begin{aligned} \hat{N}(\hat{a}^\dagger|n\rangle) &= (n+1)(\hat{a}^\dagger|n\rangle) \\ \hat{N}(\hat{a}|n\rangle) &= (n-1)(\hat{a}|n\rangle) \end{aligned}$$

Questo significa che se  $|n\rangle$  è un autostato di  $\hat{N}$  con autovalore  $n$ , allora  $\hat{a}^\dagger|n\rangle$  è autostato di  $\hat{N}$  con autovalore  $n+1$ , e  $\hat{a}|n\rangle$  è autostato di  $\hat{N}$  con autovalore  $n-1$ . Comprendiamo adesso il motivo per cui gli operatori  $\hat{a}^\dagger$  e  $\hat{a}$  sono stati nominati operatori di creazione e di distruzione: perchè rispettivamente creano o distruggono un quanto di energia  $\hbar\omega$ . In pratica abbiamo:

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger|n\rangle &\propto |n+1\rangle = c_1|n+1\rangle \\ \hat{a}|n\rangle &\propto |n-1\rangle = c_2|n-1\rangle \end{aligned}$$

Le costanti  $c_1$  e  $c_2$  si ottengono dalle condizioni di normalizzazione degli stati  $|n\rangle$ :

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (3.10)$$

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (3.11)$$

A questo punto si prova (noi qui non daremo la dimostrazione), che  $n$  è un numero intero non negativo e che sia il ground state che gli altri stati sono non degeneri.

L'autostato  $|0\rangle$ , che soddisfa la relazione  $\hat{a}|0\rangle = 0$  e quindi  $\hat{N}|0\rangle = 0$ , è lo stato fondamentale di  $\hat{H}$  con energia  $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ . Tutti gli altri autostati possono essere ricavati applicando iterativamente un numero  $n$  di volte l'operatore di creazione  $\hat{a}^\dagger$  a  $|0\rangle$ . Si ottiene:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= \hat{a}^\dagger|0\rangle \\ |2\rangle &= \frac{\hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}}|1\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^2}{\sqrt{2}}|0\rangle \\ |3\rangle &= \frac{\hat{a}^\dagger}{\sqrt{3}}|2\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^3}{\sqrt{3!}}|0\rangle \\ \dots & \dots \\ |n\rangle &= \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle \end{aligned}$$

dove  $|n\rangle$  è l'autostato di  $\hat{H}$  con energia  $E_n = (\frac{1}{2} + n)\hbar\omega$ .

Passiamo adesso a ricavare le autofunzioni  $u_n(x) \equiv \langle x|n\rangle$ . Al solito procediamo in maniera iterativa a partire da  $u_0(x) \equiv \langle x|0\rangle$ . Consideriamo la relazione che definisce il ground state:  $\hat{a}|0\rangle = 0$ . Moltiplicando a sinistra per  $\langle x|$  otteniamo:

$$\langle x|\hat{a}|0\rangle = 0 = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \langle x|\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega}|0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx}\right) \langle x|0\rangle$$

L'equazione da risolvere per determinare  $u_0(x)$  è quindi un'equazione differenziale del primo ordine:

$$\left(x + x_0^2 \frac{d}{dx}\right)u_0(x) = 0 \quad x_0^2 \equiv \frac{\hbar}{m\omega}$$

La soluzione, considerando anche il corretto fattore di normalizzazione, è:

$$u_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \quad (3.12)$$

A questo punto le altre funzioni d'onda possono essere ricavate in maniera iterativa da  $u_0(x)$ , con delle semplici operazioni di derivazione. Infatti ripetendo esattamente gli stessi argomenti adoperati sopra si ottiene:

$$\begin{aligned} u_1(x) &= \langle x|1\rangle = \langle x|\hat{a}^\dagger|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}x_0} \left(x - x_0^2 \frac{d}{dx}\right) u_0(x) = \left[\frac{4}{\pi} \left(\frac{m\omega}{\hbar^3}\right)^3\right]^{1/4} x e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \\ u_2(x) &= \langle x|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle x|(\hat{a}^\dagger)^2|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2!}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}x_0}\right)^2 \left(x - x_0^2 \frac{d}{dx}\right)^2 u_0(x) \\ \dots & \dots \\ u_n(x) &= \langle x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{1}{x_0}\right)^n \left(x - x_0^2 \frac{d}{dx}\right)^n u_0(x) \end{aligned}$$

Le funzioni d'onda date sopra sono perfettamente normalizzate cioè abbiamo  $\int_{-\infty}^{+\infty} |u_n(x)|^2 dx =$

1. Il modulo quadro della funzione d'onda  $|u_n(x)|^2$  ci da quindi la probabilità  $P(x)$  di

trovare la particella al punto  $x$ . Questa probabilità è  $\forall n$  una funzione simmetrica rispetto all'origine (come è giusto che sia data la simmetria del potenziale). Inoltre per valori grandi di  $n$ , si può provare che l'involuppo di questa distribuzione di probabilità ha un andamento molto simile alla distribuzione di probabilità classica, che, come dicevamo prima, è massima nei punti di inversione del moto  $-x_m$  e di  $x_m$ . Quindi per grande valori di  $n$  si ottiene il limite classico: la meccanica quantistica dà risultati in accordo con quelli classici. Utilizzando l'espressione di  $\hat{x}$  e di  $\hat{p}$  in funzione di  $\hat{a}$  e  $\hat{a}^\dagger$ , e conoscendo come questi ultimi operatori agiscono sugli stati  $|n\rangle$  si possono calcolare i valori medi:

$$\langle n|\hat{x}|n\rangle = 0 \quad (3.13)$$

$$\langle n|\hat{p}|n\rangle = 0 \quad (3.14)$$

$$\langle n|\hat{x}^2|n\rangle = (n + \frac{1}{2})\frac{\hbar}{m\omega} \quad (3.15)$$

$$\langle n|\hat{p}^2|n\rangle = (n + \frac{1}{2})m\hbar\omega \quad (3.16)$$

e quindi:

$$(\delta x)_n^2 = \langle n|\hat{x}^2|n\rangle - \langle n|\hat{x}|n\rangle^2 = (n + \frac{1}{2})\frac{\hbar}{m\omega} \quad (3.17)$$

$$(\delta p)_n^2 = \langle n|\hat{p}^2|n\rangle - \langle n|\hat{p}|n\rangle^2 = (n + \frac{1}{2})m\hbar\omega \quad (3.18)$$

$$(\delta x)_n^2 (\delta p)_n^2 = \hbar^2 (n + \frac{1}{2})^2 \quad (3.19)$$

In particolare usando la definizione di  $x_0$  data prima,  $x_0^2 = \frac{\hbar}{m\omega}$ , si ottiene:  $(\delta x)_n^2 = (n + \frac{1}{2})x_0^2$ . Adesso si capisce il significato fisico della quantità  $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$  che può essere interpretata come la dimensione spaziale tipica dell'oscillatore quantistico: in particolare nel caso del ground state si ha:  $(\delta x)_0 = \sqrt{\frac{1}{2}}x_0$ .

Inoltre, sempre nel ground state, otteniamo:  $(\delta x)_0(\delta p)_0 = \frac{\hbar}{2}$ , cioè il ground state è uno stato per cui valgono le relazioni d'indeterminazione nelle condizioni di indeterminazione minime, e questo è dovuto proprio al fatto che la funzione d'onda del ground state ha una forma gaussiana.

#### 4. Richiami di Teoria: Risoluzione dell'equazione differenziale

L'equazione di Schrödinger stazionaria per l'oscillatore armonico unidimensionale rappresenta uno dei pochi casi che si sa risolvere esattamente. Il potenziale dell'oscillatore, come abbiamo già visto, è dato da  $\hat{V}(x) = \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$  e l'equazione agli autovalori dell'hamiltoniano,  $\hat{H}|u\rangle = E|u\rangle$ , nella rappresentazione delle coordinate, ha la seguente espressione:

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2]\langle x|u\rangle = E\langle x|u\rangle \quad (3.20)$$

Introducendo la variabile  $\zeta = \frac{x}{x_0} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ , dove  $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ , l'equazione assume la forma più semplice:

$$\frac{d^2}{d\zeta^2}u(\zeta) + [\frac{2E}{\hbar\omega} - \zeta^2]u(\zeta) = 0 \quad (3.21)$$

Nel risolvere questa equazione, vogliamo trovare i valori di  $E$  per i quali l'equazione possiede soluzioni regolari nei due limiti dell'intervallo  $]-\infty, \infty[$ , ovvero in modo tale che la funzione d'onda  $u(\zeta)$  abbia norma finita. In generale, si dice che si sta analizzando lo spettro discreto di un hamiltoniano quando si studiano gli autovalori  $E < \lim_{x \rightarrow \infty} V(x)$ . Nel caso dell'oscillatore armonico unidimensionale  $\lim_{x \rightarrow \infty} V(x) = +\infty$  e quindi si ha solo uno spettro discreto, che peraltro è definito positivo, dal momento che l'hamiltoniano è la somma di due operatori definiti positivi.

Studiamo prima il comportamento asintotico della funzione d'onda per  $\zeta \rightarrow +\infty$ , per cui l'equazione (3.21) assume la forma semplificata

$$\frac{d^2}{d\zeta^2} u(\zeta) - \zeta^2 u(\zeta) = 0$$

Questa equazione differenziale ordinaria del secondo ordine, ha come soluzione asintotica

$$u(\zeta) = e^{-\frac{\zeta^2}{2}}$$

(la soluzione con l'esponenziale positivo viene esclusa perchè divergente). Cerchiamo quindi una soluzione dell'equazione (3.21) nella forma  $u(\zeta) = F(\zeta)e^{-\frac{\zeta^2}{2}}$ . Sostituendo questa espressione e ponendo  $(\frac{2E}{\hbar\omega} - 1) \equiv 2n$  l'equazione differenziale per  $F(\zeta)$  diventa:

$$F'' - 2\zeta F' + 2nF = 0$$

nota come equazione differenziale di Hermite. Si hanno i seguenti casi:

- 1) Se  $n \in R$ ,  $n \notin N_0$ , la soluzione per  $\zeta \rightarrow +\infty$  va come  $e^{\zeta^2}$ , e quindi  $u(\zeta)$  va come  $e^{\frac{\zeta^2}{2}}$  e non è accettabile perchè divergente.
  - 2) Se invece  $n \in N_0$ , allora  $F(\zeta)$  si comporta come un polinomio e quindi per  $\zeta \rightarrow \infty$   $u(\zeta) = F(\zeta)e^{-\frac{\zeta^2}{2}}$  risulta accettabile, in quanto convergente.
- In quest'ultimo caso si ha dunque  $\frac{2E}{\hbar\omega} = 2n + 1$ , cioè  $E = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$  e le soluzioni dell'equazione di Hermite sono i polinomi di Hermite:

$$F_n(\zeta) = H_n(\zeta) \equiv (-1)^n e^{\zeta^2} \frac{d^n}{d\zeta^n} (e^{-\zeta^2})$$

In definitiva, tenendo conto della normalizzazione, le autofunzioni dell'oscillatore armonico unidimensionale sono date da:

$$u_n(\zeta) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{2^{\frac{n}{2}} \sqrt{n!}} H_n(\zeta) e^{-\frac{\zeta^2}{2}} \quad \zeta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

5. **Esercizio Esame 1-10-1993** Dimostrare che per un oscillatore armonico vale la regola di somma:

$$\sum_{n'} (E_{n'} - E_n) |\langle n' | \hat{x} | n \rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{2m}$$

in cui  $|n\rangle$  sono gli autostati ed  $E_n$  i corrispondenti autovalori dell'energia.

Usando il metodo operatoriale, tramite gli operatori di creazione e di annichilazione, possiamo scrivere l'operatore posizione come  $\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$ . Dalla relazione precedente, e ricordando che  $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$  e  $\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ , si ottiene:

$$\begin{aligned}\langle n'|\hat{x}|n\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}[\langle n'|\hat{a}|n\rangle + \langle n'|\hat{a}^\dagger|n\rangle] \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n}\delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{n',n+1})\end{aligned}$$

Quindi si ha:

$$\begin{aligned}&\sum_{n'}(E_{n'} - E_n)|\langle n'|\hat{x}|n\rangle|^2 = \\ &= \sum_{n'}(E_{n'} - E_n)\frac{\hbar}{2m\omega}[n\delta_{n',n-1} + (n+1)\delta_{n',n+1} + 2\sqrt{n(n+1)}\delta_{n',n-1}\delta_{n',n+1}] = \\ &= (E_{n-1} - E_n)\frac{\hbar}{2m\omega}n + (E_{n+1} - E_n)\frac{\hbar}{2m\omega}(n+1) = \frac{\hbar^2}{2m}\end{aligned}$$

6. **Oscillatore carico in un campo elettrico uniforme.** Studiare il problema di una particella di massa  $m$  e carica  $q$  soggetta ad un potenziale di oscillatore armonico  $V(x) = 1/2m\omega^2x^2$  e sottoposto ad un campo elettrico uniforme e diretto lungo l'asse delle  $x$ . (Vedi Ref.[1] pag.552).

L'hamiltoniana del sistema è data da:

$$\hat{H}' = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 - q\zeta\hat{x} = \hat{H}_{O.A.} - q\zeta\hat{x}$$

essendo  $\hat{W} = -q\zeta\hat{x}$  l'energia potenziale della particella in presenza del campo elettrico  $\zeta$ . L'equazione agli autovalori si scrive, perciò,  $\hat{H}'|\psi'\rangle = E'|\psi'\rangle$  e nella rappresentazione delle coordinate diventa:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 - q\zeta x\right]\psi'(x) = E'\psi'(x)$$

Ponendo  $u = x - \frac{q\zeta}{m\omega^2}$  l'equazione assume la forma nota di un oscillatore armonico 1D nella coordinata  $u$ , data da

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{du^2} + \frac{1}{2}m\omega^2u^2\right]\psi'(u) = E''\psi'(u)$$

con  $E'' = E' + \frac{q^2\zeta^2}{2m\omega^2} = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ , per quanto noto dalla teoria sull'oscillatore armonico, e quindi  $E' = E'' - \frac{q^2\zeta^2}{2m\omega^2} = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega - \frac{q^2\zeta^2}{2m\omega^2}$ .

Per quanto riguarda le autofunzioni, esse sono le stesse dell'oscillatore armonico in assenza di campo elettrico ma in funzione della variabile  $u$ , ovvero sono rappresentate dalle funzioni d'onda  $\psi'_n(u) = \psi_n(x - \frac{q\zeta}{m\omega^2})$ .

Perciò il campo elettrico ha avuto solo l'effetto di creare uno shift nello spettro dei livelli energetici e di traslare le funzioni d'onda dell'oscillatore armonico.

Questi risultati rivestono grande importanza nello studio dei fenomeni fisici, in quanto, ad esempio, permettono di spiegare la suscettibilità elettrica di un elettrone assunto legato elasticamente ad un atomo o ad una molecola.

Infatti il contributo di un elettrone al momento di dipolo elettrico dell'atomo è dato da  $D = qx$  e in assenza di campo elettrico si ha  $\langle \hat{D} \rangle = q\langle \phi_n | \hat{x} | \phi_n \rangle = 0$ . In presenza del campo elettrico, invece,  $\langle \hat{D} \rangle = q\langle \phi'_n | \hat{x} | \phi'_n \rangle = q \int_{-\infty}^{+\infty} dx x |\phi'_n(x)|^2 = \frac{q^2 \zeta}{m\omega^2}$ . L'effetto del campo elettrico  $\zeta$  consiste nello shift della posizione di equilibrio e quindi si crea un momento di dipolo elettrico indotto. Si definisce, poi, la suscettibilità come  $\chi = \frac{\langle \hat{D} \rangle}{\zeta} = \frac{q^2}{m\omega^2}$ , quantità che decresce con  $\omega$  perchè l'oscillatore armonico è tanto meno facilmente deformabile quanto più grande è la forza di richiamo ( $\propto \omega^2$ ).

7. **Esercizio Esami 28-1-2002.** Qual è la probabilità di trovare un oscillatore armonico quantistico unidimensionale di massa  $m$  e frequenza  $\omega$  nelle regioni classicamente proibite? Considerare solo il caso in cui l'oscillatore armonico si trova nello stato fondamentale.

Le regioni classicamente proibite sono delimitate dai punti di inversione, al di là dei quali l'energia cinetica, quantità definita positiva, assumerebbe valori negativi. In formule ciò è dato da

$$E = \frac{1}{2}m\omega^2 x_m^2 \quad e \quad x_m = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$$

Nello stato fondamentale dell'oscillatore armonico unidimensionale l'energia è data da  $E = \frac{\hbar\omega}{2}$  e perciò  $x_m = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ ; inoltre, questo stato è descritto dalla funzione d'onda  $u_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2}$ . La probabilità di trovare la particella nella zona classicamente proibita è data da

$$P(|x| > |x_m|) = 2 \int_{x_m}^{+\infty} |u_0(x)|^2 dx = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_1^{+\infty} e^{-y^2} dy \simeq 0.157$$

8. **OA in 3D.** Oscillatore armonico tridimensionale isotropo in coordinate cartesiane (Vedi Ref.[1] pag.547)

Si consideri un oscillatore armonico tridimensionale, di massa  $m$ , soggetto ad una forza centrale  $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -k\mathbf{r}$  dove  $\mathbf{r}$  è la distanza da un punto  $O$ , posto all'origine del sistema di riferimento  $Oxyz$ .

Per questo sistema, l'hamiltoniano è  $\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{r}^2$  e l'invarianza per rotazione del potenziale  $V(r)$  giustifica l'aggettivo isotropo dato all'oscillatore in questione. Questo aspetto ci permette di sfruttare il fatto che lo spazio degli stati di una particella in 3D può essere visto come prodotto tensoriale degli spazi degli stati di una particella in 1D, ovvero  $\zeta_r = \zeta_x \otimes \zeta_y \otimes \zeta_z$ .

(per la definizione e le proprietà dei prodotti tensoriali vedi Ref.[1] pag. 154-156).

Sfruttando tale proprietà di simmetria del problema, possiamo scrivere l'hamiltoniano come:

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z$$

dove i tre operatori  $\hat{H}_x, \hat{H}_y, \hat{H}_z$  sono un'estensione in  $\zeta_r$  del rispettivo operatore nello spazio degli stati 1D, con espressioni

$$\hat{H}_x = \frac{\hat{P}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}^2 \quad \hat{H}_y = \frac{\hat{P}_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{y}^2 \quad \hat{H}_z = \frac{\hat{P}_z^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{z}^2$$

L'equazione agli autovalori  $\hat{H}|\phi\rangle = E|\phi\rangle$  si scompone, perciò, nelle tre equazioni:

$$\begin{aligned}\hat{H}_x|\psi_{n_x}\rangle &= (n_x + \frac{1}{2})\hbar\omega|\psi_{n_x}\rangle \\ \hat{H}_y|\psi_{n_y}\rangle &= (n_y + \frac{1}{2})\hbar\omega|\psi_{n_y}\rangle \\ \hat{H}_z|\psi_{n_z}\rangle &= (n_z + \frac{1}{2})\hbar\omega|\psi_{n_z}\rangle\end{aligned}$$

mentre gli autostati comuni ad  $\hat{H}$ ,  $\hat{H}_x$ ,  $\hat{H}_y$ ,  $\hat{H}_z$  (commutanti tra loro) sono:

$$|\psi_{n_x, n_y, n_z}\rangle = |\psi_{n_x}\rangle |\psi_{n_y}\rangle |\psi_{n_z}\rangle$$

Quindi l'equazione agli autovalori per  $\hat{H}$  dell'oscillatore 3D isotropo è data da:

$$\hat{H}|\psi_{n_x, n_y, n_z}\rangle = (n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2})\hbar\omega|\psi_{n_x, n_y, n_z}\rangle \quad (3.22)$$

con energie  $E_n = (n + \frac{3}{2})\hbar\omega$  ed  $n = n_x + n_y + n_z = 0, 1, 2, \dots$   
ed autofunzioni

$$\psi_{n_x, n_y, n_z}(r) = \psi_{n_x}(x) \psi_{n_y}(y) \psi_{n_z}(z) \quad (3.23)$$

Infine resta da valutare la degenerazione dei livelli energetici. Sia  $g_n$  il numero dei diversi set  $\{n_x, n_y, n_z\}$  che verificano la relazione  $n_x + n_y + n_z = n$ . Ora fissiamo  $n$  e diamo a  $n_x$  uno dei valori  $0, 1, 2, 3, \dots$ ; quindi avremo  $n_y + n_z = n - n_x$ . Per le coppie  $\{n_y, n_z\}$  rimangono le possibilità  $\{0, n - n_x\}, \{1, n - n_x - 1\}, \dots, \{n - n_x, 0\}$ , in numero pari a  $(n - n_x + 1)$ .

Quindi la degenerazione dei livelli dell'oscillatore armonico 3D isotropo è pari a

$$g_n = \sum_{n_x=0}^n (n - n_x + 1) = \frac{(n+1)(n+2)}{2} \quad (3.24)$$

9. **Esercizio Esame 22-2-2002.** Un oscillatore armonico lineare unidimensionale di massa  $m$  e frequenza  $\omega$  si trova in uno stato rappresentato dalla funzione d'onda:

$$\Psi(x) = A(1 + \sqrt{\alpha}x) \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2} \quad \alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$$

con  $A$  costante di normalizzazione. Determinare:

- I possibili valori in una misura dell'energia, e la probabilità di ottenerli.
- Il valore medio dell'energia.
- La funzione d'onda al generico istante  $t$ .
- Il valore medio della posizione al tempo  $t$ .

Suggerimento: Notare che  $\Psi(x)$  è la sovrapposizione della funzione d'onda dello stato fondamentale  $\Psi_0(x)$  e del primo stato eccitato  $\Psi_1(x)$ . E provare che  $|A|^2 = 2/3$ .

a) Le funzioni d'onda dello stato fondamentale e del primo stato eccitato dell'oscillatore armonico sono:

$$\psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \quad \psi_1 = \left[\frac{4}{\pi}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)\right]^{\frac{1}{4}} x e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2}$$

La funzione d'onda del sistema si può scrivere come  $\psi(x) = A\psi_0(x) + \frac{A}{\sqrt{2}}\psi_1(x)$ , da cui, imponendo la condizione di normalizzazione e sfruttando l'ortonormalità delle autofunzioni dell'oscillatore armonico, si ha che  $|A|^2 + \frac{|A|^2}{2} = 1$  e quindi  $A = \sqrt{\frac{2}{3}}$ , assumendo  $A$  reale. Quindi se misuro l'energia del sistema posso ottenere il valore  $E = \frac{\hbar\omega}{2}$  con probabilità  $|A|^2 = \frac{2}{3}$  ed il valore  $E = \frac{3\hbar\omega}{2}$  con probabilità  $\frac{|A|^2}{2} = \frac{1}{3}$ .

b) Il valor medio dell'Hamiltoniana è perciò, banalmente,  $\langle \hat{H} \rangle = \frac{2}{3}\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{1}{3}\frac{3\hbar\omega}{2} = \frac{5}{6}\hbar\omega$ .

c) Al generico istante  $t$ , la funzione d'onda è pari a

$$\psi_t(x) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\psi_0(x) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\left[A\psi_0(x) + \frac{A}{\sqrt{2}}\psi_1(x)\right] = Ae^{-\frac{i}{\hbar}E_0t}\psi_0(x) + \frac{A}{\sqrt{2}}e^{-\frac{i}{\hbar}E_1t}\psi_1(x)$$

d) Il valor medio della posizione al tempo  $t$  si ottiene, ricordando che

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$$

$$\langle n' | \hat{x} | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}[\langle n' | \hat{a} | n \rangle + \langle n' | \hat{a}^\dagger | n \rangle] = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n} \delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{n',n+1})$$

e in particolare  $\langle 1 | \hat{x} | 0 \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(1 \cdot \delta_{1,1}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$ .

Il valor medio è perciò dato da:

$$\begin{aligned} \langle \hat{x} \rangle &= \int x |\psi(x,t)|^2 dx = \frac{A^2}{\sqrt{2}} \left[ e^{i\omega t} \int x \psi_0(x) \psi_1(x)^* dx + e^{-i\omega t} \int x \psi_1(x) \psi_0(x)^* dx \right] = \\ &= \frac{A^2}{\sqrt{2}} \left[ e^{i\omega t} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} + e^{-i\omega t} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \right] = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \cos \omega t \end{aligned}$$

#### 10. Stati Coerenti: Esercizio Esame 10-9-1992. Si consideri lo stato:

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_n \frac{\alpha^n}{n!} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle \quad (3.25)$$

in cui  $|0\rangle$  è lo stato fondamentale di un OA,  $\hat{a}^\dagger$  il corrispondente operatore di creazione di un quanto, e  $\alpha$  è un numero complesso. Lo stato  $|\alpha\rangle$  è detto stato coerente.

- a) Provare che  $|\alpha\rangle$  è autostato dell'operatore di annichilazione:  $\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$   
 b) Calcolare l'indeterminazione di posizione ed impulso nello stato  $|\alpha\rangle$ .

a) Per provare che  $|\alpha\rangle$  soddisfa la relazione  $\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$ , tramite le relazioni  $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ ,  $\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$  e  $|n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$ , vediamo qual è l'azione dell'operatore di annichilazione sullo stato  $|\alpha\rangle$

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \hat{a} \left[ e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_n \frac{\alpha^n}{n!} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle \right] = \hat{a} \left[ e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \right] = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \sqrt{n} |n-1\rangle =$$

$$= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{(n-1)!}} |n-1\rangle = \alpha e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_n \frac{\alpha^{n-1}}{\sqrt{(n-1)!}} |n-1\rangle = \alpha |\alpha\rangle$$

b) Per calcolare l'indeterminazione di impulso e di posizione, ricordiamo che

$$\begin{aligned} \hat{a}|\alpha\rangle &= \alpha|\alpha\rangle & \langle\alpha|\hat{a}^\dagger &= \alpha^*\langle\alpha| \\ \hat{x} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) & \hat{p} &= i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \end{aligned}$$

Allora si ha:

$$\begin{aligned} \langle\hat{x}\rangle_\alpha &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}[\langle\alpha|\hat{a}^\dagger|\alpha\rangle + \langle\alpha|\hat{a}|\alpha\rangle] = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\text{Re}(\alpha) \\ \langle\hat{p}\rangle_\alpha &= i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}[\alpha^* - \alpha] = \sqrt{2m\hbar\omega} \text{Im}(\alpha) \end{aligned}$$

Per calcolare i valori medi dei quadrati degli operatori posizione ed impulso, si fa uso della relazione di commutazione tra  $\hat{a}$  e  $\hat{a}^\dagger$ , ovvero  $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$  e si ottiene

$$\hat{x}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}(\hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a})$$

$$\langle\hat{x}^2\rangle_\alpha = \frac{\hbar}{2m\omega}[\alpha^{*2} + \alpha^2 + 2\alpha\alpha^* + 1] = \frac{\hbar}{2m\omega}[(\alpha^* + \alpha)^2 + 1] = \frac{\hbar}{2m\omega}[(2\text{Re}(\alpha))^2 + 1]$$

$$\hat{p}^2 = -\frac{m\omega\hbar}{2}(\hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger)^2 - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a})$$

$$\langle\hat{p}^2\rangle_\alpha = -\frac{m\omega\hbar}{2}[\alpha^{*2} + \alpha^2 - 2\alpha\alpha^* - 1] = \frac{m\omega\hbar}{2}[1 - (\alpha - \alpha^*)^2] = \frac{m\omega\hbar}{2}[1 - (2i\text{Im}(\alpha))^2]$$

Quindi si ha:

$$\delta x_\alpha = \langle x^2 \rangle_\alpha - \langle x \rangle_\alpha^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \quad \delta p_\alpha = \langle p^2 \rangle_\alpha - \langle p \rangle_\alpha^2 = \frac{m\omega\hbar}{2}$$

Il prodotto dell'indeterminazioni di impulso e di posizione è perciò:

$$(\delta x_\alpha)(\delta p_\alpha) = \frac{\hbar}{2} \quad (3.26)$$

È possibile apprezzare l'importanza degli stati coerenti se si osserva che i valori medi degli operatori posizione ed impulso, calcolati in uno stato coerente, oscillano sinusoidalmente nel tempo, come le analoghe quantità per l'oscillatore classico. Infatti, se si studia l'evoluzione temporale degli stati coerenti, si ottiene (Vedi Ref.[1] pag.559).

$$|\alpha_t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\alpha_0\rangle = e^{-\frac{i\alpha_0^2 t}{2}} \sum_n \frac{\alpha_0^n}{\sqrt{n!}} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|n\rangle = e^{-\frac{i\omega t}{2}} |\alpha\rangle = \alpha_0 e^{-i\omega t} \quad (3.27)$$

Come si può notare da quest'ultima relazione, lo stato coerente  $|\alpha_0\rangle$ , al passare del tempo, evolve nello stato  $\alpha_0 e^{-i\omega t}$ . Usando le relazioni precedenti per i valori medi si ottiene

$$\langle\hat{x}\rangle_{\alpha_0 e^{-i\omega t}} = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\text{Re}(\alpha_0 e^{-i\omega t}) \quad \langle\hat{p}\rangle_{\alpha_0 e^{-i\omega t}} = \sqrt{2m\hbar\omega} \text{Im}(\alpha_0 e^{-i\omega t}) \quad (3.28)$$

# Capitolo 4

## Momento Angolare

### 1. Brevi Richiami di Teoria sul Momento Angolare.

In meccanica quantistica un momento angolare è in generale ogni set di 3 osservabili  $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$  che soddisfano le seguenti regole di commutazione:

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z \quad [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar\hat{J}_x \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar\hat{J}_y \quad (4.1)$$

Si definisce l'operatore:

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 \quad (4.2)$$

che soddisfa le seguenti regole di commutazione:

$$[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_x] = [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_y] = [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_z] = 0 \quad [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{\mathbf{J}}] = 0 \quad (4.3)$$

Poichè le componenti di  $\hat{\mathbf{J}}$  non commutano fra di loro, non sono diagonalizzabili simultaneamente. Si cercano invece gli autostati comuni a  $\hat{\mathbf{J}}^2$  e  $\hat{J}_z$ . Per fare questo si fa uso degli operatori di scala definiti come

$$\hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y \quad \hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y \quad (4.4)$$

L'operatore  $\hat{\mathbf{J}}^2$  espresso in funzione degli operatori di scala e di  $\hat{J}_z$  è:

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \frac{1}{2}(\hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_-\hat{J}_+) + \hat{J}_z^2 \quad (4.5)$$

Gli operatori di scala sono uno l'aggiunto dell'altro e soddisfano le seguenti regole di commutazione:

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_+] = \hbar\hat{J}_+ \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_-] = -\hbar\hat{J}_- \quad (4.6)$$

$$[\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hbar\hat{J}_z \quad (4.7)$$

$$[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_+] = [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_-] = [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_z] = 0 \quad (4.8)$$

Se si indicano con  $|j, m\rangle$  gli autostati simultanei di  $\hat{\mathbf{J}}^2$  ed  $\hat{J}_z$ , si ha:

$$\hat{\mathbf{J}}^2|j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2|j, m\rangle \quad (4.9)$$

$$\hat{J}_z|j, m\rangle = m\hbar|j, m\rangle \quad (4.10)$$

I valori possibili di  $j$  sono lo zero, i numeri interi e seminteri positivi:  $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$ , mentre per  $j$  fissato i valori possibili di  $m$  sono i  $(2j+1)$  numeri  $m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$ . Si ha inoltre:

$$\hat{J}_+|j, m\rangle = \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}|j, m+1\rangle \quad (4.11)$$

$$\hat{J}_-|j, m\rangle = \hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}|j, m-1\rangle \quad (4.12)$$

## 2. Momento Angolare Orbitale.

Si dice momento angolare orbitale (da distinguere dal momento angolare di spin) e si indica con  $\hat{\mathbf{L}}$ , ogni momento angolare che ha un equivalente classico. Il momento angolare di una particella è l'operatore:

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} \quad (4.13)$$

le cui componenti sono:

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \quad \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \quad \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \quad (4.14)$$

e soddisfano le seguenti regole di commutazione:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y \quad (4.15)$$

Nella rappresentazione delle coordinate  $\{|\mathbf{r}\rangle\} = \{|xyz\rangle\}$  gli operatori  $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ , assumono la forma seguente:

$$L_x = \frac{\hbar}{i}(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}) \quad L_y = \frac{\hbar}{i}(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}) \quad L_z = \frac{\hbar}{i}(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) \quad (4.16)$$

È più conveniente lavorare in coordinate polari (sferiche)  $\{|r\theta\phi\rangle\}$  anzichè in coordinate cartesiane  $\{|xyz\rangle\}$ . L'espressione degli operatori in questa rappresentazione è:

$$L_x = i\hbar(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}) \quad L_y = i\hbar(-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\sin\phi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}) \quad L_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi} \quad (4.17)$$

$$\mathbf{L}^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) \quad (4.18)$$

Si prova che:

$$\mathbf{L}^2 Y_l^m(\theta, \phi) = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\theta, \phi) \quad (4.19)$$

$$L_z Y_l^m(\theta, \phi) = m\hbar Y_l^m(\theta, \phi) \quad (4.20)$$

cioè che le armoniche sferiche  $Y_l^m(\theta, \phi)$  sono le autofunzioni simultanee degli operatori  $\mathbf{L}^2$  e  $L_z$ , rispettivamente con autovalori  $l(l+1)\hbar^2$  e  $m\hbar$ . Si prova inoltre che  $l$  ed  $m$  sono interi

con  $m$  che prende tutti i valori da  $-l$  ad  $l$  a passi di un'unità.  
L'espressione generale delle armoniche sferiche è:

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}} e^{im\phi} (\sin \theta)^{-m} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l} \quad (4.21)$$

Le armoniche sferiche per  $l = 0, 1, 2$  sono rispettivamente:

$$l = 0 \quad Y_0^0(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad (4.22)$$

$$l = 1 \quad \begin{cases} Y_1^{\pm 1}(\theta, \phi) &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi} \\ Y_1^0(\theta, \phi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \end{cases} \quad (4.23)$$

$$l = 2 \quad \begin{cases} Y_2^{\pm 2}(\theta, \phi) &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi} \\ Y_2^{\pm 1}(\theta, \phi) &= \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi} \\ Y_2^0(\theta, \phi) &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) \end{cases} \quad (4.24)$$

Fra le proprietà più importanti delle armoniche sferiche:

- ortonormalizzazione, cioè:  $\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_l^{m*}(\theta, \phi) Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$
- completezza [1]
- parità ben definita: dispari se  $l$  è dispari, pari se  $l$  è pari [1].
- vale la formula di ricorrenza (spesso utile negli esercizi):

$$\cos \theta Y_l^m(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}} Y_{l+1}^m(\theta, \phi) + \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}} Y_{l-1}^m(\theta, \phi) \quad (4.25)$$

**3. Rotazione di una molecola biatomica** Una molecola biatomica è costituita da due atomi di massa  $m_1 > m_2$ . Supponiamo che la distanza fra  $m_1$  ed  $m_2$  sia fissa ed uguale ad  $r_e$  e che quindi la molecola, a causa dell'agitazione termica, possa solo ruotare intorno al suo CM e non vibrare.

- Calcolare autovalori ed autofunzioni dell'energia.
- Qual è lo stato quantistico più generale del rotatore al tempo  $t$ .
- Valutare l'elemento di matrice  $\langle lm | \hat{z} | l'm' \rangle$  dove  $\hat{z}$  è l'osservabile che corrisponde alla proiezione sull'asse  $z$  del segmento che descrive la molecola.

Si è essenzialmente seguito Ref.[1] pagg.712 e seguenti. Fare attenzione al cambio di coordinate ed alla trasformazione del sistema in studio nel moto di una particella di massa ridotta  $\mu$  che ruota a velocità  $\omega$  ad una distanza  $r_e$  dal centro.

4. **Esercizio Esame 11-7-2000.** Un rotatore rigido con simmetria assiale ha momenti di inerzia  $I_x = I_y$  ed  $I_z$  ed è descritto dall'hamiltoniana:

$$\hat{H} = \frac{1}{2I_x}(L_x^2 + L_y^2) + \frac{1}{2I_z}L_z^2$$

dove  $L_{x,y,z}$  sono gli operatori di momento angolare riferiti agli assi del rotatore.

- a) Calcolare autovalori ed autostati dell'hamiltoniana.  
 b) Se lo stato del rotatore al tempo  $t = 0$  è  $|l = 3, m = 0\rangle$ , qual è la probabilità che una misura di  $L_z$  dopo un tempo  $t$  dia il valore  $\hbar$  ?

a) Si può scrivere:

$$\hat{H} = \frac{L^2}{2I_x} + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{I_z} - \frac{1}{I_x}\right)L_z^2$$

Dato che:

$$\begin{aligned}\hat{L}^2|l, m\rangle &= l(l+1)\hbar^2|l, m\rangle \\ \hat{L}_z|l, m\rangle &= m\hbar|l, m\rangle\end{aligned}$$

gli autostati di  $\hat{H}$  sono gli autostati  $|l, m\rangle$  simultanei di  $\hat{L}^2$  ed  $\hat{L}_z$ . Gli autovalori  $E_{ml}$  sono dati da

$$\begin{aligned}\hat{H}|l, m\rangle &= \frac{L^2}{2I_x}|l, m\rangle + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{I_z} - \frac{1}{I_x}\right)L_z^2|l, m\rangle \\ &= \left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2I_x} + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{I_z} - \frac{1}{I_x}\right)m^2\hbar^2\right]|l, m\rangle = E_{ml}|l, m\rangle\end{aligned}$$

b) A  $t = 0$  il sistema è nello stato  $|l, m\rangle = |3, 0\rangle$ , cioè in un autostato dell'Hamiltoniana con energia  $E_{30}$ . Dopo un tempo  $\Delta t$  il sistema sarà nello stato:  $|\psi\rangle_{\Delta t} = e^{-i/\hbar E_{30}\Delta t}|3, 0\rangle$ . Affinchè una misura di  $\hat{L}_z$  dia il valore  $\hbar$  allora il sistema deve avere componenti nello stato  $|l, 1\rangle$ . Ma  $\langle l, 1|e^{-i/\hbar E_{30}\Delta t}|3, 0\rangle = 0$ , quindi la probabilità richiesta è uguale a zero.

5. **Esercizio Esame 3-4-2002.** Una particella si trova in uno stato rappresentato dalla seguente funzione d'onda:

$$\Psi(x, y, z) = f(r)(r + x + y + z)$$

dove  $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ . Determinare quali sono i possibili risultati di una misura della proiezione del momento angolare lungo una qualunque delle tre direzioni spaziali, e quali sono le probabilità di ottenerli.



Riuscite a provarlo ?  
 Riuscite cioè a  
 misurare la proiezione  
 di  $L$  lungo  $x$  e  $y$  ?  
 Si tratta di diagonalizzare  
 le matrici  $L_x$  e  $L_y$   
 nella base degli autostati  
 di  $L^2$  ed  $L_z$

Dato che la funzione d'onda è invariante per una permutazione delle variabili  $x, y$  e  $z$ , misurando la proiezione del momento angolare lungo una qualunque delle tre direzioni spaziali otterremo gli stessi risultati, con le stesse probabilità. Supponiamo quindi di misurare la proiezione del momento angolare lungo  $z$ .

Esprimiamo per prima cosa la funzione d'onda in coordinate polari:

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \phi \\ y = r \sin \theta \sin \phi \\ z = r \cos \theta \end{cases}$$

Si ha:

$$\Psi(r, \theta, \phi) = f(r)r[1 + \sin \theta \cos \phi + \sin \theta \sin \phi + \cos \theta]$$

È possibile a questo punto esprimere la parte angolare delle funzione d'onda in termini delle armoniche sferiche. Ci basterà fare uso delle armoniche sferiche con  $l = 0$  ed  $l = 1$ . Vedi eq.(4.22) e eq.(4.23):

$$Y_0^0(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$\begin{cases} Y_1^1(\theta, \phi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi} \\ Y_1^{-1}(\theta, \phi) = +\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\phi} \\ Y_1^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \end{cases}$$

Facendo uso di:

$$\begin{aligned} e^{-i\phi} &= \cos \phi - i \sin \phi \\ e^{i\phi} &= \cos \phi + i \sin \phi \end{aligned}$$

si ottiene:

$$\begin{aligned} \Psi(r, \theta, \phi) = f(r)r \quad [ & \sqrt{4\pi}Y_0^0(\theta, \phi) + \sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_1^0(\theta, \phi) + (1+i)\sqrt{\frac{2\pi}{3}}Y_1^{-1}(\theta, \phi) \\ & - (1-i)\sqrt{\frac{2\pi}{3}}Y_1^1(\theta, \phi)] \end{aligned}$$

Dato che la parte angolare di  $\Psi(r, \theta, \phi)$  contiene le armoniche sferiche con  $m = 0, -1, 1$ , misurando la proiezione del momento angolare lungo  $z$  posso ottenere uno dei tre risultati:  $0, -\hbar, \hbar$ , con le seguenti probabilità:

$$\begin{cases} P_{m=0} = \frac{16}{3}\pi \\ P_{m=-1} = \frac{4}{3}\pi \\ P_{m=1} = \frac{4}{3}\pi \end{cases}$$

Queste in realtà non sono ancora delle vere probabilità perchè non sono normalizzate, infatti  $P_{tot} = P_{m=0} + P_{m=-1} + P_{m=1} = 8\pi$ . Con la corretta normalizzazione si ottiene:

$$\begin{cases} P_{m=0} = \frac{2}{3} \\ P_{m=-1} = \frac{1}{6} \\ P_{m=1} = \frac{1}{6} \end{cases}$$

## 6. Oscillatore armonico tridimensionale isotropo in coordinate polari

Vedi Ref.[1] pag.814, e confronta con i risultati ottenuti in coordinate cartesiane.



# Capitolo 5

## Spin

### 1. Brevi Richiami di Teoria sullo Spin

Per spiegare tutta una serie di evidenze sperimentali: struttura fine delle linee spettrali, effetto Zeeman anomalo (un atomo in un campo magnetico uniforme), esperimenti di tipo Stern-Gerlach (vedi Ref.[1] pag.338 e pag.968 per una trattazione in dettaglio di queste evidenze sperimentali) è necessario associare ad un elettrone (ed in generale ad ogni particella) un momento angolare intrinseco, diverso da quello orbitale, e senza analogo classico, che si chiama *spin*.

L'operatore di spin  $\hat{\mathbf{S}}$  soddisfa le seguenti proprietà:

- l'operatore di spin  $\hat{\mathbf{S}}$  è un momento angolare. Questo significa che le sue tre componenti sono osservabili che soddisfano le seguenti regole di commutazione:

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z \quad [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x \quad [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y \quad (5.1)$$

- L'operatore di spin agisce in uno spazio nuovo, lo spazio degli stati di spin  $\mathcal{E}_S$ , nel quale  $\hat{\mathbf{S}}^2$  ed  $\hat{S}_z$  costituiscono un set completo di osservabili che commutano. Quindi gli stati  $|s, m\rangle$ , autostati simultanei di  $\hat{\mathbf{S}}^2$  ed  $\hat{S}_z$  formano una base in  $\mathcal{E}_S$ :

$$\hat{\mathbf{S}}^2|s, m\rangle = s(s+1)\hbar^2|s, m\rangle \quad (5.2)$$

$$\hat{S}_z|s, m\rangle = m\hbar|s, m\rangle \quad (5.3)$$

Sappiamo dalla teoria sul momento angolare che  $s$  deve essere un intero od un sem-intero e che  $m$  prende tutti i valori tra  $-s$  e  $+s$  a passi di un'unità. Ogni particella è dunque caratterizzata da un ben preciso valore di  $s$  e si dice che questa particella ha spin  $s$ . Lo spazio degli stati di spin  $\mathcal{E}_S$  è quindi sempre uno spazio finito-dimensionale di dimensione  $2s+1$ , e tutti gli stati di spin sono autovettori di  $\hat{\mathbf{S}}^2$  con lo stesso autovalore  $s(s+1)\hbar^2$ .

- Lo spazio degli stati di una particella è quindi il prodotto tensoriale di  $\mathcal{E}_S$  e  $\mathcal{E}_r$  dove quest'ultimo è lo spazio degli stati orbitale. Tutte le osservabili di spin commutano con tutte le osservabili orbitali.

## 2. Brevi Richiami di Teoria su Particelle a spin 1/2, e formule utili

Da ora in poi ci concentreremo su particelle di spin 1/2 come l'elettrone o come un atomo di argento, che è una sostanza paramagnetica e neutra (cioè il numero di cariche positive è uguale al numero di cariche negative). In questo caso lo spazio  $\mathcal{E}_S$  è bidimensionale. Consideriamo come base i due stati  $|+\rangle$  e  $|-\rangle$  che soddisfano:

$$\hat{\mathbf{S}}^2|\pm\rangle = 3/4\hbar^2|\pm\rangle \quad (5.4)$$

$$\hat{S}_z|\pm\rangle = \pm 1/2\hbar|\pm\rangle \quad (5.5)$$

con

$$\begin{aligned} \langle +|+\rangle &= \langle -|-\rangle = 1 \\ \langle +|-\rangle &= 0 \\ |+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -| &= \mathbb{I} \end{aligned}$$

È da notare che  $\hat{S}_z$  da solo costituisce un set completo di osservabili che commutano. Infatti un generico stato di  $\mathcal{E}_S$  può essere espresso come:

$$|\chi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle \quad \alpha, \beta \in \mathbb{C}$$

Tutti gli stati di  $\mathcal{E}_S$  sono autostati di  $\hat{\mathbf{S}}^2$  con lo stesso autovalore  $3/4\hbar^2$ , e questo fa sì che  $\hat{\mathbf{S}}^2$  è proporzionale all'operatore identità in  $\mathcal{E}_S$ . Poiché  $\hat{\mathbf{S}}$  è un momento angolare possiede tutte le proprietà del momento angolare, in particolare è possibile definire gli operatori di scala:

$$\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y \quad (5.6)$$

che agiscono nel modo seguente:

$$\hat{S}_+|+\rangle = 0 \quad \hat{S}_+|-\rangle = \hbar|+\rangle \quad (5.7)$$

$$\hat{S}_-|+\rangle = \hbar|-\rangle \quad \hat{S}_-|-\rangle = 0 \quad (5.8)$$

Nella base  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$  le matrici che rappresentano gli operatori  $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$  sono:

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (5.9)$$

dove ovviamente  $S_z$  è diagonale.

Per quanto riguarda  $\hat{S}_n = \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{n}$ , cioè la proiezione dello spin  $\hat{\mathbf{S}}$  lungo una direzione generica nello spazio definita dal versore  $\mathbf{n}$  e caratterizzata in coordinate polari dagli angoli  $\theta$  e  $\phi$ , la corrispondente rappresentazione matriciale è:

$$S_n = S_x \sin \theta \cos \phi + S_y \sin \theta \sin \phi + S_z \cos \theta = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\phi} \\ \sin \theta e^{i\phi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (5.10)$$

Nella stessa base, si può scrivere la rappresentazione matriciale di  $\hat{\mathbf{S}}$  come

$$\hat{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \quad (5.11)$$

indicando con  $\sigma$  l'insieme delle tre *matrici di Pauli*:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (5.12)$$

Per le proprietà delle matrici di Pauli vedi Ref.[1] pag.973.

Gli autovettori di  $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_n$ , in termini degli autovettori di  $\hat{S}_z$  sono rispettivamente:

$$|\pm\rangle_x \equiv |S_x \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+\rangle \pm |-\rangle] \quad (5.13)$$

$$|\pm\rangle_y \equiv |S_y \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+\rangle \pm i|-\rangle] \quad (5.14)$$

$$|+\rangle_n \equiv |S_n +\rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\phi/2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi/2} |-\rangle \quad (5.15)$$

$$|-\rangle_n \equiv |S_n -\rangle = -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi/2} |+\rangle + \cos \frac{\theta}{2} e^{i\phi/2} |-\rangle \quad (5.16)$$

3. **Sistema di 2 particelle di spin 1/2. Esercizio Esame 20-2-2003.** Un sistema composto da due particelle distinguibili, entrambe di spin 1/2, si trova nello stato:

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|++\rangle + \frac{1}{2}|+-\rangle - \frac{i}{2}|--\rangle$$

dove  $|++\rangle \equiv |1+\rangle_z |2+\rangle_z$  rappresenta lo stato in cui sia la particella 1 che la particella 2 hanno proiezione dello spin up lungo l'asse delle z, ed analogamente:  $|+-\rangle \equiv |1-\rangle_z |2+\rangle_z$ ;  $|--\rangle \equiv |1-\rangle_z |2-\rangle_z$ .

- a) Se si fa una misura simultanea di  $\hat{S}_{1y}$  e  $\hat{S}_{2z}$ , cioè della proiezione dello spin lungo l'asse delle y per la particella 1 e della proiezione dello spin lungo l'asse delle z per la particella 2, qual è la probabilità di ottenere  $+\frac{\hbar}{2}$  per entrambe le particelle ?  
 b) Se si misura  $\hat{S}_{2x}$ , qual è la probabilità di ottenere  $-\frac{\hbar}{2}$  ?

In questo esercizio si farà uso del fatto che per una particella di spin  $\frac{1}{2}$  gli autostati di  $\hat{S}_x$  e  $\hat{S}_y$  si possono esprimere in funzione degli autostati di  $\hat{S}_z$  come:

$$|\pm\rangle_x \equiv |S_x \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+\rangle \pm |-\rangle]$$

$$|\pm\rangle_y \equiv |S_y \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+\rangle \pm i|-\rangle]$$

- a) Per ottenere  $+\frac{\hbar}{2}$  misurando  $\hat{S}_{1y}$  e  $\hat{S}_{2z}$  il sistema deve essere nello stato:

$$|\Phi\rangle = |1+\rangle_y |2+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|1+\rangle + i|1-\rangle] |2+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|++\rangle + i|+-\rangle]$$

Quindi la probabilità richiesta è:

$$P = |\langle \Phi | \Psi \rangle|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{1}{\sqrt{2}} - i \frac{1}{2} \right) \right|^2 = \frac{3}{8}$$

b) Si ottiene  $-\frac{\hbar}{2}$  misurando  $\hat{S}_{2x}$  se il sistema è in uno di questi due stati:

$$\begin{aligned} |\Phi_1\rangle &= |1+\rangle|2-\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}[|++\rangle - |+-\rangle] \\ |\Phi_2\rangle &= |1-\rangle|2-\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}[|-+\rangle - |--\rangle] \end{aligned}$$

Quindi la probabilità richiesta è:

$$\begin{aligned} P &= P_1 + P_2 = |\langle\Phi_1|\Psi\rangle|^2 + |\langle\Phi_2|\Psi\rangle|^2 \\ P_1 &= \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{4} \\ P_2 &= \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{1}{2} + \frac{i}{2} \right) \right|^2 = \frac{1}{4} \end{aligned}$$

In definitiva  $P = \frac{1}{2}$ .

4. **Esercizio Esame 3-12-2002.** Un fascio di particelle di spin  $1/2$  (diretto lungo l'asse delle  $y$ ) esce da un apparato Stern-Gerlach (con il campo magnetico diretto lungo l'asse  $z$ ) nello stato di spin  $|\sigma_z+\rangle$ . Questo fascio viene poi inviato verso un analogo apparato che ha il campo magnetico orientato verso una direzione  $\mathbf{n}$  perpendicolare all'asse delle  $y$  ma che forma un angolo  $\alpha$  rispetto all'asse  $z$ . Determinare i numeri relativi di particelle che compaiono nei due fasci che escono fuori dal secondo apparato. Suggestione: determinare le proiezioni su  $|\sigma_z+\rangle$  degli autostati di  $\sigma_n$  nel formalismo delle matrici di Pauli.

L'operatore di spin lungo una generica direzione:  $\mathbf{n} \equiv (\sin\theta \cos\phi, \sin\theta \sin\phi, \cos\theta)$  è dato da:

$$\sigma_n = \sigma_x \sin\theta \cos\phi + \sigma_y \sin\theta \sin\phi + \sigma_z \cos\theta = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\phi} \\ \sin\theta e^{i\phi} & -\cos\theta \end{pmatrix}$$

Calcoliamo le autofunzioni e gli autovalori di  $\sigma_n$ , cioè risolviamo il problema:

$$\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\phi} \\ \sin\theta e^{i\phi} & -\cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

Da  $\lambda^2 - \cos^2\theta - \sin^2\theta = 0$  si ottiene come ci si aspettava  $\lambda = \pm 1$ . Risolvendo il sistema per  $\lambda = 1$  abbiamo:

$$\frac{b}{a} = e^{i\phi} \frac{\sin\frac{\theta}{2}}{\cos\frac{\theta}{2}}$$

e dalla normalizzazione si ricava

$$a = \cos\frac{\theta}{2} \quad b = e^{i\phi} \sin\frac{\theta}{2}$$

In definitiva si ottiene:

$$|+\rangle_n = |\sigma_n+\rangle = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi} \sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad |-\rangle_n = |\sigma_n-\rangle = \begin{pmatrix} -e^{-i\phi} \sin\frac{\theta}{2} \\ \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$



Notare che si sommano le probabilità visto che si tratta di un caso in cui si ha degenerazione.



Confronta quanto abbiamo ricavato con le formule date precedentemente.

Nel nostro caso  $\phi = 0, \theta = \alpha$ , quindi

$$|+\rangle_n = |\sigma_n+\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha}{2} \\ \sin \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} \quad |-\rangle_n = |\sigma_n-\rangle = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\alpha}{2} \\ \cos \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix}$$

e quindi:

$$\langle \sigma_n + | z+ \rangle = \cos \frac{\alpha}{2} \quad \langle \sigma_n - | z+ \rangle = -\sin \frac{\alpha}{2}$$

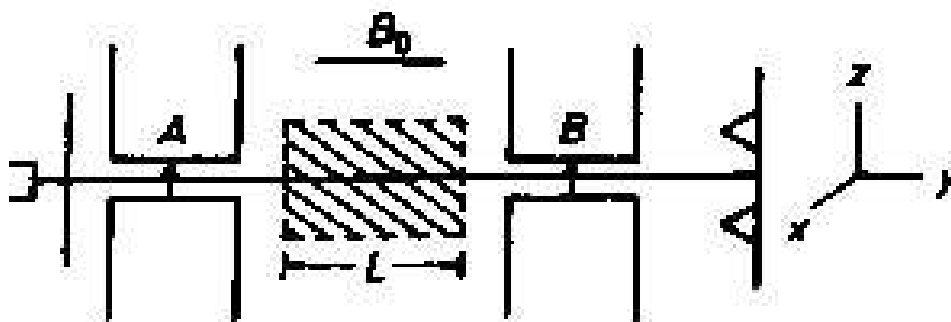
Il rapporto tra il numero di particelle che compare nei due fasci che escono fuori dal secondo apparato è:

$$R = \cotg^2 \frac{\alpha}{2}$$

5. **Esercizio Esame 5-9-2002.** Un fascio di atomi d'argento emerge con velocità  $v$  diretta lungo l'asse  $\hat{y}$  con spin up lungo l'asse  $\hat{z}$  da un apparato Stern-Gerlach, come in figura. Il fascio entra quindi in una regione di lunghezza  $L$  dove esiste un campo magnetico uniforme  $\mathbf{B}_0$  diretto lungo l'asse del fascio. Dopo di ciò il fascio entra in un altro apparato S-G identico al primo. Descrivere cosa si osserva all'uscita del secondo S-G, esprimendo le intensità relative dei fasci risultanti in termini dei dati del problema.

Suggerimenti: Il momento magnetico dell'atomo  $A_g$  coincide essenzialmente con quello dell'elettrone di valenza disaccoppiato,  $\boldsymbol{\mu} = -\frac{e}{m} \mathbf{s}$ , dove  $\mathbf{s} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}$  é lo spin dell'elettrone e  $\boldsymbol{\sigma}$  sono le matrici di Pauli. Si ricordi altresí che vale la relazione

$$e^{i\sigma_y \alpha} = \cos(\alpha) + i \sin(\alpha) \sigma_y.$$



Il sistema esce dal primo apparato Stern-Gerlach in uno stato  $|t_0\rangle = |S_z+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

Sul sistema agisce per un tempo  $t = \frac{L}{v}$  l'Hamiltoniana:

$$H = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = \frac{\gamma \hbar}{2} B_0 \sigma_y$$

con  $\gamma = \frac{e}{m\hbar}$ . Quindi lo stato del sistema all'uscita del secondo Stern-Gerlach è:

$$\begin{aligned} |t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |t_0\rangle &= e^{-i \frac{\gamma}{2} B_0 t \sigma_y} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \cos\left(\frac{\gamma}{2} B_0 t\right) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - i \sin\left(\frac{\gamma}{2} B_0 t\right) \sigma_y \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \\ &= \cos\left(\frac{\gamma}{2} B_0 t\right) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \sin\left(\frac{\gamma}{2} B_0 t\right) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

con  $t = \frac{L}{v}$ . Di conseguenza all'uscita del secondo Stern-Gerlach il fascio verrà diviso in due fasci rispettivamente di intensità  $I_+ = I_0 \cos^2(\frac{\gamma B_0 L}{2v})$  e  $I_- = I_0 \sin^2(\frac{\gamma B_0 L}{2v})$ , dove  $I_0$  è l'intensità del fascio entrante. Quindi il rapporto delle intensità richiesto dall'esercizio è:

$$\frac{I_+}{I_-} = \cot^2\left(\frac{\gamma B_0 L}{2v}\right)$$

6. **Esercizio Esame 20-2-2003.** Una particella di spin  $s = \frac{1}{2}$  e momento magnetico  $\boldsymbol{\mu} = \gamma \mathbf{s}$  si muove lungo l'asse delle  $y$  attraverso un campo magnetico  $\mathbf{B} = B\hat{e}_y$ . Al tempo  $t = 0$  lo stato del sistema è dato da  $|\Psi(t=0)\rangle = |+\rangle \equiv |z, +\rangle$
- a) Esprimere lo stato del sistema  $|\Psi(t)\rangle$  ad ogni istante nella base degli autostati  $|\pm\rangle_z$  di  $\hat{S}_z$ .
- b) Esprimere i valori medi delle osservabili  $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$  in funzione del tempo.

Sul sistema agisce l'Hamiltoniana:

$$\hat{H} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = -\gamma B \hat{S}_y$$

Nella rappresentazione di Pauli:

$$H = -\gamma B \frac{\hbar}{2} \sigma_y = -\gamma B \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Considerando l'operatore di evoluzione temporale:

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} = e^{i \frac{\gamma}{2} B t \sigma_y}$$

e lavorando in maniera del tutto analoga all'esercizio precedente si trova che lo stato del sistema al tempo  $t$  è:

$$|\Psi(t)\rangle = \cos\left(\frac{\gamma}{2} B t\right) |z, +\rangle - \sin\left(\frac{\gamma}{2} B t\right) |z, -\rangle$$

Poniamo per semplicità di calcolo  $\alpha = \frac{\gamma}{2} B t$ . I valori medi richiesti dall'esercizio sono rispettivamente:

$$\langle \hat{S}_z \rangle_t = \frac{\hbar}{2} (\cos \alpha, -\sin \alpha) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \alpha \\ -\sin \alpha \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \cos(2\alpha) = \frac{\hbar}{2} \cos(\gamma B t)$$

$$\langle \hat{S}_x \rangle_t = -\frac{\hbar}{2} \sin(\gamma B t) \quad \langle \hat{S}_y \rangle_t = 0$$

L'ultimo risultato si ottiene notando che poiché  $[\hat{S}_y, \hat{H}] = 0$ ,  $\hat{S}_y$  si conserva e quindi:

$$\langle \hat{S}_y \rangle_t = \langle \hat{S}_y \rangle_{t=0} = \langle z, + | \hat{S}_y | z, + \rangle = \frac{\hbar}{2} (1, 0) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$$

## Capitolo 6

# Atomo di Idrogeno

1. Stima delle dimensioni e dell'energia dello stato fondamentale dell'atomo di idrogeno per mezzo delle relazioni di indeterminazione.

Seguirò prima il ragionamento di Ref.[1] pag. 47. Il potenziale dell'atomo di idrogeno è:

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} = -\frac{e^2}{r}$$

avendo posto  $e^2 \equiv \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0}$ .

Supponiamo che l'elettrone sia descritto da una funzione d'onda a simmetria sferica caratterizzata da un valore ben preciso di  $r$  che indichiamo con  $r_0$ . Allora possiamo dire che il valore medio di  $V$  è approssimativamente:

$$\langle V \rangle \sim -\frac{e^2}{r_0}$$

cioè una quantità che decresce al decrescere di  $r_0$ . D'altra parte se l'elettrone è confinato in una regione di dimensione lineare  $r_0$  allora l'incertezza in  $p$  è  $\delta p \sim \hbar/r_0$ ; quindi il valore medio dell'energia cinetica è:

$$\langle T \rangle \sim \frac{(\delta p)^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2mr_0^2}$$

che è una quantità che cresce al decrescere di  $r_0$ . In definitiva si ha che il valore medio dell'hamiltoniana è la seguente funzione di  $r_0$ :

$$E(r_0) = \langle H \rangle \sim -\frac{e^2}{r_0} + \frac{\hbar^2}{2mr_0^2}$$

Vogliamo trovare il valore di  $r_0$  che minimizza l'energia  $E(r_0)$ . Annullando la derivata prima si trova:

$$r_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \equiv a_0 = 0.52 \cdot 10^{-10} m$$

dove  $a_0$  è il raggio di Bohr.

$$E_{min} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} = -13.6 eV$$

Che è proprio il valore esatto dell'energia del ground state, ma questa è solo una coincidenza, infatti se si fanno le cose più in dettaglio per valutare

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{1}{2m} \langle \hat{p}^2 \rangle - e^2 \langle \frac{1}{\hat{r}} \rangle$$

si trova una stima nettamente peggiore (e si comprende meglio il tipo di approssimazioni fatte e la loro validità) Si assume:

$$\langle \hat{x} \rangle = \langle \hat{y} \rangle = \langle \hat{z} \rangle = \langle \hat{p}_x \rangle = \langle \hat{p}_y \rangle = \langle \hat{p}_z \rangle = 0$$

quindi

$$\begin{aligned} (\delta x)^2 &= \langle \hat{x}^2 \rangle & (\delta y)^2 &= \langle \hat{y}^2 \rangle & (\delta z)^2 &= \langle \hat{z}^2 \rangle \\ (\delta p_x)^2 &= \langle \hat{p}_x^2 \rangle & (\delta p_y)^2 &= \langle \hat{p}_y^2 \rangle & (\delta p_z)^2 &= \langle \hat{p}_z^2 \rangle \end{aligned}$$

Di conseguenza, per i due valori medi che compaiono nella eq.6.1 abbiamo rispettivamente:

$$\begin{aligned} \langle \hat{p}^2 \rangle &= \langle \hat{p}_x^2 \rangle + \langle \hat{p}_y^2 \rangle + \langle \hat{p}_z^2 \rangle \sim 3 \langle \hat{p}_x^2 \rangle = 3(\delta p_x)^2 \\ \langle \frac{1}{\hat{r}} \rangle &\approx \frac{1}{\langle \hat{r} \rangle} \approx \frac{1}{\sqrt{3}(\delta x)} \end{aligned}$$

Si ottiene quindi

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{3}{2m} (\delta p_x)^2 - e^2 \frac{1}{\sqrt{3}(\delta x)} \geq \frac{3}{8m} \frac{\hbar^2}{(\delta x)^2} - e^2 \frac{1}{\sqrt{3}(\delta x)}$$

dove si è fatto uso delle relazioni di indeterminazione  $(\delta x)(\delta p_x) \geq \hbar/2$ . In definitiva, ponendo  $(\delta x) = r_0$ , la funzione di  $r_0$  che si ottiene è:

$$E(r_0) = \langle \hat{H} \rangle \sim -\frac{e^2}{\sqrt{3}r_0} + \frac{3\hbar^2}{8mr_0^2}$$

che è leggermente diversa da quella trovata precedentemente e che dà come risultato

$$E_{min} = -\frac{2}{9} \frac{me^4}{\hbar^2} \sim -6 \text{ eV}$$

## 2. Richiami di Teoria: risoluzione dell'equazione differenziale per l'atomo di idrogeno.

Il moto di una particella in un campo centrale è espresso dall'hamiltoniano:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(\hat{R})$$

dove  $V(r)$  è un potenziale centrale, ovvero isotropo nello spazio e dipendente solo dalla distanza  $r$  da un punto fisso detto centro del campo di forze.

Per le caratteristiche del potenziale,  $\hat{H}$  risulta un hamiltoniano invariante per rotazione e quindi conviene studiare il problema considerando l'equazione di Schrödinger in coordinate sferiche.

Inoltre si può far vedere che si hanno le seguenti relazioni di commutazione con il momento angolare:

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0 \quad [\hat{H}, \hat{L}_z] = 0 \quad [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$$

Nel caso, quindi, di un generico potenziale centrale è opportuno cercare le autofunzioni di  $\hat{H}$  nella classe di funzioni della forma:

$$\Psi_{nml}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta, \phi) = \frac{u_{nl}(r)}{r}Y_l^m(\theta, \phi)$$

Sostituendo questa forma funzionale nell'equazione di Schrödinger ed utilizzando l'espressione del laplaciano in coordinate sferiche, si ottiene che  $u(r)$  deve soddisfare la seguente equazione differenziale:

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar}(E - V(r)) \right] u(r) = 0$$

con le condizioni:

$$u(0) = 0 \quad e \quad \int_0^\infty |u(r)|^2 dr = 1$$

Nel caso particolare dell'atomo di idrogeno l'equazione differenziale diventa:

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar} \left( E_n - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \right] u(r) = 0$$

nota ai matematici come equazione di Laguerre e le cui soluzioni sono, appunto, le funzioni di Laguerre. Ad esempio

$$u_{n=1, l=0}(r) = 2(a_0)^{-\frac{3}{2}} r e^{-\frac{r}{a_0}}$$

e quindi lo stato fondamentale dell'atomo di idrogeno è dato da:

$$\psi_{g.s.}(r, \theta, \phi) = R_{n=1, l=0}(r)Y_{l=0}^{m=0}, \quad R_{1,0}(r) = 2(a_0)^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

3. **Esercizio Esame 28-7-2001.** Sia un atomo di idrogeno nello stato fondamentale. Calcolare la probabilità che l'elettrone si trovi ad una distanza dal nucleo maggiore del raggio classico.

Classicamente l'elettrone si troverebbe ad una distanza  $r_{class} = \frac{e^2}{2|E_{g.s.}|} = a_0$  (si è fatto uso di  $E_{g.s.} = -\frac{e^2}{2a_0}$ ). Quindi la probabilità richiesta è:

$$P(r > r_{class}) = \int_{a_0}^\infty |R_{10}(r)|^2 r^2 dr = 4a_0^{-3} \int_{a_0}^\infty e^{-\frac{2r}{a_0}} r^2 dr$$

Si ottiene:

$$P(r > r_{class}) = 5e^{-2}$$

facendo uso della relazione:

$$\int x^2 e^{\alpha x} dx = e^{\alpha x} \left[ \frac{x^2}{\alpha} - \frac{2x}{\alpha^2} + \frac{2}{\alpha^3} \right]$$

4. **Esercizio Esame 3-4-2002.** Calcolare la dispersione dell'energia potenziale per un atomo di idrogeno nello stato fondamentale. Come la dispersione dell'energia potenziale è legata alla dispersione dell'energia cinetica?

L'hamiltoniano del sistema si può scrivere come  $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ . Calcoliamo i valori medi per gli operatori energia cinetica ed energia potenziale:

$$\langle \hat{T} \rangle = \langle \hat{H} - \hat{V} \rangle = \langle \hat{H} \rangle - \langle \hat{V} \rangle = E - \langle \hat{V} \rangle$$

$$\langle \hat{T}^2 \rangle = \langle (\hat{H} - \hat{V})^2 \rangle = \langle \hat{H}^2 \rangle + \langle \hat{V}^2 \rangle - \langle \hat{H}\hat{V} \rangle - \langle \hat{V}\hat{H} \rangle = E^2 + \langle \hat{V}^2 \rangle - 2E\langle \hat{V} \rangle$$

Nell'ultima uguaglianza si deve fare attenzione al fatto che  $\hat{H}$  e  $\hat{V}$  non commutano ma...

$$\langle \hat{H}\hat{V} \rangle = \langle \psi_0 | \hat{H}\hat{V} | \psi_0 \rangle = E_0 \langle \psi_0 | \hat{V} | \psi_0 \rangle$$

Quindi la dispersione dell'energia cinetica assume l'espressione:

$$(\delta T)^2 = \langle \hat{T}^2 \rangle - \langle \hat{T} \rangle^2 = \langle \hat{V}^2 \rangle - \langle \hat{V} \rangle^2 = (\delta V)^2$$

Basta, quindi, valutare  $\langle \hat{V} \rangle$  e  $\langle \hat{V}^2 \rangle$  per avere sia  $(\delta V)^2$  che  $(\delta T)^2$ .

Lo stato fondamentale dell'atomo d'idrogeno è rappresentato dalla funzione d'onda:

$$\psi_{g.s.}(r, \theta, \phi) = R_{n=1, l=0}(r) Y_{l=0}^{m=0}, \quad \text{dove } R_{1,0}(r) = 2(a_0)^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

con autovalore dell'energia per lo stato fondamentale pari a  $E_{GS} = -\frac{e^2}{2a_0}$

Quindi possiamo così calcolare i valori medi  $\langle \hat{V} \rangle$  e  $\langle \hat{V}^2 \rangle$ :

$$\langle \hat{V} \rangle = \int_0^{+\infty} r^2 dr \left[ -\frac{e^2}{r} |2(a_0)^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}}|^2 \right] = -\frac{e^2}{a_0}$$

e analogamente

$$\langle \hat{V}^2 \rangle = \int_0^{+\infty} r^2 dr \left[ \frac{e^4}{r^2} |2(a_0)^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}}|^2 \right] = 2\frac{e^4}{a_0^2}$$

Si ottiene perciò :

$$(\delta T)^2 = (\delta V)^2 = \frac{e^4}{a_0^2}$$

5. **Esercizio Esame 11-7-2002.** Si consideri il moto di un elettrone (massa  $m$  e carica  $e$ ) in un potenziale centrale del tipo (detto potenziale di Yukawa):

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} \exp(-\lambda r) \quad \lambda > 0$$

Scrivere l'equazione di Schrödinger non dipendente dal tempo per la parte radiale e mostrare che essa ha le stesse soluzioni asintotiche (cioè per  $r \rightarrow 0$  e per  $r \rightarrow \infty$ ) dell'equazione radiale dell'atomo di idrogeno. Determinare i livelli energetici e le corrispondenti autofunzioni al primo ordine in  $\lambda$ .

Nel caso di un generico potenziale centrale con  $V(r) \rightarrow 0$  per  $r \rightarrow \infty$ , le autofunzioni degli stati legati si ottengono per  $E < 0$  e sono della forma:

$$\Psi_{nml}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta, \phi) = \frac{u_{nl}(r)}{r}Y_l^m(\theta, \phi)$$

dove  $u(r)$  soddisfa:

$$\begin{aligned} \left[ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(r)) \right] u(r) &= 0 \\ u(0) &= 0 \\ \int_0^\infty |u(r)|^2 dr &= 1 \end{aligned} \quad (6.1)$$

Per  $r \rightarrow 0$ , si ha  $\exp(-\lambda r) \rightarrow 1$ , e quindi  $V(r)$  si comporta come  $V(r)_{at. idrogeno} = -\frac{e^2}{r}$  e quindi ha la stessa soluzione asintotica dell'atomo di idrogeno, cioè  $u(r) \sim r^{l+1}$ ,  $R(r) \sim r^l$ .

Per  $r \rightarrow \infty$ ,  $V(r) \rightarrow 0$  e quindi anche in questo caso la soluzione asintotica della nostra equazione radiale è la stessa di quella dell'atomo di idrogeno.

Al primo ordine in  $\lambda$  abbiamo:

$$V(r) \approx -\frac{e^2}{r} + e^2 \lambda$$

quindi le autofunzioni del nostro sistema sono le stesse dell'atomo di idrogeno con energie:

$$E_n = E_n^{at. idrogeno} + e^2 \lambda$$

6. **Esercizio Esame 11-6-2002.** Una particella di massa  $m$  è vincolata a muoversi all'interno di una sfera di raggio  $r_0$ , cioè è soggetta ad un potenziale del tipo  $V(r) = 0$  per  $r < r_0$  e  $V(r) = +\infty$  per  $r \geq r_0$  (una buca di potenziale sferica infinita). Scrivere l'equazione differenziale che determina le autofunzioni e le autoenergie della particella e trovare le soluzioni con momento angolare nullo ( $l=0$ ).

Nel caso di potenziale centrale le autofunzioni sono del tipo :

$$\Psi_{nml}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta, \phi) = \frac{u_{nl}(r)}{r}Y_l^m(\theta, \phi)$$

dove  $u(r)$  soddisfa l'equazione radiale

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E \right] u(r) = 0 \quad (6.2)$$

con le condizioni

$$\begin{aligned} u(0) &= 0 \\ u(r) &= 0 \quad \text{per } r \geq r_0 \\ \int_0^{r_0} |u(r)|^2 dr &= 1 \end{aligned} \quad (6.3)$$

Si chiede di risolvere l'equazione radiale per  $l = 0$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar} E\right]u(r) = 0 \quad \text{per } r < r_0$$

le cui soluzioni sono (per analogia a quelle di una buca di potenziale a pareti infinite):

$$u_{n,l=0}(r) = \sqrt{\frac{2}{r_0}} \sin \frac{n\pi r}{r_0} \quad \text{per } r < r_0$$

e quindi

$$\psi_{n00}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi r_0}} \frac{1}{r} \sin \frac{n\pi r}{r_0} \quad \text{per } r < r_0$$

con autovalori dell'energia

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mr_0^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

## Capitolo 7

# Perturbazioni non dipendenti dal tempo

1. **Formule utili.** Sia  $\hat{H}_0$  l'hamiltoniana imperturbata del nostro sistema e  $\hat{V}$  la perturbazione, allora si hanno le seguenti espressioni:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V} \quad \text{con } \lambda \ll 1$$

con

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 |\psi_n^0\rangle &= E_n^0 |\psi_n^0\rangle \\ \hat{H} |\psi_n(\lambda)\rangle &= E_n(\lambda) |\psi_n(\lambda)\rangle\end{aligned}$$

Le correzioni ai primi ordini in  $\lambda$  per gli autovalori e gli autostati dell'hamiltoniana perturbata sono:

$$E_n(\lambda) = E_n^0 + \lambda V_{nn} + \lambda^2 \sum_{k \neq n} \frac{|V_{kn}|^2}{E_n^0 - E_k^0} + \dots \quad (7.1)$$

$$|\psi_n(\lambda)\rangle = |\psi_n^0\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} |\psi_k^0\rangle \frac{V_{kn}}{E_n^0 - E_k^0} + \dots \quad (7.2)$$

dove  $V_{kn} = \langle \psi_k^0 | \hat{V} | \psi_n^0 \rangle$  (Vedi Ref.[2] pag. 286)

2. Un oscillatore armonico unidimensionale sia sottoposto ad una perturbazione del tipo:  $V(x) = \lambda x^2$ . Determinare le correzioni all'energia dello stato fondamentale e degli stati eccitati facendo uso degli operatori di creazione ed annichilazione. Confrontare i risultati ottenuti con i risultati esatti.

Innanzitutto consideriamo il caso di un oscillatore armonico unidimensionale soggetto ad una perturbazione di tipo quadratico e risolviamo esattamente il problema. L'hamiltoniana del sistema è:

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

e, riscalandolo opportunamente il parametro  $\lambda$ , l'hamiltoniana si può scrivere come:

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(\lambda + 1)\hat{x}^2$$

$\hat{H}$  è esattamente risolubile, perchè si tratta di un oscillatore armonico unidimensionale con una diversa costante elastica della molla, ovvero i nuovi livelli energetici sono:

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega' = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega\sqrt{\lambda + 1} = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega[1 + \frac{\lambda}{2} - \frac{\lambda^2}{8} + \dots]$$

Usando, invece, la teoria delle perturbazioni e ricordando le seguenti espressioni per gli operatori di creazione e di annichilazione

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle \\ \hat{a}|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle\end{aligned}$$

$$\hat{x}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}(\hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a})$$

si ottengono i seguenti elementi di matrice per la perturbazione  $\hat{W} = \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$

$$\langle n|\hat{W}|n\rangle = \frac{1}{2}(n + \frac{1}{2})\hbar\omega$$

$$\langle n+2|\hat{W}|n\rangle = \frac{1}{4}[(n+1)(n+2)]^{\frac{1}{2}}\hbar\omega$$

$$\langle n-2|\hat{W}|n\rangle = \frac{1}{4}[n(n-1)]^{\frac{1}{2}}\hbar\omega$$

e quindi, in perfetto accordo con i risultati esatti:

$$E_n(\lambda) = E_n^0 + \lambda W_{nn} + \lambda^2 \sum_{k \neq n} \frac{|W_{kn}|^2}{E_n^0 - E_k^0} + \dots = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega[1 + \frac{\lambda}{2} - \frac{\lambda^2}{8} + \dots]$$

Analogamente è interessante considerare i potenziali perturbativi del tipo:  $V(x) = \lambda x$  e  $V(x) = \lambda x^3$ . Vi sono vari casi fisici in cui la perturbazione ha una di queste due forme. Per il primo potenziale è anche possibile confrontare i risultati approssimati con quelli esatti (Vedi Ref. [1] pag.1110).

3. Un oscillatore armonico unidimensionale sia sottoposto ad una piccola perturbazione della forma  $V(x) = \alpha x^3 + \beta x^4$ . Determinare le correzioni all'energia dello stato fondamentale al primo ordine nella perturbazione usando le funzioni d'onda. ( Si possono anche calcolare le correzioni agli stati eccitati ma diventa complicato fare gli integrali. In quel caso conviene usare il metodo operatoriale).

Lo stato fondamentale dell'oscillatore armonico unidimensionale è descritto dalla funzione d'onda

$$\psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2}$$

con autovalore  $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$  tale che  $\hat{H}|\psi_0\rangle = E_0|\psi_0\rangle$ . La correzione all'energia dello stato fondamentale al primo ordine nella perturbazione è data perciò da:

$$E_0^{(1)} = \langle\psi_0|\hat{V}|\psi_0\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x)|^2 (\alpha x^3 + \beta x^4) = \frac{3}{4}\beta \frac{\hbar^2}{m^2\omega^2}$$

Analogamente, usando gli operatori di creazione ed annichilazione, si ha:

$$E = E_0 + \lambda\langle 0|\hat{x}^3|0\rangle + \beta\langle 0|\hat{x}^4|0\rangle$$

$$\hat{x}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}(\hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a})$$

e si ottiene

$$\langle 0|\hat{x}^3|0\rangle = 0$$

$$\langle 0|\hat{x}^4|0\rangle = \langle 0|\hat{x}^2\hat{x}^2|0\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\langle 0|\hat{x}^2|[\sqrt{2}|2\rangle + |0\rangle]\rangle = \frac{3}{4}\frac{\hbar^2}{m^2\omega^2}$$

e quindi

$$E = E_0 + \beta \frac{3}{4} \frac{\hbar^2}{m^2\omega^2}$$

4. **Esercizio Esame 28-1-2002.** Una particella si trova nello stato fondamentale di un oscillatore armonico unidimensionale. La particella sia sottoposta ad una piccola perturbazione della forma  $V(x) = \lambda x$ . Determinare al primo ordine nella perturbazione come cambia per effetto di  $V$  lo scarto quadratico medio delle posizioni della particella.

Sia  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{V}$  e consideriamo le espressioni al primo ordine per gli autostati dell'oscillatore armonico unidimensionale sottoposto alla perturbazione  $V(x) = \lambda x$ :

$$|n\rangle = |n^0\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} |k^0\rangle \frac{V_{kn}}{E_n^0 - E_k^0} + \dots$$

ed in particolare,

$$|0\rangle = |0^0\rangle + \lambda \sum_{k \neq 0} |k^0\rangle \frac{V_{k0}}{E_0^0 - E_k^0} + \dots$$

Inoltre abbiamo che

$$E_k^{(0)} = \frac{\hbar\omega}{2} + k\hbar\omega$$

$$E_0^{(0)} = \frac{\hbar\omega}{2}$$

da cui si ottiene, usando le solite espressioni per gli operatori di creazione e di annichilazione,

$$\langle k^0 | \hat{V} | 0^0 \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \delta_{k1}$$

e quindi

$$|0\rangle = |0^0\rangle - \lambda \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega^3}} |1^0\rangle$$

Per l'hamiltoniana imperturbata lo scarto quadratico medio della posizione della particella, come abbiamo già visto, è dato da:

$$\begin{aligned} \langle n^0 | \hat{x} | n^0 \rangle &= 0 \\ \langle n^0 | \hat{x}^2 | n^0 \rangle &= \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar}{m\omega} \\ (\delta x)_{n^0}^2 &= \langle n^0 | \hat{x}^2 | n^0 \rangle - \langle n^0 | \hat{x} | n^0 \rangle^2 = \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar}{m\omega} \\ (\delta x)_{0^0}^2 &= \frac{1}{2} \frac{\hbar}{m\omega} \end{aligned}$$

Per l'hamiltoniana perturbata, invece, si ottiene

$$\langle 0 | \hat{x} | 0 \rangle = [\langle 0^0 | - \lambda \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega^3}} \langle 1^0 |] \hat{x} [|0^0\rangle - \lambda \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega^3}} |1^0\rangle] = \frac{-\lambda}{m\omega^2}$$

$$\langle 0 | \hat{x}^2 | 0 \rangle = [\langle 0^0 | - \lambda \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega^3}} \langle 1^0 |] \hat{x}^2 [|0^0\rangle - \lambda \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega^3}} |1^0\rangle] = \frac{1}{2} \frac{\hbar}{m\omega} + \lambda^2 \frac{3}{2} \frac{1}{2m\hbar\omega^3} \frac{\hbar}{m\omega}$$

e quindi

$$(\delta x)_0^2 = \frac{1}{2} \frac{\hbar}{m\omega} - \frac{1}{4} \lambda^2 \frac{1}{m^2 \omega^4}$$

5. **Esercizio Esame 11-7-2002.** Dato un pendolo semplice di lunghezza  $\ell$  e massa  $m$ , si indichi con  $\theta$  l'angolo da esso formato rispetto alla verticale.

a) Scrivere l'Hamiltoniana  $H$  del sistema e sviluppare il potenziale  $V(\theta)$  in serie di potenze di  $\theta$ .

b) Calcolare le autoenergie di  $H_0$ , l'Hamiltoniana che si ottiene da  $H$  arrestandosi al termine in  $\theta^2$ .

c) Calcolare, con il metodo perturbativo al primo ordine, la correzione all'energia dello stato fondamentale di  $H_0$  che si ottiene quando si considera anche il termine successivo dello sviluppo di  $V(\theta)$ , cioè il termine in  $\theta^4$ .

Il potenziale è:

$$V(\theta) = -mgl \cos \theta \approx -mgl \left(1 - \frac{\theta^2}{2} + \frac{\theta^4}{24} + \dots\right)$$

Quindi

$$\begin{aligned} H &= \frac{p^2}{2m} + V(\theta) \\ H_0 &= \frac{p^2}{2m} - mgl + mgl \frac{\theta^2}{2}, & H_1 &= H_0 - mgl \frac{\theta^4}{24} \end{aligned}$$

Ponendo  $x = l\theta$  otteniamo:

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} - mgl + \frac{1}{2}m\frac{g}{l}x^2 \quad H_1 = H_0 - \frac{mg}{24l^3}x^4$$

dove, a parte la costante  $-mgl$ ,  $H_0$  è l'hamiltoniana di un oscillatore armonico con frequenza  $\omega = \sqrt{\frac{g}{l}}$ . Quindi gli autovalori di  $H_0$  sono

$$E_n^0 = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega - mgl, \quad \omega = \sqrt{\frac{g}{l}},$$

in particolare il ground state ha energia:

$$E_0^0 = \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{g}{l}} - mgl$$

La correzione ad  $E_0^0$  dovuta al termine  $-\frac{mg}{24l^3}x^4$  in  $H_1$  è:

$$\langle \Psi_0 | -\frac{mg}{24l^3}x^4 | \Psi_0 \rangle,$$

dove  $|\Psi_0\rangle$  è il g.s. dell'OA. L'elemento di matrice si valuta facilmente facendo uso degli operatori di creazione ed annichilazione e ricordando che:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$$

Infatti si ha:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0 | \hat{x}^4 | \Psi_0 \rangle &= \|\hat{x}^2 | \Psi_0 \rangle\|^2 \\ &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \|(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) | \Psi_0 \rangle\|^2 \\ &= 3\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2; \end{aligned}$$

Gli unici contributi  $\neq 0$  sono quelli dovuti ai termini  $a\hat{a}^\dagger | \Psi_0 \rangle = | \Psi_0 \rangle$  e  $\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger | \Psi_0 \rangle = \sqrt{2} | \Psi_2 \rangle$ , quindi:

$$E_0^1 = -\frac{mg}{24l^3} 3\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 = -\frac{\hbar^2}{32ml^2}$$

## 6. Effetto Stark Lineare nell'atomo di Idrogeno.

Si tratta di un esempio classico della teoria delle perturbazioni nel caso di livelli degeneri.

L'effetto Stark consiste nell'applicazione di un campo elettrico uniforme e costante sugli stati eccitati di un atomo di idrogeno.

I livelli energetici dell'atomo di idrogeno sono dati da  $E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{me^4}{2\hbar^2}$  e sono tutti degeneri (tranne lo stato fondamentale) perché i numeri quantici angolari (anche grazie alla simmetria sferica del potenziale coulombiano) variano, a parità di energia, nel seguente modo  $0 \leq l < n$  e  $-l \leq m \leq l$ .

Se applichiamo un campo elettrico uniforme parallelo all'asse z,  $\mathbf{E} = (0, 0, E)$ , questo crea una perturbazione all'hamiltoniana dell'atomo di idrogeno con un contributo  $\hat{W} =$

$-eEz$ ; bisogna osservare che, in base alle nostre possibilità sperimentali, il campo elettrico esterno è sempre piccolo tale da poter giustificare l'approccio perturbativo. Ricordando l'azione dell'operatore  $\hat{z}$  sugli autostati  $|l, m\rangle$  del momento angolare

$$\hat{z}|l, m\rangle = \sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}|l+1, m\rangle + \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}}|l-1, m\rangle$$

e calcolando gli elementi di matrice della perturbazione  $\hat{W}$  tra gli autostati  $|2, 0, 0\rangle, |2, 1, 0\rangle, |2, 1, 1\rangle, |2, 1, -1\rangle$ , rispettando quest'ordine, si ottiene la matrice

$$W = \begin{pmatrix} 0 & 3ea_0E & 0 & 0 \\ 3ea_0E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Gli autovalori e gli autovettori di questa matrice mi danno, per la teoria delle perturbazioni nel caso degenere, le correzioni ai livelli energetici (al primo ordine) del sistema perturbato e i rispettivi autostati (all'ordine zero), che sono:

$$E_0^1 = 0 \quad |2, 1, 1\rangle$$

$$E_0^1 = 0 \quad |2, 1, -1\rangle$$

$$E_0^1 = 3ea_0 \quad (\text{lineare}) \quad \frac{1}{\sqrt{2}}[|2, 0, 0\rangle + |2, 1, 0\rangle]$$

$$E_0^1 = 3ea_0 \quad (\text{lineare}) \quad \frac{1}{\sqrt{2}}[|2, 0, 0\rangle - |2, 1, 0\rangle]$$

### 7. Esercizio Esame 22-2-2002. Un rotatore rigido asimmetrico ha Hamiltoniana

$$H = \frac{J_x^2}{2\mathcal{I}_x} + \frac{J_y^2}{2\mathcal{I}_y} + \frac{J_z^2}{2\mathcal{I}_z} \quad \text{con} \quad \mathcal{I}_x = \mathcal{I} + \Delta\mathcal{I} \quad \mathcal{I}_y = \mathcal{I} - \Delta\mathcal{I} \quad \mathcal{I}_z = \mathcal{I}$$

dove  $\frac{\Delta\mathcal{I}}{\mathcal{I}} \ll 1$ . Determinare al primo ordine perturbativo l'energia del primo stato eccitato, cioè con  $J=1$ .

L'hamiltoniana del rotatore rigido, per poter applicare l'approccio perturbativo, deve essere scomposta in una parte che sappiamo risolvere ed un'altra che ne rappresenta la perturbazione.

Usando l'approssimazione  $\frac{1}{1+x} \cong 1-x$  per  $x \ll 1$  e mettendo in evidenza i termini in comune, possiamo scrivere:

$$\hat{H} = \frac{\hat{J}_x^2}{2\mathcal{I}_x} + \frac{\hat{J}_y^2}{2\mathcal{I}_y} + \frac{\hat{J}_z^2}{2\mathcal{I}_z} = \frac{\hat{J}^2}{2\mathcal{I}} + \frac{\hat{J}_y^2 - \hat{J}_x^2}{2\mathcal{I}} \frac{\Delta\mathcal{I}}{\mathcal{I}}$$

dove  $\hat{H}_0$  è  $\frac{\hat{J}^2}{2\mathcal{I}}$ , mentre  $V = \frac{\hat{J}_y^2 - \hat{J}_x^2}{2\mathcal{I}} \frac{\Delta\mathcal{I}}{\mathcal{I}}$ .

Se si indicano con  $|j, m\rangle$  gli autostati simultanei di  $\hat{\mathbf{J}}^2$  ed  $\hat{J}_z$ , si ha:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{J}}^2|j, m\rangle &= j(j+1)\hbar^2|j, m\rangle \\ \hat{J}_z|j, m\rangle &= m\hbar|j, m\rangle\end{aligned}$$

Per i successivi calcoli, saranno utili le seguenti espressioni per gli operatori di scala:

$$\begin{aligned}\hat{J}_+|j, m\rangle &= \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}|j, m+1\rangle \\ \hat{J}_-|j, m\rangle &= \hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}|j, m-1\rangle \\ \hat{J}_+ &= \hat{J}_x + i\hat{J}_y & \hat{J}_- &= \hat{J}_x - i\hat{J}_y\end{aligned}$$

Infatti, con quest'ultime espressioni, possiamo scrivere la perturbazione come:

$$\hat{V} = -\frac{1}{4\mathcal{I}}(\hat{J}_+^2 + \hat{J}_-^2)$$

Calcolando, cosí, tramite le relazioni precedenti, gli elementi di matrice tra gli stati  $|j, m\rangle$  con  $j = 1$  e  $m = -1, 0, 1$ , si ottiene la matrice

$$W = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\frac{\hbar^2}{2\mathcal{I}} \\ 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\hbar^2}{2\mathcal{I}} & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Al primo ordine perturbativo, secondo la teoria delle perturbazioni nel caso degenere, l'energia del primo stato eccitato ammette come correzioni gli autovalori della matrice precedente, ovvero si ottiene:

$$E = \frac{\hbar^2}{\mathcal{I}} \pm \frac{\hbar^2}{2\mathcal{I}} \frac{\Delta\mathcal{I}}{\mathcal{I}}$$

8. **Esercizio Esame 3-12-2002.** Un rotatore rigido planare, avente un momento di inerzia  $I$  ed un momento di dipolo elettrico  $p$ , ruota liberamente nel piano  $x - y$ . Calcolare le correzioni al primo ordine ed al secondo ordine ai livelli energetici del rotatore se viene applicata una perturbazione esterna che consiste in un campo elettrico uniforme di intensità  $E$  diretto lungo l'asse positivo delle  $x$ .

Suggerimento: Esprimere le funzioni d'onda del sistema in funzione dell'angolo azimutale  $\phi$ .

L'hamiltoniana imperturbata del sistema è data da:

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{L}_z^2}{2\mathcal{I}_x}$$

e, in base alla teoria del momento angolare, ammette autovalori e autofunzioni date da:

$$\begin{aligned}|m\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi} \\ E_m &= \frac{\hbar^2 m^2}{2\mathcal{I}}\end{aligned}$$

con  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Se  $\mathbf{E} = E_x$  allora il potenziale perturbativo è del tipo:

$$V(\phi) = -\mathbf{p} \cdot \mathbf{E} = -pE \cos \phi$$

Le correzioni ai livelli energetici sono, perciò :

$$\Delta_1 E_m = \langle m | V | m \rangle = -\frac{pE}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi e^{-im\phi} \cos \phi e^{im\phi} = 0$$

$$\Delta_2 E_m = \langle m' | V | m \rangle = \sum_{m'} \frac{|\langle m' | V | m \rangle|^2}{E_m - E_{m'}} = \frac{p^2 E^2}{\hbar^2} \frac{\mathcal{I}}{4m^2 - 1}$$

Inoltre è bene osservare che, eccetto lo stato fondamentale, tutti gli altri livelli energetici sono degeneri e quindi bisognerebbe applicare la teoria perturbativa nel caso degenere. D'altra parte, si può osservare che il potenziale  $V$  non accoppia gli autostati degeneri con  $m$  uguale ed opposto, ovvero  $\langle -m | V | m \rangle = 0$ . Per questo motivo non c'è bisogno di tener conto della degenerazione nel calcolare le correzioni al primo e al secondo ordine ai livelli energetici. (vedi Ref.[3] pag. 712)

## Capitolo 8

# Perturbazioni dipendenti dal tempo

1. **Formule utili.** Un sistema fisico, descritto da un Hamiltoniano  $\hat{H}_0$  di cui si conoscono autovalori ed autovettori, si trova al tempo 0 in un autostato  $|i\rangle$  di  $\hat{H}_0$ . Se viene applicato per un certo intervallo di tempo  $t$  una perturbazione dipendente dal tempo  $\hat{H}_1(t') = \lambda\hat{V}(t')$  è possibile determinare, in maniera approssimata, la probabilità  $P_{if}(t)$  che al tempo  $t$  il sistema si trovi in un autostato  $|f\rangle$  di  $\hat{H}_0$  come uno sviluppo in serie di  $\lambda$ :

$$P_{if}(t) = |\lambda c^{(1)}(t) + \lambda^2 c^{(2)}(t) + \dots|^2$$

dove le ampiezze di transizione al primo ed al secondo ordine sono:

$$c^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} V_{fi}(t') dt' \quad (8.1)$$

$$c^{(2)}(t) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_m \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' e^{i\omega_{fm}t'} V_{fm}(t') e^{i\omega_{mi}t''} V_{mi}(t'') \quad (8.2)$$

e si è posto:

$$\omega_{fi} = \frac{E_f - E_i}{\hbar} \quad V_{fi}(t') = \langle f | \hat{V}(t') | i \rangle \quad (8.3)$$

– Nel caso in cui la *perturbazione è costante* nel tempo, cioè  $\hat{V}(t') = \hat{V}$ , la probabilità al primo ordine prende la forma seguente:

$$P_{if}^{(1)}(t) = |c^{(1)}(t)|^2 = \frac{4|V_{fi}|^2}{(E_f - E_i)^2} \sin^2\left[\frac{(E_f - E_i)t}{2\hbar}\right] = \frac{|V_{fi}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2\left(\frac{\omega_{fi}t}{2}\right)}{\left(\frac{\omega_{fi}}{2}\right)^2} \quad (8.4)$$

– Nel caso in cui la *perturbazione è sinusoidale* con frequenza  $\omega$ , la probabilità al primo ordine prende la forma seguente:

$$P_{if}^{(1)}(t) = |c^{(1)}(t)|^2 = \frac{|V_{fi}|^2}{4\hbar^2} \frac{\sin^2\left(\frac{(\omega_{fi} - \omega)t}{2}\right)}{\left(\frac{\omega_{fi} - \omega}{2}\right)^2} \quad (8.5)$$

2. **Esercizio Esame 30-4-2002.** Una particella carica in moto unidimensionale in una buca infinita di larghezza  $L$  viene sottoposta ad un campo elettrico  $E$  costante ed uniforme per un tempo  $T$ . Assumendo che prima della perturbazione la particella si trovava nello stato fondamentale determinare al primo ordine perturbativo la probabilità di transizione al primo stato eccitato.

Le autofunzioni e le autoenergie di una buca di potenziale a pareti infinite di larghezza  $L$  sono date da:

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Siamo interessati alla transizione da  $\phi_1(x)$  a  $\phi_2(x)$  dovuta ad un potenziale del tipo  $\hat{V} = -qE\hat{x}$ . La probabilità richiesta è quindi data da formula (8.4):

$$P_{if}^{(1)}(T) = P_{12}^{(1)}(T) = \frac{4|V_{21}|^2}{(E_2 - E_1)^2} \sin^2\left[\frac{(E_2 - E_1)T}{2\hbar}\right]$$

con

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad E_2 = \frac{4\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

e

$$V_{21} = \langle 2|\hat{V}|1\rangle = -qE \int_0^L x \phi_1(x) \phi_2^*(x) dx = -\frac{2qE}{L} \int_0^L x \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) dx$$

L'integrale si può valutare facendo una trasformazione di variabili ed utilizzando il seguente risultato:

$$\int_0^\pi y \sin^2(y) \cos(y) dy = -\frac{4}{9}$$

e si ottiene  $V_{21} = \frac{16qEL}{9\pi^2}$ .

3. **Esercizio Esame 8-6-2001.** Un rotatore rigido planare (cioè in 2D) (vedi capitolo precedente), con

$$H_0 = \frac{L_z^2}{2\mathcal{I}}$$

è sottoposto per un tempo  $T$  ad una perturbazione  $V = V_0 \cos\phi$  dove  $\phi$  è l'angolo azimutale nel piano  $x-y$ . Supposto che a  $t = 0$  il rotatore sia nello stato  $|\Psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|m\rangle + |-m\rangle)$  calcolare al primo ordine perturbativo la probabilità di transizione allo stato fondamentale.

Le autofunzioni  $u_m(\phi) = \langle \phi|m\rangle$  e le autoenergie di un rotatore rigido planare sono quelle date nel capitolo precedente. Siamo interessati alla probabilità di transizione dallo stato iniziale  $|\Psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|m\rangle + |-m\rangle)$  allo stato finale  $|0\rangle$  dovuta ad una perturbazione costante nel tempo del tipo  $V = V_0 \cos\phi$ . La probabilità richiesta è quindi data da formula (8.4):

$$P_{if}^{(1)}(T) = \frac{4|V_{fi}|^2}{(E_f - E_i)^2} \sin^2\left[\frac{(E_f - E_i)T}{2\hbar}\right]$$

con

$$E_f - E_i = -\frac{\hbar^2 m^2}{2I}$$

e

$$V_{21} = \langle 0 | \hat{V} | \Psi_0 \rangle = V_0 \int_0^{2\pi} u_0^*(\phi) \cos \phi \Psi_0(\phi) d\phi$$

dove

$$\Psi_0(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2}} [u_m(\phi) + u_{-m}(\phi)]$$

Risolvendo gli integrali si ottiene:

$$V_{21} = \frac{V_0}{2\sqrt{2}} [\delta_{m,-1} + \delta_{m,+1} + \delta_{-m,-1} + \delta_{-m,+1}]$$

In conclusione la probabilità di transizione è diversa da zero solo nel caso in cui  $m = 1$  oppure  $m = -1$  ed è uguale a:

$$P_{if}^{(1)}(T) = \frac{8V_0^2 I^2}{\hbar^4} \sin^2\left(\frac{\hbar T}{4I}\right)$$

4. **Esercizio Esame 3-12-2002.** Un sistema quantico a tre livelli ( $E_1 = 0 \text{ eV}$ ,  $E_2 = 30 \text{ eV}$ ,  $E_3 = 50 \text{ eV}$ ) nello stato fondamentale a  $t = 0$ , viene irradiato da radiazioni e.m. di energia  $E_\gamma = 30 \text{ eV}$  per un tempo  $T$ . Si chiede quale deve essere il tempo  $T$  minimo affinché la probabilità di eccitare il livello di energia  $E_3$  sia trascurabile.

Nel caso in cui il sistema viene irradiato da una radiazione e.m. con frequenza  $\omega$  per un tempo  $T$  la probabilità di transizione al primo ordine prende la forma data dalla eq. (8.5):

$$P_{if}^{(1)}(t) = |c^{(1)}(t)|^2 = \frac{|V_{fi}|^2}{4\hbar^2} \frac{\sin^2\left(\frac{(\omega_{fi}-\omega)t}{2}\right)}{\left(\frac{\omega_{fi}-\omega}{2}\right)^2}$$

Dato che  $E_\gamma = E_2 - E_1$  la radiazione induce principalmente transizioni dal primo al secondo livello. Infatti la distribuzione di probabilità  $P_{if}^{(1)}(T)$  vista come una funzione di  $\omega_{fi}$  è una curva piccata a  $\omega_{fi} = \omega$ . La larghezza della curva dipende da  $T$  per cui se  $T$  non è abbastanza grande allora è possibile che la radiazione induca transizioni dal primo al terzo livello. Una stima del tempo minimo si può ottenere valutando dove la probabilità di transizione dal primo al terzo livello  $P_{13}^{(1)}(T)$  ha il primo minimo. In questo modo si ottiene la relazione:

$$\frac{\omega_{31} - \omega}{2} t = \pi \quad \text{dove } \omega_{31} = \omega_3 - \omega_1$$

e quindi il tempo minimo è:

$$t = \frac{2\pi\hbar}{(E_3 - E_1) - E_\gamma} \sim 2,06 \cdot 10^{-16} \text{ sec}$$



## Capitolo 9

# Metodi Variazionali

1. **Generalità** I metodi variazionali permettono di determinare in modo approssimato energia ed autofunzioni dello stato fondamentale e si basano sul fatto che l'energia media in un generico stato del sistema è sempre maggiore o uguale all'energia del ground state. Il metodo consiste dunque nello scegliere in maniera opportuna una funzione d'onda normalizzata e dipendente da uno o più parametri e minimizzare il valore medio dell'Hamiltoniana rispetto ai parametri.
2. **Esercizio Esame 5-9-2002.** Una particella di massa  $m$  si trova in un potenziale unidimensionale

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{per } x < 0 \\ \frac{1}{2}\alpha x^2 & \text{per } x > 0 \end{cases}$$

Valutare l'energia dello stato fondamentale col metodo variazionale.

Per applicare il metodo variazionale, bisogna prima scegliere la classe delle funzioni di prova rispetto alle quali si calcola la variazione del valor medio dell'hamiltoniana in funzione di un parametro continuo  $\alpha$ .

Il potenziale é:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{per } x < 0 \\ \frac{1}{2}\alpha x^2 & \text{per } x > 0 \end{cases}$$

e quindi si può ipotizzare che le autofunzioni dell'hamiltoniana corrispondente a questo potenziale siano le autofunzioni dell'oscillatore armonico con la condizione di avere un nodo in  $x=0$  (vedi condizioni di matching). In particolare lo stato più basso corrisponderá al primo stato eccitato dell'oscillatore armonico unidimensionale.

Consideriamo, allora, la seguente classe di funzioni di prova:

$$\psi(x) = Bxe^{-\alpha \frac{x^2}{2}}.$$

Normalizzando questa funzione d'onda si ottiene:

$$1 = \int_0^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = B^2 \int_0^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{B^2}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}}$$

Calcoliamo i valori medi dell'energia potenziale e dell'energia cinetica tra questi stati così normalizzati:

$$\bar{U} = \langle \psi | U | \psi \rangle = \int_0^\infty U |\psi(x)|^2 dx = \int_0^\infty \frac{1}{2} \alpha x^2 |\psi(x)|^2 dx = \frac{1}{2} a B^2 \frac{3}{8} \sqrt{\pi} \alpha^{-\frac{5}{2}}$$

e analogamente per l'energia cinetica

$$\bar{T} = \langle \psi | T | \psi \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty \left| \frac{d\psi}{dx} \right|^2 dx = \frac{B^2 \hbar^2}{2m} \int_0^\infty (1 - \alpha^2 x^2) e^{-\alpha x^2} dx = \frac{3}{16} \frac{B^2 \hbar^2}{m} \sqrt{\pi} \alpha^{-\frac{1}{2}}$$

e quindi

$$E(\alpha) = \frac{3}{4} \left[ a \frac{1}{\alpha} + \frac{\hbar^2}{m} \alpha \right]$$

il cui minimo, ottenuto annullando la derivata prima di  $E(\alpha)$ , si ha in corrispondenza di  $\alpha = \sqrt{\frac{am}{\hbar^2}}$ . Quindi, l'energia dello stato fondamentale, ottenuta col metodo variazionale, è data da:

$$E(\alpha) = \frac{3}{2} \hbar \sqrt{\frac{a}{m}}$$



Cosa ti ricorda questa quantità? E perché?

3. **Esercizio Esame 16-6-2003.** Determinare l'energia approssimata dello stato fondamentale di un oscillatore armonico bidimensionale di massa  $m$  e frequenza  $\omega$  usando il metodo variazionale e come funzione di prova la funzione:  $\Psi(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \alpha \cdot e^{-\alpha r}$  con  $\alpha$  variabile,  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ .

Confrontare il risultato ottenuto con il valore esatto dell'energia dello stato fondamentale.

Innanzitutto si verifica immediatamente la corretta normalizzazione di  $\Psi(r)$ :

$$\begin{aligned} \int_0^\infty r dr \int_0^{2\pi} d\phi |\Psi(r)|^2 &= 2\pi \int_0^\infty r |\Psi(r)|^2 dr = \\ &= 4\alpha^2 \int_0^\infty r e^{-2\alpha r} dr = 1 \end{aligned}$$

dove l'integrale è stato risolto per parti.

I valori medi dell'energia cinetica e dell'energia potenziale se il sistema è descritto dalla funzione d'onda  $\Psi(r)$  sono rispettivamente:

$$\begin{aligned} \bar{K} &= \langle \Psi | K | \Psi \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty \left| \frac{d}{dr} \Psi(r) \right|^2 2\pi r dr = \frac{\hbar^2}{2m} \alpha^2 \\ \bar{U} &= \langle \Psi | U | \Psi \rangle = \frac{1}{2} m \omega^2 \int_0^\infty r^2 |\Psi(r)|^2 2\pi r dr = \frac{3}{4} m \omega^2 \frac{1}{\alpha^2} \end{aligned}$$

dove gli integrali sono stati valutati al solito per parti. A questo punto l'energia del sistema in funzione di  $\alpha$  è:

$$E(\alpha) = \frac{\hbar^2}{2m} \alpha^2 + \frac{3}{4} m \omega^2 \frac{1}{\alpha^2}$$

e l'energia minima

$$E_{min} = \sqrt{\frac{3}{2}} \hbar \omega$$

si ottiene per  $\alpha = \left(\frac{3}{2} \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{4}}$ . Il valore che abbiamo ottenuto  $E_{min} \sim 1.2 \hbar \omega$  è di poco più grande del valore esatto  $\hbar \omega$ .



# Appendice A

## A.1 Costanti Utili

$\hbar = 1.054 \cdot 10^{-34}$	Costante di Planck
$c = 2.998 \cdot 10^8 m/s$	Velocità della luce nel vuoto
$q = -1.602 \cdot 10^{-19} Coulomb$	Carica dell'elettrone
$m_e = 9.1 \cdot 10^{-31} Kg$	Massa dell'elettrone
$M_n = M_p = 1.67 \cdot 10^{-27} Kg$	Massa del protone e del neutrone
$\alpha = \frac{1}{137}$	Costante di struttura fine
$a_0 = 0.529 Angstrom$	Raggio di Bohr

## A.2 Fattori di Conversione

$1 Angstrom = 10^{-10} m$
$1 Fermi = 10^{-15} m$
$1 eV = 1.602 \cdot 10^{-19} Joule$

## A.3 Formule Utili



# Bibliografia

- [1] C. Cohen-Tannoudji, et al., *Quantum Mechanics*, 2 volumi, (John Wiley and Sons, 1992).
- [2] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, (Addison-Wesley Publishing Company 1994).
- [3] A. Messiah, *Quantum Mechanics*, (North-Holland Publishing Company 1986).
- [4] S. Flugge, *Practical Quantum Mechanics*, (Springer-Verlag 1994).
- [5] R. Feynman, *La Fisica di Feynman*, 3 Volumi, (Zanichelli, 2001).