

Esercizi e note varie di meccanica quantistica

Claudio Bonati

(da usare a proprio rischio e pericolo)

- 1) Luce polarizzata e formalismo MQ: pp. 2-5
- 2) Dettagli/sorprese fisico-matematici: pp. 6-7
- 3) Casi base: pp. 8-12
- 4) Stati legati 1d: pp. 13-29
- 5) Stati di scattering 1d: pp. 30-41
- 6) Matrice di trasferimento: pp. 42-46
- 7) Sistemi a due livelli: pp. 47-49
- 8) Trasformazioni di Galileo: pp. 50-51
- 9) Oscillatore armonico: pp. 52-62
- 10) Momento angolare orbitale: pp. 63-69
- 11) Moto in campo centrale: pp. 70-79
- 12) Spin 1/2 e applicazioni: pp. 80-86
- 13) Matrice densità: pp. 87-92
- 14) Somme di momenti angolari e Wigner-Eckart: pp. 93-102
- 15) Teoria delle perturbazioni basic: pp. 103-109
- 16) Teoria delle perturbazioni: pp. 109-123
- 17) Invarianza di gauge: pp. 124-127
- 18) Particelle identiche: pp. 128-133
- 19) Teoria delle perturbazioni dipendente dal tempo: pp. 134-141
- 20) Interazione elettromagnetica: pp. 142-148
- 21) Scattering: pp. 148-153

"Quindi non avete una sola risposta alle vostre domande?"

"Adso, se l'avessi insegnerei teologia a Parigi"

"A Parigi hanno sempre la risposta vera?"

"Mai - disse Guglielmo - ma sono molto sicuri dei loro errori"

U. Eco

Luce polarizzata

Consideriamo la forma più generale di onda piana che propaga lungo l'asse $\hat{z}$ e rappresenta un campo elettrico: $\vec{E} = \text{Re} \{ \vec{E}_0 e^{i(kz - \omega t)} \}$ dove $\omega = kc$, $\vec{E}_0 \cdot \hat{z} = 0$ e

$\vec{E}_0$ è in generale un vettore complesso.

In generale $\vec{E}_0^2 \in \mathbb{C}$ e si ha $\vec{E}_0^2 = |\vec{E}_0|^2 e^{-2i\alpha}$, quindi se introduciamo il vettore complesso

$\vec{b}$ tramite $\vec{E}_0 = \vec{b} e^{-i\alpha}$ si ha $\vec{b}^2 = |\vec{E}_0|^2 \in \mathbb{R}$ e si ha

$$\vec{E} = \text{Re} \{ \vec{b} e^{i(kz - \omega t - \alpha)} \}$$

Scriviamo $\vec{b}$ tramite i due vettori reali $\vec{b}_1$ e $\vec{b}_2$ come $\vec{b} = \vec{b}_1 + i\vec{b}_2$; poiché $\vec{b}^2 \in \mathbb{R}$ e

$\vec{b}^2 = \vec{b}_1^2 - \vec{b}_2^2 + 2i\vec{b}_1 \cdot \vec{b}_2$ si deve avere $\vec{b}_1 \cdot \vec{b}_2 = 0$ e ovviamente $\vec{b}_1 \cdot \hat{z} = 0$ e $\vec{b}_2 \cdot \hat{z} = 0$ in quanto

si aveva $\vec{E}_0 \cdot \hat{z} = 0$. Con una rotazione attorno all'asse $\hat{z}$ possiamo quindi ricondurci al caso

$\vec{b}_1 = |\vec{b}_1| \hat{x}$ e $\vec{b}_2 = \pm |\vec{b}_2| \hat{y}$, quindi

$$\begin{cases} E_x = \text{Re} \{ \hat{x} \cdot \vec{b}_1 e^{i(kz - \omega t - \alpha)} \} = |\vec{b}_1| \cos(\omega t - kz + \alpha) \\ E_y = \text{Re} \{ \hat{y} \cdot \vec{b}_2 e^{i(kz - \omega t - \alpha)} \} = \pm |\vec{b}_2| \sin(\omega t - kz + \alpha) \end{cases}$$

A z fissato il vettore (E_x, E_y) si muove nel piano xy percorrendo una ellisse (in senso orario con il segno superiore, orario con il segno inferiore). Se $|\vec{b}_1| = |\vec{b}_2|$ si ha polarizz. circolare se $|\vec{b}_1| = 0$ o $|\vec{b}_2| = 0$ si ha polarizzazione lineare.

NOTA: per la trigonometria necessaria per identificare gli assi principali dell'ellisse

vedi BORN, WOLF "Principles of optics" § 1.4.2

Polaroid e valori medi di operatori

Associamo al campo elettrico il vettore complesso 2d $\vec{\psi}$, le cui componenti sono le componenti x e y di $\vec{E}_0$: $\vec{\psi} = \begin{pmatrix} E_1 \\ E_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |E_1| e^{i\phi_1} \\ |E_2| e^{i\phi_2} \end{pmatrix}$ quindi $\vec{E} = \text{Re} (E_1 e^{i(kz - \omega t)}) \hat{x} + \text{Re} (E_2 e^{i(kz - \omega t)}) \hat{y}$

L'intensità del campo elettrico mediata su un ciclo è

$$I = \langle \vec{E}^2 \rangle = \frac{1}{2} (|E_1|^2 + |E_2|^2) = \frac{1}{2} \vec{\psi}^* \cdot \vec{\psi} = \frac{1}{2} (\psi_1^* \psi_1 + \psi_2^* \psi_2)$$

dove si è usata il prodotto scalare $(u, v) = \sum_{i=1}^2 u_i^* v_i$.

Supponiamo ora di avere un filtro che seleziona solo la componente polarizzata lungo $\hat{x}$ del

campo elettrico, quindi $\vec{\psi} = \begin{pmatrix} E_1 \\ E_2 \end{pmatrix} \rightarrow \text{filter} \rightarrow \begin{pmatrix} E_1 \\ 0 \end{pmatrix} = \vec{\psi}_x$

L'intensità in uscita dal filtro è data, a parte il solito fattore $1/2$, da $\vec{\psi}_x^* \cdot \vec{\psi}_x$, che scriviamo

in un modo diverso: notiamo che $\vec{\psi}_x = P_x \vec{\psi}$ con $P_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$.

È immediato verificare che $P_x^2 = P_x$ e che $P_x^+ = P_x$, quindi P_x è un proiettore e si ha che l'intensità all'uscita del polaroid è

$$I_x = (\vec{\psi}_x, \vec{\psi}_x) = (P_x \vec{\psi}, P_x \vec{\psi}) = (\vec{\psi}, P_x^+ P_x \vec{\psi}) = (\vec{\psi}, P_x^2 \vec{\psi}) = (\vec{\psi}, P_x \vec{\psi})$$

$$\text{dove si è usata } (Hu, v) = \sum_{i\alpha} (H_{i\alpha} u_\alpha)^* v_i = \sum_{i\alpha} u_\alpha^* H_{i\alpha}^* v_i = \sum_{i\alpha} u_\alpha^* \sum_i (H^{T*})_{\alpha i} v_i = (u, H^+ v)$$

che è la def. di operatore aggiunto.

In modo identico, con un polaroid lungo $\hat{y}$ si sarebbe ottenuto

$$I_y = (\vec{\psi}, P_y \vec{\psi}) \quad \text{con } P_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{e nuovamente } P_y^2 = P_y = P_y^+$$

Supponiamo ora che il polaroid sia inclinato di $\pi/4$ rispetto all'asse $\hat{x}$, selezionando quindi la pol. lineare diretta lungo $\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} + \hat{y})$. Si può procedere in due modi: il primo modo consiste nel descrivere il campo elettrico usando due polarizzazioni ortogonali, di cui una lungo $\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} + \hat{y})$, abbiamo quindi:

$$\vec{\psi} = \begin{pmatrix} E_1 \\ E_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(E_1 + E_2) + \frac{1}{2}(E_1 - E_2) \\ \frac{1}{2}(E_1 + E_2) + \frac{1}{2}(E_2 - E_1) \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{pol. } \pi/4} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} E_1 + E_2 \\ E_1 + E_2 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} E_1 - E_2 \\ E_2 - E_1 \end{pmatrix} \xleftarrow{\text{pol. } -\pi/4}$$

Selezionando la componente a $\pi/4$ abbiamo quindi $\vec{\psi} \rightarrow \text{filter} \rightarrow \vec{\psi}_{\pi/4} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} E_1 + E_2 \\ E_1 + E_2 \end{pmatrix}$

e $\vec{\psi}_{\pi/4} = P_{\pi/4} \vec{\psi}$ con $P_{\pi/4} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$. Si vede subito che $P_{\pi/4}^2 = P_{\pi/4} = P_{\pi/4}^+$ e quindi $I_{\pi/4} = (\vec{\psi}, P_{\pi/4} \vec{\psi})$.

Analogamente per la polarizzazione a $-\pi/4$ si ha $\vec{\psi}_{-\pi/4} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} E_1 - E_2 \\ E_2 - E_1 \end{pmatrix} = P_{-\pi/4} \vec{\psi}$ con $P_{-\pi/4} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$, $P_{-\pi/4}^2 = P_{-\pi/4} = P_{-\pi/4}^+$.

Il secondo modo consiste nell'usare una rotazione per scrivere direttamente i vettori nella base ruotata; sia

$$U = \begin{pmatrix} \cos \pi/4 & -\sin \pi/4 \\ \sin \pi/4 & \cos \pi/4 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{e moltiplichiamo } \vec{\psi}_x = P_x \vec{\psi} \text{ per}$$

U ottenendo (usando $U^+ U = 1$)

$$U \vec{\psi}_x = \boxed{U P_x U^+} U \vec{\psi} \quad \text{rotaz. delle componenti; cambio base}$$

operatore P_x nella nuova base, corrispondente a $P_{\pi/4}$

$$U P_x U^+ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = P_{\pi/4} \quad \text{e in modo identico}$$

$$U P_y U^+ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} = P_{-\pi/4}$$

È interessante calcolare gli autovettori di U , che hanno una semplice interpretazione fisica:

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad 0 = \det(U - \lambda \mathbb{1}) = \det(\frac{1}{\sqrt{2}} U - \lambda \mathbb{1}) = \det \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} - \lambda & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} - \lambda \end{pmatrix} = (1 - \sqrt{2} \lambda)^2 + 1$$

$$\text{quindi } 1 - \sqrt{2} \lambda = \pm i \quad \text{e} \quad \lambda = \frac{1 \pm i}{\sqrt{2}} \quad (= e^{\pm i \pi/4})$$

$$\lambda_1 = \frac{1+i}{\sqrt{2}} ; \quad U \vec{v}_1 = \lambda_1 \vec{v}_1, \quad \vec{v}_1 = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad \begin{cases} a-b = (1+i)a \\ a+b = (1+i)b \end{cases} \Rightarrow b = -ia$$

$$\vec{v}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} - i\hat{y})$$

$$\lambda_2 = \frac{1-i}{\sqrt{2}} ; \quad U \vec{v}_2 = \lambda_2 \vec{v}_2 \quad a-b = (1-i)a \Rightarrow b = ia$$

$$\vec{v}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} + i\hat{y})$$

Gli autovettori di U corrispondono alle polarizzazioni circolari, che sotto una rotazione restano invariate a meno di una fase.

Cosa succede usando due polaroid in successione?

$$\vec{\psi} \rightarrow \text{filtro 1} \rightarrow P_1 \vec{\psi} \rightarrow \text{filtro 2} \rightarrow P_2 P_1 \vec{\psi}$$

$$\text{quindi } \langle I \rangle = \langle P_2 P_1 \vec{\psi}, P_2 P_1 \vec{\psi} \rangle = \langle P_1 \vec{\psi}, P_2^2 P_1 \vec{\psi} \rangle = \langle \vec{\psi}, P_1 P_2 P_1 \vec{\psi} \rangle$$

$$\text{Usando ad esempio } P_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ e } P_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \text{ si ha}$$

$$P_1 P_2 P_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\text{Nota che } P_1 P_2 P_1 \text{ non } \underline{\text{è}} \text{ un proiettore } (P_1 P_2 P_1)^2 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \neq \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = P_1 P_2 P_1, \text{ tuttavia}$$

$$M = P_1 P_2 P_1 \text{ è ancora hermitiana e questa è la cosa fondamentale affinché sia } (\vec{\psi}, M \vec{\psi}) \in \mathbb{R}$$

$$(\vec{\psi}, M \vec{\psi})^* = \sum_{i,j} (\psi_i^* M_{ij} \psi_j)^* = \sum_{i,j} \psi_i M_{ij}^* \psi_j^* = \sum_{i,j} \psi_j^* M_{ji} \psi_i = (\vec{\psi}, M \vec{\psi})$$

$\underbrace{\quad}_{M^* = M_{ji} \text{ se } M^t = M}$

In generale tutte le quantità quadratiche e reali si possono scrivere come $(\vec{\psi}, M \vec{\psi})$ con $M^t = M$.

Il caso di luce non polarizzata

Luce non polarizzata: miscela di luce polarizzata verticalmente e orizzontalmente con fase relativa non fissata.

Si può pensare come sovrapposizione di impulsi polarizzati ognuno con fase casuale, supponendo

"tempo di misura" $\gg$ "tempo di un impulso". In questo modo quando si calcolano le intensità mediate nel tempo i termini di interferenza si cancellano a causa delle fasi casuali.

NOTA: la luce non polarizzata non è rappresentabile tramite un vettore.

Supponiamo quindi di avere un fascio con due componenti polarizzate, ψ e φ , che però a causa delle fasi casuali non interferiscono nel calcolo dell'intensità media. Per una osservabile M si ha allora

$$\langle I_M \rangle = (\psi, M \psi) + (\varphi, M \varphi) = \sum_{i,j} \psi_i^* M_{ij} \psi_j + \sum_{i,j} \varphi_i^* M_{ij} \varphi_j = \sum_{i,j} M_{ij} (\psi_j \psi_i^* + \varphi_j \varphi_i^*) = \text{Tr}(M \rho)$$

$$\text{dove } \rho_{ij} = \psi_i \psi_j^* + \varphi_i \varphi_j^*.$$

Chiaramente $\rho = \rho^\dagger$ inoltre dato v generico si ha

$$(v, \rho v) = \sum_{i,j} v_i^* \rho_{ij} v_j = |v, \psi|^2 + |v, \varphi|^2 \geq 0 \quad \text{quindi } \rho \text{ è semidefinita positiva.}$$

Se normalizziamo con $2I$, introducendo $\rho^1 = \frac{1}{\text{Tr}\rho} \rho$ allora ρ^1 è hermitiana, semidefinita positiva e a traccia unitaria (matrice densità in meccanica quantistica).

Per una matrice che soddisfa queste proprietà esiste una base in cui si ha

$$\rho^1 = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix} \text{ con } a, b \geq 0 \text{ e } a+b=1$$

Si vede facilmente che esiste un vettore w t.c. $\rho^1_{ij} = w_i w_j^*$ se e solo se $(\rho^1)^2 = \rho^1$ (o, equivalentemente, se $\text{Tr}(\rho^1)^2 = 1$). Se queste condizioni sono soddisfatte allora la luce descritta dalla matrice ρ^1 è luce polarizzata (stato puro in meccanica quantistica) altrimenti la luce non è polarizzata (stato misto in meccanica quantistica).

In generale ρ^1 dipende da 3 parametri indipendenti Q, U, V (parametri di Stokes)

$$\rho^1 = \frac{1}{2I} \begin{pmatrix} I+Q & -U-iV \\ -U+iV & I-Q \end{pmatrix} \quad \text{luce polarizz.} \Leftrightarrow I^2 = Q^2 + U^2 + V^2$$

Alcuni esempi da Gieres "Mathematical surprises and Dirac's formalism in quantum mechanics" (arxiv 9907069)

1) $[Q, P] = i\hbar \mathbb{1}$ e prendendo la traccia $\text{Tr} \mathbb{1} \neq 0$
 $\text{Tr} [Q, P] = \text{Tr} (QP) - \text{Tr} (PQ) = 0$

Questo mostra che lo spazio di Hilbert su cui Q, P agiscono non può essere finito dim.
 Se $\dim H = \infty$ la traccia in generale non esiste e la regola $\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA)$ richiede attenzione ai domini, in quanto $D(AB) \neq D(BA)$ in generale.

$$[Q^m, P] = [Q Q^{m-1}, P] = Q [Q^{m-1}, P] + [Q, P] Q^{m-1} = Q [Q^{m-1}, P] + i\hbar Q^{m-1}$$

quindi si vuole subito per induzione che $[Q^m, P] = i m \hbar Q^{m-1}$, da cui si ottiene

(ricordiamo che $\|A\| = \sup_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}$)

$$m \hbar \|Q^{m-1}\| = \|Q^m P - P Q^m\| \leq \|Q^m P\| + \|P Q^m\| \leq 2 \|Q\| \cdot \|P\| \cdot \|Q^{m-1}\|$$

usando $\|A+B\| \leq \|A\| + \|B\|$ e $\|AB\| \leq \|A\| \cdot \|B\|$

quindi si trova $m \hbar \leq 2 \|Q\| \cdot \|P\|$ per ogni $m \in \mathbb{N}$ quindi almeno una tra Q e P non può essere un operatore limitato.

2) $P = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$; $Q = x$ sia $A = PQ^3 + Q^3P$ allora abbiamo

$$A^+ = (PQ^3 + Q^3P)^+ = Q^3P + PQ^3 = A \quad \text{quindi gli autovalori di } A \text{ sono reali.}$$

Sia ora $f(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} |x|^{-3/2} e^{-\frac{1}{4x^2}} & \text{per } x \neq 0 \\ 0 & \text{per } x = 0 \end{cases}$ allora abbiamo (consideriamo $x > 0$ per semplicità)

$$\begin{aligned} A f(x) &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} x^{3/2} e^{-\frac{1}{4x^2}} \right) - i\hbar x^3 \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} x^{-3/2} e^{-\frac{1}{4x^2}} \right) = \\ &= -\frac{i\hbar}{\sqrt{2}} \left(\frac{3}{2} x^{1/2} e^{-\frac{1}{4x^2}} + x^{3/2} e^{-\frac{1}{4x^2}} \frac{\partial}{\partial x} \right) + \\ &\quad - \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} x^3 \left(-\frac{3}{2} x^{-5/2} e^{-\frac{1}{4x^2}} + x^{-3/2} e^{-\frac{1}{4x^2}} \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\hbar \frac{1}{\sqrt{2}} x^{-3/2} e^{-\frac{1}{4x^2}} = -i\hbar f(x) \end{aligned}$$

quindi $f(x)$ è autostato di A con autovalore $-i\hbar \notin \mathbb{R}$. Smentire

$$\|f\|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2} |x|^{-3} e^{-\frac{1}{2x^2}} dx = \int_0^{\infty} x^{-3} e^{-\frac{1}{2x^2}} dx = e^{-\frac{1}{2x^2}} \Big|_0^{\infty} = 1.$$

Tuttavia $D(A) = D(PQ^3) \cap D(Q^3P) \subset D(Q^3)$ ma $x^3 f(x) \propto x^{3/2} e^{-\frac{1}{4x^2}} \sim x^{3/2}$ per $x \rightarrow \infty$

quindi $x^3 f(x) \notin L^2(\mathbb{R})$, di conseguenza $f \notin D(Q^3)$ e $f \notin D(A)$.

3) $L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$, $[L_z, \varphi] = -i\hbar \mathbb{1}$

Un insieme completo di autofunzioni di L_z è $\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$ con $m \in \mathbb{Z}$

con $L_2 \psi_m = m\hbar \psi_m$.

Consideriamo ora l'elemento di matrice di $[L_2, \varphi] = -i\hbar \mathbb{1}$ tra stati ψ_m :

$$\begin{aligned} -i\hbar &= \langle \psi_m | -i\hbar \mathbb{1} | \psi_m \rangle = \langle \psi_m | L_2 \varphi \psi_m \rangle - \langle \psi_m | \varphi L_2 \psi_m \rangle = \\ &= \langle L_2^\dagger \psi_m | \varphi \psi_m \rangle - m\hbar \langle \psi_m | \varphi \psi_m \rangle = \\ &= \langle L_2 \psi_m | \varphi \psi_m \rangle - m\hbar \langle \psi_m | \varphi \psi_m \rangle = \\ &= m\hbar \langle \psi_m | \varphi \psi_m \rangle - m\hbar \langle \psi_m | \varphi \psi_m \rangle = 0 \end{aligned}$$

Tuttavia $\varphi \psi_m$ non è periodico, quindi non è nel dominio su cui $L_2 = L_2^\dagger$.

Buca infinita

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } |x| \leq a/2 \\ \infty & \text{se } |x| > a/2 \end{cases} \quad \text{in pratica particella vincolata su } [-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}] \text{ con} \\ \text{condiz. al contorno } \psi(-\frac{a}{2}) = \psi(\frac{a}{2}) = 0 \\ (\text{Si vedrà meglio come limite di buca finita})$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' = E \psi \quad \text{con} \quad \psi(-\frac{a}{2}) = \psi(\frac{a}{2}) = 0 \quad \text{cerchiamo sol. al valore di } E$$

$E < 0$ La sol. generale dell'eq. di Schrödinger è $\psi(x) = A e^{-kx} + B e^{kx}$

con $E = -\frac{\hbar^2}{2m} k^2$ cioè $k = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}$

$$\begin{cases} \psi(-a/2) = A e^{ak/2} + B e^{-ak/2} = 0 \\ \psi(a/2) = A e^{-ak/2} + B e^{ak/2} = 0 \end{cases} \rightarrow A e^{ak/2} + B e^{3ak/2} = 0$$

quindi $B(e^{-ak/2} - e^{3ak/2}) = 0$ se $B=0$ poi $A=0$ e $\psi=0$,

se $B \neq 0$ allora $e^{2ak} = 1$ che ha sol. $k=0$ che corrisponde a $E=0$

mentre vorremmo porci assieme a $E < 0$, quindi nessuna soluzione.

$E = 0$ $\psi'' = 0$, $\psi = A + Bx$ $\begin{cases} \psi(-a/2) = A - \frac{a}{2}B = 0 \\ \psi(a/2) = A + \frac{a}{2}B = 0 \end{cases} \Rightarrow A=B=0$, quindi $\psi=0$ nessuna soluzione

$E > 0$ La soluzione generale dell'eq. di Schrödinger si può scrivere in diverse forme equiv.

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$$

$$= A \sin(kx) + B \cos(kx)$$

dove ovviamente A, B non sono sempre gli stessi

$$= A \sin(k(x+B))$$

ma indichiamo generiche costanti.

Usiamo l'ultima forma, che in questo caso è la più conveniente.

$$\psi(-\frac{a}{2}) = A \sin[k(-\frac{a}{2} + B)] = 0 \quad \text{quindi} \quad k(-\frac{a}{2} + B) = m\pi \quad \text{con } m \in \mathbb{Z}$$

$$B = \frac{a}{2} + \frac{m\pi}{k} \quad \text{e dunque}$$

$$\psi(x) = A \sin[k(x + \frac{a}{2} + \frac{m\pi}{k})] = A \sin[k(x + \frac{a}{2}) + m\pi] = (-1)^m A \sin[k(x + \frac{a}{2})]$$

quindi m è ininfluente: il $(-1)^m$ si riassorbe in A . Per lo stesso motivo possiamo assumere $k > 0$

$$\psi(a/2) = 0 \quad \sin(ka) = 0, \quad \text{quindi} \quad ka = n\pi \quad \text{con } n \in \mathbb{N} \setminus \{0\} \quad (\text{per } n=0, \psi=0)$$

$$\text{quindi} \quad k = \frac{n\pi}{a}, \quad \text{livelli energetici} \quad E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \quad (\text{spettro discreto})$$

$$\text{autofunzioni} \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left[\frac{n\pi}{a}(x + \frac{a}{2})\right] \quad (\sqrt{\frac{2}{a}} \text{ fissato da } \int_{-a/2}^{a/2} |\psi_n|^2 dx = 1)$$

Comments sulla completezza degli stati trovati: il $+a/2$ dentro parentesi è dovuto al fatto che la buca è in $[-a/2, a/2]$. Fosse stata in $[0, a]$ questo non ci sarebbe stato

Consideriamo il caso $[0, a]$, per cui i ragionamenti seguenti si visualizzano meglio.

Sia $\varphi(x) \in \mathbb{L}^2([0, a])$, e consideriamo $f(x) = \begin{cases} \varphi(x) & \text{se } x \in [0, a] \\ -\varphi(-x) & \text{se } x \in [-a, 0] \end{cases}$, quindi $f \in \mathbb{L}^2([-a, a])$.

La base trigonometrica di $\mathbb{L}^2([-a, a])$ è $\left\{ \sin\left(\frac{2\pi}{2a}nx\right), \cos\left(\frac{2\pi}{2a}nx\right) \right\}$, quindi f è sviluppabile su questa base, ma f è dispari, quindi $\int f(x) \cos\left(\frac{2\pi}{2a}nx\right) dx = 0$ e per sviluppare f bastano i seni. Poiché φ è una restrizione di f , per sviluppare φ bastano $\sin\left(\frac{\pi}{a}nx\right)$, che sono le autofunzioni trovate prima, che formano dunque una base completa di $\mathbb{L}^2([0, a])$.]

Proprietà delle autofunzioni ottenute

$$\begin{aligned} n \text{ dispari: } n = 2l+1, \quad \sin\left[\frac{\pi n}{a}\left(x + \frac{a}{2}\right)\right] &= \sin\left[\frac{\pi n}{a}x + \frac{\pi}{2}(2l+1)\right] = \sin\left[\frac{\pi n}{a}x + l\pi + \frac{\pi}{2}\right] = \\ &= \cos\left(\frac{\pi n}{a}x + l\pi\right) = (-1)^l \cos\left(\frac{\pi n}{a}x\right) \end{aligned}$$

autofunzione pari, $2l = n-1$ zeri non banali (cioè diversi da $\pm a/2$)

$$n \text{ pari: } n = 2l \quad \sin\left[\frac{\pi n}{a}\left(x + \frac{a}{2}\right)\right] = \sin\left[\frac{\pi n}{a}x + l\pi\right] = (-1)^l \sin\left(\frac{\pi n}{a}x\right)$$

autofunzione dispari, $n-1$ zeri non banali (cioè diversi da $\pm a/2$)

Particella libera

$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' = E \psi$ e cerchiamo soluzioni con $E \geq 0$. Le sol. possono essere scritte come combin. dei termini

e^{ikx} con $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$, quindi per ogni valore di E ci sono due autofunzioni corrispondenti a $k = \pm \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ (per $k=0$ solo una, $E=0$ deve essere trattato per continuità, vedi completamento dopo)

queste sono onde autofunzioni

dell'impulso: $\hat{p} e^{ikx} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} e^{ikx} = \hbar k e^{ikx}$ quindi l'impulso è $\hbar k$.

Funzioni non normalizzabili, quindi spettro continuo

Usando $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(k-k')x} dx = 2\pi \delta(k-k')$ si vede subito che $\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$ soddisfa

$$\int \psi_{k'}^*(x) \psi_k(x) dx = \delta(k'-k) \quad \text{quindi} \quad \langle x|k \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$$

Mostriamo ora la completezza di ψ_k : usiamo $|k\rangle$ come ket otteniamo

$$\langle k|\psi \rangle = \sum_x \langle k|x \rangle \langle x|\psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} \psi(x) dx = \tilde{\psi}(k)$$

e il teorema di inversione di Fourier si può riscrivere come

$$\langle x|\psi\rangle = \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} \tilde{\psi}(k) dk = \sum_k \langle x|k\rangle \langle k|\psi\rangle$$

che implica quindi la completezza $\sum_k |k\rangle \langle k| = 1$ (Nota che è servito anche $k=0$)

Poiché k può essere sia positivo che negativo è difficile in questa forma normalizzare gli stati con $\delta(E-E')$ in quanto a ogni E sono associati due valori

Se si vuole questa normalizzazione meglio usare una coppia con un indice discreto $j=0,1$ e $k \geq 0$

$$\begin{cases} \psi_{k,0} = e^{ikx} \\ \psi_{k,1} = e^{-ikx} \end{cases} \quad (\text{convenzionalmente anche con } k=0)$$

allora $\langle \psi_{k,0} | \psi_{k',0} \rangle = 2\pi \delta(k-k')$, $\langle \psi_{k,1} | \psi_{k',1} \rangle = 2\pi \delta(k-k')$

e $\langle \psi_{k,0} | \psi_{k',1} \rangle = 0$, quindi $\langle \psi_{k,i} | \psi_{k',j} \rangle = \delta_{ij} 2\pi \delta(k-k')$

poiché ora $k, k' \geq 0$ si può usare $k = \sqrt{2mE}/\hbar$

$$\delta(k-k') = \delta\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} - \frac{\sqrt{2mE'}}{\hbar}\right) = \frac{1}{\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \frac{1}{2\sqrt{E}}} \delta(E-E') \quad \text{per aggiustare le normalizz.}$$

Alternativamente si sarebbe potuto usare (sempre $k \geq 0$)

$$\begin{cases} \psi_{k,0} = \cos(kx) \\ \psi_{k,1} = \sin(kx) \end{cases} \quad \text{e procedere in modo analogo. Anche in questo caso si vede dunque che le autof. possono essere scelte pari o dispari}$$

Poiché abbiamo mostrato la completezza degli stati con funz. d'onda e^{ikx} abbiamo esaurito lo spettro. Ma perché soluz. di $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' = E\psi$ con $E < 0$ tipo $e^{\pm kx}$ con $E = -\frac{\hbar^2}{2m}k^2$ non sono accettabili? Questione delicata perché stiamo usando soluz. non normalizzabili (fuori dallo spazio di Hilbert $L^2(\mathbb{R})$)

di $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' = E\psi$

Formalmente λ appartiene allo spettro dell'operatore A se uno dei seguenti casi è verificato

- 1) $\lambda - A$ non è invertibile (spettro puntuale o discreto)
- 2) $\exists m(\lambda - A)$ è denso in H , $\lambda - A$ è invertibile ma $(\lambda - A)^{-1}$ non è continuo (spettro continuo)
- 3) $\exists m(\lambda - A)$ non è denso in H (spettro residuo, assente se $A=A^\dagger$)

con queste def. non si esce mai dallo spazio di Hilbert. Lo spettro puntuale è dato dai λ per cui $H\psi = \lambda\psi$ ammette sol. in H (sol. normalizzabili di Schrödinger)

Lemma di Weyl: se $A = A^\dagger$, $\lambda \in \sigma(A) \iff$ esiste una successione $z_m \in H$ tale che $\|z_m\| = 1$ e $\lim \|(\lambda - A)z_m\| \rightarrow 0$.

(nel caso discreto $z_m \equiv \psi$ autostato, nel caso continuo $z_m =$ autostati "approssimati")

dim facile di $\Leftarrow$: se non fosse $\lambda \in \sigma(A)$

$$1 = \|z_m\| = \|(\lambda - A)^{-1}(\lambda - A)z_m\| \leq \|(\lambda - A)^{-1}\| \|(\lambda - A)z_m\| \rightarrow 0 \quad \text{assurdo } \square$$

Dalla dis. di Schwarz otteniamo anche

$$|\lambda - \langle z_m | A z_m \rangle| = |\langle z_m | (\lambda - A) z_m \rangle| \leq \|z_m\| \|(\lambda - A)z_m\| \rightarrow 0$$

quindi se $\lambda \in \sigma(A)$ deve esistere una succ. z_m tale che $\langle z_m | A z_m \rangle \rightarrow \lambda$

Consideriamo $H = \frac{1}{2m} p^2 = \frac{1}{2m} p^\dagger p$ allora $\langle \psi | H | \psi \rangle = \frac{1}{2m} \langle \psi | p^\dagger p | \psi \rangle = \frac{1}{2m} \|p|\psi\rangle\|^2 \geq 0$
quindi lo spettro è necessariamente non negativo.

Torniamo ora all'equaz. differenziale e supponiamo che $V(x) \rightarrow 0$ per $|x| \rightarrow \pm\infty$, con $\psi(x)$ soluz. di $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V\psi = E\psi$ e $E > 0$. Allora ψ è comb. lineare di $e^{\pm ikx}$ per x grande. Introduciamo $\psi_m = e^{-x^2/2m^2}\psi$, allora

$$\|\psi_m\|^2 = \int |\psi_m(x)|^2 \sim m \quad \text{per } m \rightarrow \infty, \text{ inoltre}$$

$$\begin{aligned} H\psi_m &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} (e^{-x^2/2m^2}\psi) + V e^{-x^2/2m^2}\psi = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{x^2}{m^4} e^{-x^2/2m^2}\psi - 2\frac{x}{m^2} e^{-x^2/2m^2}\psi' + e^{-x^2/2m^2}\psi'' \right) + V e^{-x^2/2m^2}\psi \quad \text{quindi} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \|H\psi_m - E\psi_m\|^2 &= \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2 \left\| \frac{x^2}{m^4} e^{-x^2/2m^2}\psi - 2\frac{x}{m^2} e^{-x^2/2m^2}\psi' \right\|^2 \leq A \left\| \frac{x^2}{m^4} e^{-x^2/2m^2} \right\|^2 + B \left\| \frac{x}{m^2} e^{-x^2/2m^2} \right\|^2 \\ &\leq a \frac{1}{m^4} + b \frac{1}{m^2} \rightarrow 0 \end{aligned}$$

quindi $\psi_m / \|\psi_m\|$ è una successione di Weyl e E è nello spettro continuo (note: ψ non norm. quindi non può essere nello spettro discreto)

Operatore di inversione spaziale

$$P: \psi(x) \rightarrow \psi(-x)$$

$$P \text{ è unitario: } \langle P\psi | P\psi \rangle = \int \psi^*(-x)\psi(-x)dx = \int \psi^*(x)\psi(x)dx = \langle \psi | \psi \rangle$$

$$P \text{ è autoaggiunto } \langle \psi | P\psi \rangle = \int \psi^*(x)\psi(-x)dx = \int \psi^*(-x)\psi(x)dx = \langle P\psi | \psi \rangle$$

$$\text{ovviamente } P^2 = 1 \text{ e da } P\psi = \lambda\psi \text{ segue quindi } \psi = P^2\psi = \lambda^2\psi$$

$$\text{e dunque } \lambda = \pm 1$$

Se z_m è succ. come nel lemma di Weyl allora $\|(\lambda - P)z_m\| \rightarrow 0$

$$\text{quindi } \left| \|\lambda z_m\| - \|Pz_m\| \right| \leq \|(\lambda - P)z_m\| \rightarrow 0 \quad \text{ma } \|Pz_m\| = 1$$

e $\|\lambda z_m\| = |\lambda|$ quindi $|\lambda| = 1$, inoltre $P^\dagger = P$ quindi lo spettro di P è reale e $\lambda = \pm 1$ sono gli unici valori ammissibili! 1

Se $V(x) = V(-x)$ allora

$$\begin{aligned} H P \psi &= H \psi(-x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(-x) + V(x) \psi(-x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{d(-x)^2} \psi(-x) + V(-x) \psi(-x) = \\ &= P H \psi \end{aligned}$$

quindi $[H, P] = 0$ e H, P possono essere diagonalizzati simultaneamente.

Un particolare è possibile utilizzare una base di autostati comune di H e P , di conseguenza si può scegliere una base in cui tutte le autofunzioni di H sono pari o dispari.

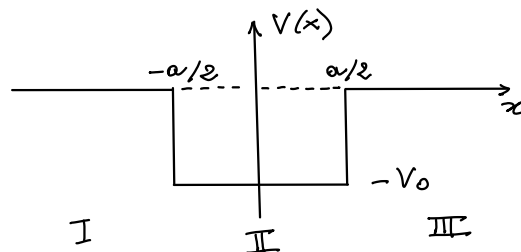
Se ψ è una autofunzione non degen. di H , allora deve anche essere necessariamente autof. di P , in quanto $H P \psi = P H \psi = \lambda P \psi$, quindi $P \psi$ è autostato di H con lo stesso autovalore e per la assenza di deg. $P \psi = \mu \psi$ cioè ψ è autovettore di P . Gli autovettori non deg. di H sono quindi necessariamente associati a autofunzioni pari o dispari (vedi caso buca infinita).

Nel caso sono presenti deg. questo non è automatico (e^{ikx}, e^{-ikx} per part. libera) ma le autof. possono essere tutte pari/dispari ($\sin(kx), \cos(kx)$ per part. libera).

Buca quadrata

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } |x| > a/2 \\ -V_0 & \text{se } |x| < a/2 \end{cases}$$

con $V_0 > 0$



Cerchiamo soluzioni legate di $-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + V(x)\psi = E\psi$, quindi $\psi, \psi', \psi'' \in L^2(\mathbb{R})$ e ψ e ψ' devono essere continue se V è non singolare.

Se $E > 0$ la soluzione nelle regioni I e III sono della forma $A \exp(\pm i \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x)$ e non sono normalizzabili

Se $E < -V_0$ non ci può essere soluzione normalizzabile, infatti da $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ segue

$$E = \langle \psi | H | \psi \rangle = \frac{1}{2m} \langle \psi | p^2 | \psi \rangle + \langle \psi | V | \psi \rangle = \frac{1}{2m} \|p|\psi\rangle\|^2 + \int |\psi(x)|^2 V(x) dx \geq \geq [\min_x V(x)] \int |\psi(x)|^2 dx = \min_x V(x).$$

Supporremo quindi nel seguito $-V_0 < E < 0$. Le soluzioni indipendenti in questo caso nelle tre regioni sono quindi

$$\begin{array}{lll} \text{I e III} & : & e^{\rho x}, e^{-\rho x} \quad \text{con } \rho = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (E < 0) \\ \text{II} & : & e^{ikx}, e^{-ikx} \quad \text{con } k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0)} \quad (E + V_0 > 0) \end{array}$$

definiamo inoltre $K_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} = \sqrt{k^2 + \rho^2}$

Metodo "brutale" di soluzione

$$\psi(x) = \begin{cases} \text{I} & B_1 e^{\rho x} \\ \text{II} & A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx} \\ \text{III} & B_2 e^{-\rho x} \end{cases}$$

ricordando ψ, ψ' in $x = -\frac{a}{2}$ si trova

$$\begin{cases} B_1 e^{-\frac{\rho a}{2}} = A_1 e^{-ik\frac{a}{2}} + A_2 e^{ik\frac{a}{2}} \\ \rho B_1 e^{-\frac{\rho a}{2}} = ik A_1 e^{-ik\frac{a}{2}} - ik A_2 e^{ik\frac{a}{2}} \end{cases}$$

quindi $\begin{cases} A_1 = \frac{1}{2} e^{ik\frac{a}{2}} \left(e^{-\rho\frac{a}{2}} + \frac{\rho}{ik} e^{-\rho\frac{a}{2}} \right) B_1 = e^{(-\rho+ik)\frac{a}{2}} \frac{\rho+ik}{2ik} B_1 \\ A_2 = \frac{1}{2} e^{-ik\frac{a}{2}} B_1 e^{-\rho\frac{a}{2}} \left(1 - \frac{\rho}{ik} \right) = -e^{-(\rho+ik)\frac{a}{2}} \frac{\rho-ik}{2ik} B_1 \end{cases}$

dal raccordo a $x = \frac{a}{2}$ abbiamo $\begin{cases} B_2 e^{-\rho\frac{a}{2}} = A_1 e^{ik\frac{a}{2}} + A_2 e^{-ik\frac{a}{2}} \\ -\rho B_2 e^{-\rho\frac{a}{2}} = ik A_1 e^{ik\frac{a}{2}} - ik A_2 e^{-ik\frac{a}{2}} \end{cases}$

dalla seconda si ottiene $-pB_2 = (e^{ika} \frac{p+ik}{2} + e^{-ika} \frac{p-ik}{2})B_1$, quindi si deve avere

$$e^{ika} \frac{\rho + ik}{2\rho} - e^{-ika} \frac{\rho - ik}{2\rho} = -e^{ika} \frac{\rho + ik}{2\rho} - e^{-ika} \frac{\rho - ik}{2\rho} \text{ e raccogliendo}$$

$$e^{ika} \frac{\rho^2 + ik\rho + ik\rho - k^2}{2ik\rho} = e^{-ika} \frac{\rho^2 - ik\rho - ik\rho - k^2}{2ik\rho} \quad \text{quindi} \quad e^{2ika} \frac{(\rho + ik)^2}{(\rho - ik)^2} = 1$$

$$e^{2ika} \frac{(p+ik)^2}{(p-ik)^2} = 1 \quad \begin{cases} -e^{ika} = \frac{p-ik}{p+ik} & \text{case 1} \\ e^{ika} = \frac{p-ik}{p+ik} & \text{case 2} \end{cases}$$

$$\rightarrow \text{caso 1} \quad \frac{\frac{p}{k} - i}{\frac{p}{k} + i} = -e^{ika} ; \quad \frac{p}{k} - i = -e^{ika} \left(\frac{p}{k} + i \right) ; \quad \frac{p}{k} (1 + e^{ika}) = i (1 - e^{ika})$$

$$\frac{f}{k} = i \frac{e^{-ika/2} - e^{ika/2}}{e^{-ika/2} + e^{ika/2}} = i \frac{-2i \sin \frac{ka}{2}}{2 \cos \frac{ka}{2}} = \tan\left(\frac{ka}{2}\right) \quad \text{equazione che determina } E, \text{ vedi dopo}$$

Usando $(p+ik)e^{ika/2} + (p-ik)e^{-ika/2} = 0$ si vede subito che $A_1 = A_2$, inoltre

ricordiamo che $B_2 = \frac{1}{2ik} [e^{ika}(\rho + ik) - e^{-ika}(\rho - ik)] B_1$ e $= -e^{ika}$

$$\frac{1}{2ik} [e^{ika} (\rho + ik) - e^{-ika} (\rho - ik)] = \frac{1}{2ik} e^{ika} (\rho + ik) \left(1 - e^{-2ika} \frac{\rho - ik}{\rho + ik} \right) =$$

$$= \frac{1}{2ik} \left(\frac{p}{k} + i \right) (e^{ika} + 1) = \frac{1}{2} \left(\frac{e^{-ik\frac{a}{2}} - e^{ik\frac{a}{2}}}{e^{-ik\frac{a}{2}} + e^{ik\frac{a}{2}}} + 1 \right) (e^{ika} + 1) =$$

$$= \frac{1}{2} \left(\frac{1 - e^{ika} + 1 + e^{ika}}{1 + e^{ika}} \right) (1 + e^{ika}) = 1 \quad \text{quindi } B_1 = B_2 \text{ e la funzione}$$

d'onda è pari.

•) caso 2

$$\frac{p}{k} - i = e^{ika} \left(\frac{p}{k} + i \right) ; \quad \frac{p}{k} (1 - e^{ika}) = i (1 + e^{ika})$$

da cui $\frac{\rho}{k} = i \frac{2 \cos \frac{ka}{2}}{-2i \sin \frac{ka}{2}} = -\frac{1}{\tan \frac{ak}{2}}$ eq. per gli autovalori

e in questo caso si vede che $A_1 = -A_2$ e $B_2 = -B_1$ quindi le funzioni d'onda sono disposti in questo caso.

Methods "intelligente" di soluzione

$\hat{A}$ commuta con la perita, quindi posso usare basi ortogonali comuni di $\hat{P}$ e $\hat{H}$,

cioè cercare direttamente autostati: poni/olisporni.

$$\psi(x) = \begin{cases} \text{I} & B_1 e^{\rho x} \\ \text{II} & A_2 \begin{matrix} \sin kx \\ \cos kx \end{matrix} \\ \text{III} & \mp B_1 e^{-\rho x} \quad (= \mp \psi(-x)) \end{cases}$$

ci sono due parametri in meno rispetto al caso "brutale"

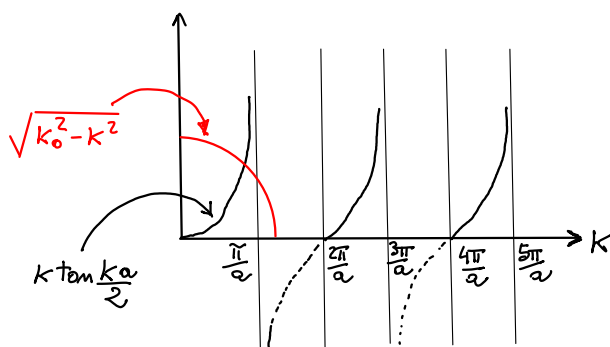
•) caso poni

continuità di ψ e ψ' in $\frac{a}{2}$ $\begin{cases} A_2 \cos(k \frac{a}{2}) = B_1 e^{-\rho \frac{a}{2}} \\ -k A_2 \sin(k \frac{a}{2}) = -B_1 \rho e^{-\rho \frac{a}{2}} \end{cases} \Rightarrow k \tan(k \frac{a}{2}) = \rho$

stessa equazione del caso 1 "brutale"

ricordando che si era definito $k_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} = \sqrt{k^2 + \rho^2}$

quindi $k \tan(k \frac{a}{2}) = \sqrt{k_0^2 - k^2}$



Proprietà generali

1) per ogni valore di $V_0 > 0$ esiste sempre uno stato legato con $k < \frac{\pi}{a}$

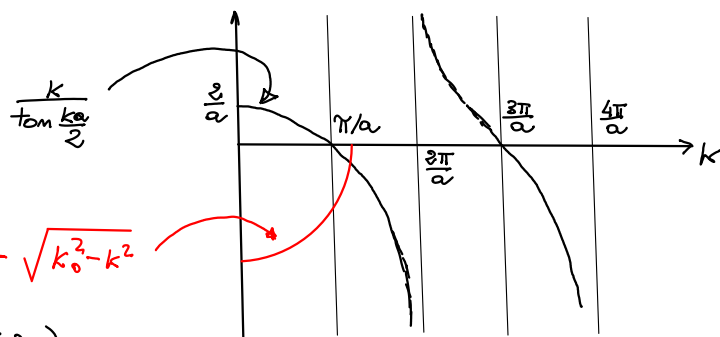
2) in zona II la soluzione è proporzionale a $\cos(kx)$ e zona II = $\{|x| < \frac{a}{2}\}$
quindi la soluzione n-esima ($n=0,1,\dots$) ha $2n$ nodi

3) # outof. poni = $1 + \max \{n \in \mathbb{N} \mid \frac{2n\pi}{a} \leq k_0\}$

•) caso disponi

continuità di ψ e ψ' in $\frac{a}{2}$: $\begin{cases} A_2 \sin(k \frac{a}{2}) = -B_1 e^{-\rho a/2} \\ k A_2 \cos(k \frac{a}{2}) = \rho B_1 e^{-\rho a/2} \end{cases}$

$\frac{k}{\tan(k \frac{a}{2})} = -\rho = -\sqrt{k_0^2 - k^2}$
stessa eq. del caso 2 "brutale"



1) esiste una soluzione solo se $k_0 \geq \frac{\pi}{a}$

2) in zona II la soluzione è $\sin(kx)$
quindi la solut. n-esima ($n=0,1,\dots$) ha $2n+1$ nodi (quello bonale in zero e altri $2n$)

3) # sol. disponi = $\max \{n \in \mathbb{N} \mid (2n+1) \frac{\pi}{a} \leq k_0\}$

•) complessivamente

Rimettendo insieme abbiamo $E_n = \frac{\hbar^2 \bar{k}_n^2}{2m} - V_0$ dove $\bar{k}_n$ sono le soluzioni delle equazioni trovate precedentemente, inoltre $\bar{k}_n \leq k_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}$ quindi $E_n \leq \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} - V_0 \leq 0$.

Proprietà generali:

- 1) la autofunzione n -esima ($n=0,1,\dots$ con $E_0 < E_1 < \dots$) ha n zeri; valori pari di n corrispondono ad autofunzioni pari, valori dispari ad autofunzioni dispari.
- 2) $\# \text{ autofunzioni} = 1 + \max \left\{ n \in \mathbb{N} \mid n \frac{\pi}{a} \leq k_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \right\} = \left\lceil \frac{k_0 a}{\pi} \right\rceil = \text{ceil} \left(\frac{k_0 a}{\pi} \right)$
- 3) nota importante: indipendentemente dal valore di V_0 esiste sempre almeno uno stato legato (in 3D non sarà vero).

Limite di buca infinita

Consideriamo il limite in cui "a" è fissato e $V_0 \rightarrow \infty$, quindi:

$$k_0^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \rightarrow \infty \quad (\text{quindi ci sono infiniti stati legati})$$

Dai grafici delle soluzioni grafiche si vede subito che

$$\text{sol. pari} \quad k \rightarrow (2m+1) \frac{\pi}{a} \quad \text{con } m \geq 0$$

$$\text{sol. dispari} \quad k \rightarrow (2m) \frac{\pi}{a} \quad \text{con } m > 0$$

Poiché k è finito e $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - V_0 = E$ si ha $E \rightarrow -\infty$ quindi $\rho = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \rightarrow +\infty$

Consideriamo il caso pari (quello dispari è analogo) e ricordiamo che la continuità di ψ imponeva $A_2 \cos(k \frac{a}{2}) = B_1 e^{-\rho a/2}$. La normalizzata della funz. d'onda si scrive

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = B_1^2 \int_{-\infty}^{-a/2} e^{2\rho x} dx + A_2^2 \int_{-a/2}^{a/2} \cos^2(kx) dx + B_1^2 \int_{a/2}^{+\infty} e^{-2\rho x} dx = \\ &= A_2^2 \left(\underbrace{2 \cos^2(k \frac{a}{2})}_{\rightarrow 0 \text{ per } k \rightarrow (2m+1)\frac{\pi}{a}} \underbrace{e^{\rho a} \frac{e^{2\rho x}}{2\rho}}_{\rightarrow 0 \text{ per } \rho \rightarrow \infty} \right)_{-a/2}^{-a/2} + \underbrace{\int_{-a/2}^{a/2} \cos^2(kx) dx}_{\rightarrow a/2 \text{ per } k \rightarrow (2m+1)\frac{\pi}{a}} \approx \underbrace{A_2^2 \frac{a}{2}}_{\text{nel limite } V_0 \rightarrow \infty} \end{aligned}$$

quindi per $V_0 \rightarrow \infty$ abbiamo $A_2 \approx \sqrt{\frac{2}{a}}$ e la funzione d'onda si riduce a

$$\psi(x) = \begin{cases} \text{I} & \sqrt{\frac{2}{a}} \cos(k \frac{a}{2}) e^{\rho(\frac{a}{2}+x)} \rightarrow 0 \\ \text{II} & \sqrt{\frac{2}{a}} \cos(kx) \\ \text{III} & \sqrt{\frac{2}{a}} \cos(k \frac{a}{2}) e^{\rho(\frac{a}{2}-x)} \rightarrow 0 \end{cases}$$

quindi nel limite di buca infinita il dominio su cui $\psi(x)$ non è identicamente nulla si restringe a $[-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}]$ e le condizioni al contorno diventano $\psi(-\frac{a}{2}) = \psi(\frac{a}{2}) = 0$.

Le autofunzioni sono $\sqrt{\frac{2}{a}} \cos(\bar{k}_m x)$ con

$$\bar{k}_m = (2m+1) \frac{\pi}{a} \quad m \geq 0 \quad \text{per le soluzioni pari}$$

$$\bar{k}_m = 2m \frac{\pi}{a} \quad m > 0 \quad \text{per le soluzioni dispari}$$

Limite di buca a δ

Consideriamo il limite $\begin{cases} V_0 \rightarrow \infty \\ a \rightarrow 0 \end{cases}$ con $aV_0 = \alpha > 0$ fissato, quindi $V(x) \rightarrow -\alpha \delta(x)$

$$K_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} = \frac{\sqrt{2m\alpha}}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{a}} \rightarrow \infty \quad \text{ma} \quad \frac{\pi}{a} \text{ cresce più rapidamente, quindi } K_0 \ll \frac{\pi}{a}$$

ed esiste quindi un unico stato legato (pari).

Perché $K^2 + \rho^2 = K_0^2$ si ha $K \leq K_0 \sim \frac{1}{\sqrt{a}}$ quindi $K \frac{a}{2} \rightarrow 0$ per $a \rightarrow 0$, quindi si può approssimare $K \tan(K \frac{a}{2}) \simeq K^2 \frac{a}{2}$ nell'equazione per gli stati legati:

Ricordando che $\rho = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} = \sqrt{K_0^2 - K^2}$ e $K = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0)}$ l'equazione per gli stati legati si semplifica in

$$K \frac{a}{2} \simeq K \tan(K \frac{a}{2}) = \rho = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

o

$$\frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0) \frac{a}{2} = \frac{m}{\hbar^2} (\alpha E + \alpha)$$

L'equazione quadratiche $-\frac{2mE}{\hbar^2} = \left[\frac{m}{\hbar^2} (\alpha E + \alpha) \right]^2$ ha nel limite $a \rightarrow 0$ due soluzioni: $E \simeq -\frac{2\hbar^2}{m\alpha^2} \rightarrow -\infty$ non accettabile per l'equazione originale ($-\infty = +\infty$)

$$E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \quad \text{che si poteva ottenere subito assumendo } \alpha E \rightarrow 0$$

Energia dell'unico stato legato.

$$\rho = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}} = \frac{m\alpha}{\hbar^2} \quad \text{quindi (nel limite } a \rightarrow 0 \text{ la zona II scompare)}$$

$$\psi(x) = C e^{-\rho|x|} \quad \text{e} \quad \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad \text{fissa} \quad C = \sqrt{\rho}$$

$$[\alpha] = E \cdot L \quad ; \quad \left[\frac{m\alpha^2}{\hbar^2} \right] = \frac{M \cdot E^2 \cdot L^2}{E^2 \cdot T^2} = M \frac{L^2}{T^2} = E \quad ; \quad \left[\frac{m\alpha}{\hbar^2} \right] = \frac{M \cdot E \cdot L}{E^2 T^2} = \frac{M \cdot L}{M \frac{L^2}{T^2} T^2} = \frac{1}{L}$$

Potenziale attrattivo $\alpha \delta$

Consideriamo $V(x) = -\alpha \delta(x)$, quindi $-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' - \alpha \delta(x) \psi(x) = E \psi$ con $E < 0$ (stati legati)

Per $x \neq 0$ le due soluzioni indipendenti sono $e^{\pm \rho x}$ con $\rho = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$ e il potenziale è invariante per parità quindi le autofunzioni devono avere la forma

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{\rho x} & \text{per } x < 0 \\ \pm A e^{-\rho x} & \text{per } x > 0 \end{cases}$$

Si può estendere il concetto di derivata alle funzioni con un salto: sia $f(x) \in C^1$ e

$$g(x) = \begin{cases} f(x) & \text{per } x < x_0 \\ f(x) + \Delta & \text{per } x > x_0 \end{cases} \quad \text{allora chiaramente } g'(x) = f'(x) \text{ per } x \neq x_0$$

$$\text{Se imponiamo } \int_{x_1}^{x_2} g'(x) dx = g(x_2) - g(x_1) \text{ allora otteniamo } \int_{x_0^-}^{x_0^+} g'(x) dx = \Delta$$

cioè $g'(x_0) = \Delta \delta(x - x_0)$. Si vede quindi che una δ nella derivata

corrisponde ad una discontinuità della funzione. Poiché l'equazione di Schrödinger è del secondo ordine, questo significa che ψ è continua e ψ' è discontinua, per fare in modo che ψ'' abbia una δ che cancella quella del potenziale.

Si vede quindi subito che non possono esistere autostati dispari, in quanto ψ sarebbe discontinua in $x=0$. Per fissare il valore della discontinuità di ψ' in $x=0$ si può integrare l'eq. di Schrödinger su $[-\epsilon, \epsilon]$ e poi mandare $\epsilon \rightarrow 0$.

Si ottiene quindi

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{(\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon))}_{\rightarrow \Delta \psi'(0)} - \alpha \psi(0) = E \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \psi(x) dx \stackrel{\text{continuità di } \psi}{\simeq} 2\epsilon E \psi(0) \rightarrow 0$$

quindi otteniamo la relazione $\Delta \psi'(0) = -\frac{2m}{\hbar^2} \alpha \psi(0)$. Imponendo questo vincolo alla soluzione pari troviamo

$$\Delta \psi'(0) = -2A\rho = -\frac{2m}{\hbar^2} \alpha A \quad \text{da cui } \rho = \frac{m\alpha}{\hbar^2} \text{ e } E = -\frac{\hbar^2 \rho^2}{2m} = -\frac{m \alpha^2}{2 \hbar^2}$$

e infine $\psi(x) = \sqrt{\rho} e^{-\rho|x|}$ fissando la normalizzazione.

Soluzione in trasformata di Fourier

Usiamo la convenzione $\tilde{\psi}(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{ikx} dx$, quindi moltiplichiamo Schrödinger

per e^{ikx} e integriamo in x .

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \psi'' e^{ikx} dx - \alpha \int e^{ikx} \delta(x) \psi(x) dx = E \int e^{ikx} \psi(x) dx \quad \text{e integriamo per parti}$$

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tilde{\psi}(k) - \alpha \psi(0) = E \tilde{\psi}(k) \quad \text{quindi}$$

$$\tilde{\psi}(k) = \frac{\alpha}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E} \psi(0) = \frac{\alpha}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + |E|} \psi(0) \quad (*)$$

quindi $\tilde{\psi}(k)$ è pari e quindi $\psi(x)$ è pari. Usiamo il teorema di inversione

$$\psi(x) = \frac{1}{2\pi} \int \tilde{\psi}(k) e^{-ikx} dk \quad \text{in } x=0:$$

$$2\pi \psi(0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(k) dk = \psi(0) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\alpha}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + |E|} dk \quad \text{quindi l'equazione agli autovalori è}$$

$$2\pi = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\alpha}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + |E|} dk = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} \frac{\alpha}{|E|} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{1+z^2} dz = 2\pi \alpha \sqrt{\frac{m}{\hbar^2 |E|}}$$

$\uparrow$ $k = z \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$
 $\uparrow$ $\int \frac{1}{1+z^2} dz = \arctan z$

quindi si trova $|E| = \frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$ come trovato prima. Per la funzione d'onda

si può usare il teorema di inversione con (*) usando il teorema dei residui

per il calcolo dell'integrale, in alternativa si può mostrare che la trasformata di

$\sqrt{\rho} e^{-\rho|x|}$ soddisfa (*).

Buca infinita con potenziale $\alpha \delta$

Consideriamo il potenziale $V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{se } |x| > a/2 \\ \alpha \delta(x) & \text{se } |x| < a/2 \end{cases}$ dove α può essere sia positivo che negativo

con le condizioni al contorno tipiche della buca infinita: $\psi(-\frac{a}{2}) = \psi(\frac{a}{2}) = 0$.

Ricordiamo che per la buca infinita semplice

sol. pari $k \rightarrow (2m+1)\frac{\pi}{a}$ con $m \geq 0$

sol. dispari $k \rightarrow 2m\frac{\pi}{a}$ con $m > 0$ _/

Sugli stati dispari la $\delta(x)$ non ha effetto quindi considereremo nel seguito solo gli stati pari in modo esplicito.

Stati con $E > 0$

Usiamo $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ e restringiamoci a considerare $[0, \frac{a}{2}]$. La soluz. generale dell'equazione d'onda è $\psi = A \cos(kx) + B \sin(kx)$ (siamo in $x > 0$, non parità), che con il vincolo $\psi(a/2) = 0$ si può scrivere in modo più semplice come

$$\psi(x) = A \sin[k(x - \frac{a}{2})]$$

Quindi $\psi(0) = A \sin(-\frac{ka}{2}) = -A \sin(\frac{ka}{2})$, $\psi'(0^+) = A k \cos(\frac{ka}{2})$ inoltre dalla assunta parità segue $\psi'(0^-) = -\psi'(0^+)$

$$(\psi'(0^-) \approx \frac{\psi(0) - \psi(-\Delta)}{\Delta} = -\frac{\psi(-\Delta) - \psi(0)}{\Delta} = -\frac{\psi(\Delta) - \psi(0)}{\Delta} = -\psi'(0^+))$$

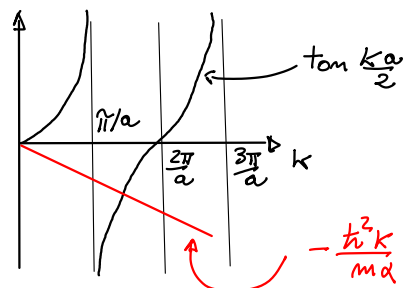
quindi $\Delta \psi'(0) = 2 A k \cos(\frac{ka}{2})$.

Integrando Schrödinger su $[-\epsilon, \epsilon]$ si ottiene $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(0) + \alpha \psi(0) = 0$ quindi

$$\frac{\hbar^2 A k}{m} \cos(\frac{ka}{2}) = -\alpha A \sin(\frac{ka}{2}) \text{ quindi infine}$$

$$\tan(k \frac{a}{2}) = -\frac{\hbar^2 k}{m \alpha}$$

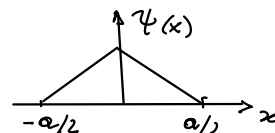
Ci sono sempre infinite soluzioni sia per $\alpha > 0$ che per $\alpha < 0$.



Se $\alpha \rightarrow 0$ $k \rightarrow (2m+1)\frac{\pi}{a}$ come per buca semplice

C'è un valore critico di α per cui $k \approx 0$, $k \frac{a}{2} \approx \tan(k \frac{a}{2}) = -\frac{k \hbar^2}{m \alpha}$, quindi

$\alpha_c = -\frac{2 \hbar^2}{m a}$. Se $\alpha \gtrsim \alpha_c$ l'autovalore più piccolo è quasi nullo e la autofunzione è quasi



Se $\alpha \rightarrow \pm\infty$ si trova $2m\frac{\pi}{a}$ quindi stati pari degeneri con stati dispari: se $\alpha \rightarrow \pm\infty$ con $\psi(0) \neq 0$ allora $\Delta\psi' \rightarrow \pm\infty$, che ha un contributo energetico molto alto, quindi $\alpha \rightarrow \pm\infty$ forza $\psi(0) = 0$ e in questo modo il problema si separa in due buche separate di ampiezza $\frac{a}{2}$: $2m\frac{\pi}{a} = n\frac{\pi}{a/2}$. La degenerazione è dovuta al fatto che la buca sinistra e destra sono disaccoppiate.
(nota: il teorema di non degenerazione in quanto assume regolarità del potenziale)

Stati con $E < 0$

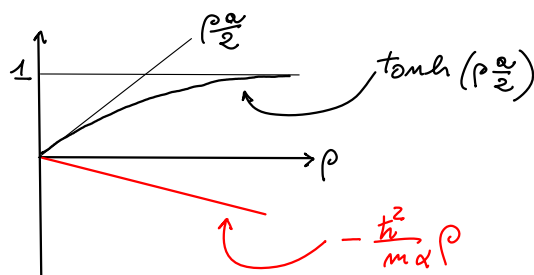
Le soluzioni dell'equazione differenziale sono $e^{\pm\rho x}$ con $\rho = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$

e la condizione $\psi(a/2) = 0$ fissa

$$\psi(x) = A \sinh\left(\rho\left(x - \frac{a}{2}\right)\right) \quad \text{quindi} \quad \begin{cases} \psi(0) = -A \sinh\left(\rho\frac{a}{2}\right) \\ \psi'(0^+) = \rho A \cosh\left(\rho\frac{a}{2}\right) \end{cases}$$

e procedendo come prima si arriva a

$$\tanh\left(\rho\frac{a}{2}\right) = -\frac{\hbar^2}{m\alpha} \rho$$

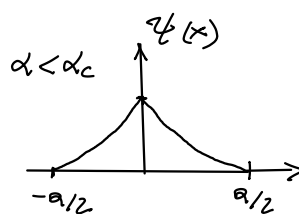
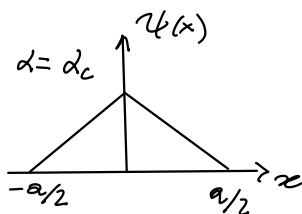
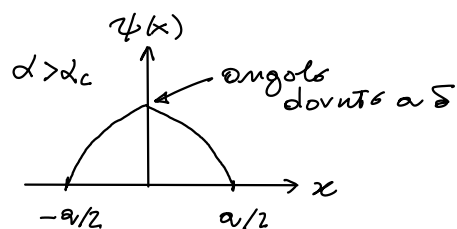


Esiste una (unica) soluzione

solo se $0 \leq -\frac{\hbar^2}{m\alpha} < \frac{a}{2}$

quindi $\alpha < -\frac{2\hbar^2}{ma} = \alpha_c$ = il valore trovato nel caso $E \geq 0$ per avere $E < 0$.

Quando $\alpha \downarrow \alpha_c$ lo stato più basso con $E > 0$ diventa uno stato con $E < 0$



Se $\alpha \rightarrow -\infty$ si ha $\rho \rightarrow \infty$ (quindi $E \rightarrow -\infty$) e $\psi \rightarrow \delta(x)$

Coppia di potenziali a δ attrattivi

$$V(x) = -\alpha \delta(x-a) - \alpha \delta(x+a) \quad \text{con } \alpha > 0$$

NOTA: il caso più generale $-\alpha \delta(x-a) - \beta \delta(x+a)$ si potrebbe trattare in modo analogo ma è più fastidioso a causa della mancanza della simmetria per parità. Analogamente si potrebbe studiare la doppia buca quadrata, che è però più fastidiosa in quanto ci sono più condizioni di raccordo. Anche senza calcolare i livelli energetici si vede però facilmente che la doppia buca ha almeno uno stato legato: se tutti gli autovalori di H fossero positivi si avrebbe per ogni $|\psi\rangle$

$$\begin{aligned} \langle \psi | H | \psi \rangle &= \sum_{m,m} \langle \psi | m \rangle \langle m | H | m \rangle \langle m | \psi \rangle = \sum_{m,m} \langle \psi | m \rangle (E_m \delta_{mm}) \langle m | \psi \rangle = \\ &= \sum_m E_m |\langle \psi | m \rangle|^2 > 0 \quad \text{se } E_m > 0 \end{aligned}$$

Sia ora $|\psi_L\rangle$ uno stato legato della buca sinistra (che sappiamo esistere)

$$\langle \psi_L | H | \psi_L \rangle = \langle \psi_L | H_L | \psi_L \rangle + \langle \psi_L | V_R | \psi_L \rangle = \overset{\substack{\uparrow \\ \text{stato legato} \\ \text{buca di sinistra}}}{E_L} + \int V_R(x) |\psi_L(x)|^2 dx \leq E_L < 0 \quad \leftarrow \leq 0 \text{ (buca!)}$$

Quindi esiste almeno uno stato legato.

Usiamo di nuovo $p = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$ e l'invarianza per parità, quindi le funzioni d'onda pari (p) e dispari (d) devono essere della forma

$$\psi_p(x) = \begin{cases} B e^{+px} & x < -a \\ A \cosh(px) & |x| < a \\ B e^{-px} & x > a \end{cases} \quad \psi_d(x) = \begin{cases} B e^{+px} & x < -a \\ A \sinh(px) & |x| < a \\ -B e^{-px} & x > a \end{cases}$$

Dobbiamo imporre la continuità di ψ e il vincolo su ψ' si ottiene integrando l'eq. di Schr. su $[a-\epsilon, a+\epsilon]$ (basta questo per parità) e usando $\epsilon \rightarrow 0$

$$\text{quindi } -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi'(a) - \alpha \psi(a) = 0 \quad \text{cioè} \quad \Delta \psi'(a) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(a)$$

Caso pari

$$\Delta \psi'(a) = -\rho B e^{-\rho a} - \rho A \sinh(\rho a) \quad \text{quindi} \quad \begin{cases} B e^{-\rho a} = A \cosh(\rho a) \\ \rho B e^{-\rho a} + \rho A \sinh(\rho a) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} A \cosh(\rho a) \end{cases}$$

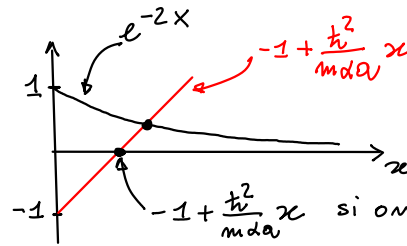
$$\text{sostituendo la prima nella seconda } \rho A (\cosh(\rho a) + \sinh(\rho a)) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} A \cosh(\rho a)$$

$$\frac{\rho}{2} (e^{\rho a} + e^{-\rho a} + e^{\rho a} - e^{-\rho a}) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \frac{e^{\rho a}}{2} (1 + e^{-2\rho a})$$

quindi $\rho = \frac{m\alpha}{\hbar^2} (1 + e^{-2\rho a})$ e $e^{-2\rho a} = \frac{\hbar^2}{m\alpha} \rho - 1$ e chiamando $x = \rho a$

infine $e^{-2x} = \frac{\hbar^2}{m\alpha a} x - 1$

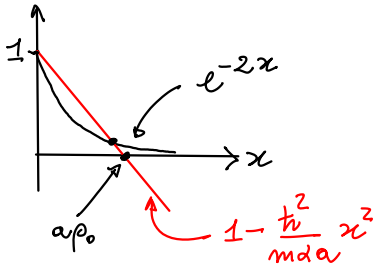
Esiste sempre una
soluzione per $\alpha > 0$



si annulla per $\rho = \rho_0 \equiv \frac{m\alpha}{\hbar^2}$ che
era la solut. per la singola δ , quindi
abbiamo $\rho_p > \rho_0$ e quindi $E_p < E_0$

Caso doppio

In modo analogo al caso pari si ottiene $e^{-2x} = 1 - \frac{\hbar^2}{m\alpha a} x$



C'è soluzione solo se la pendenza iniziale della
retta è più piccola di quella di e^{-2x}

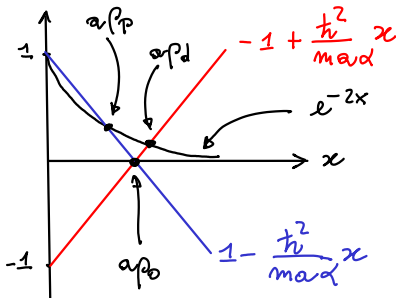
$$-2 < -\frac{\hbar^2}{m\alpha a} \quad \text{cioè} \quad \alpha > \frac{\hbar^2}{2ma}$$

che per α fisso è sempre soddisfatta se le buche
sono abbastanza lontane.

Quando la soluzione esiste si ha $\rho_d < \rho_0$, quindi $E_0 < E_d$ e lo stato dispari
è meno legato di quello della singola buca.

Limite di buche "lontane"

Consideriamo il caso $\frac{m\alpha a}{\hbar^2} \gg 1$, che corrisponde a due δ di "intensità" fissata
ma a distanza molto maggiore della scala tipica di lunghezza $\frac{\hbar^2}{m\alpha}$.



Se $a \rightarrow \infty$ la pendenza delle rette $\rightarrow 0$ e le
solut. tendono a $\pm\infty$, ma $x = a\rho$ e ρ rimane finito.
In particolare $\rho_p, \rho_d \rightarrow \rho_0$

Sia $x_d = x_0 - E_d$ e sviluppiamo in E_d l'equaz.

$$e^{-2x_d} = 1 - \frac{\hbar^2}{m\alpha a} x_d, \quad \text{ottenendo} \quad e^{-2x_0}(1 + 2E_d) \approx 1 - \frac{x_d}{x_0} = \frac{E_d}{x_0}$$

quindi $\chi_0 e^{-2\chi_0} \simeq \frac{E_d}{1+2E_d} \simeq E_d$ non sarebbe consistente
tenere anche il secondo ordine

Analogamente si può sviluppare $\chi_p = \chi_0 + E_p$ ottenendo $E_p \simeq E_d$ al primo ordine

quindi $E_p \simeq E_d \simeq \chi_0 e^{-2\chi_0}$ $\chi_0 = a\rho_0 = a \frac{m\alpha}{\hbar^2}$ e $E_p, E_d \rightarrow 0$ per $a \rightarrow \infty$

$$E_d - E_p = -\frac{\hbar^2}{2m} (\rho_d^2 - \rho_p^2) \simeq -\frac{\hbar^2}{2m} 2\rho_0 (\rho_d - \rho_p) \simeq -\frac{\hbar^2}{m} \rho_0 \left(-2 \frac{E_d}{a}\right) \simeq$$

$$\simeq 2 \frac{\hbar^2}{m} \rho_0 \frac{\chi_0}{a} e^{-2\chi_0} = 4 \frac{\hbar^2 \rho_0^2}{2m} e^{-2\chi_0} = 4 |E_0| e^{-2 \frac{a m \alpha}{\hbar^2}} \rightarrow 0 \text{ esp in } a$$

↑
stato legato di
singola δ

Per $a \rightarrow \infty$ le autofunzioni pari/dispari tendono alle combinazioni pari/dispari delle autofunzioni delle singole δ : ad esempio nel caso pari la continuità di ψ impone $B e^{-\rho a} = A \cosh(\rho a)$ e per $\rho a \gg 1$ $\cosh(\rho a) \simeq \frac{1}{2} e^{\rho a}$

quindi $A \simeq 2B e^{-2\rho a}$ e

$$\psi_p(x) \simeq \begin{cases} \text{se } x < -a & B e^{+\rho x} \\ \text{se } |x| < a & 2B e^{-2\rho a} \cosh(\rho x) = B e^{-\rho a} (e^{\rho(x-a)} + e^{-\rho(x+a)}) \\ \text{se } x > a & B e^{-\rho x} \end{cases}$$

che vale cioè $B e^{-\rho a} (e^{-\rho|x-a|} + e^{-\rho|x+a|})$ se consideriamo $e^{-\rho a} \ll 1$

NOTA: Per due δ lontane $|\psi(x)|^2$ è quasi uguale, vicino alle δ , al modulo quadrato della sol. di singola δ . Guardando solo vicino a una δ non si riesce a capire se c'è una δ lontana oppure no.

Buca infinita e evoluzione degli stati

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{altrimenti} \end{cases}$$

1) determinare autofunzioni e autovalori

Da $\psi(0)=0$ segue che possiamo cercare sol. della forma $\psi(x) = A \sin(kx)$ (con $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$). Da $\psi(a)=0$ otteniamo $\sin(ak)=0$ quindi $ak = n\pi$, quindi $k_n = n \frac{\pi}{a}$ ($n \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$) $E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$ e la autofunzione normalizzata è $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n \frac{\pi}{a} x\right)$.

Sia ora $\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1(x) + \psi_2(x))$ funzione d'onda a $t=0$, con ψ_1 e ψ_2 le autofunzioni corrispondenti al fondamentale e al primo eccitato del sistema.

2) Calcolare $|\Psi(x,t)|^2$

Introduciamo per semplicità $\omega = \frac{\hbar \pi^2}{2ma^2}$, in modo che $E_n = n^2 \hbar \omega$

$$\begin{aligned} \Psi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} + \psi_2(x) e^{-iE_2 t/\hbar} \right) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{2}{a}} \left(\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) e^{-i\omega t} + \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) e^{-i4\omega t} \right) = \\ &= \frac{e^{-i\omega t}}{\sqrt{a}} \left(\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) + \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) e^{-i3\omega t} \right) \quad \text{quindi} \end{aligned}$$

$$|\Psi(x,t)|^2 = \frac{1}{a} \left(\sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) + \sin^2\left(\frac{2\pi}{a}x\right) + 2 \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) \cos(3\omega t) \right)$$

3) Calcolare $\langle x \rangle$ in funzione del tempo

Dobbiamo calcolare $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\Psi(x,t)|^2 dx$, ed è conveniente usare alcune semplificazioni

$$\sin^2(\alpha x) = \left(\frac{e^{i\alpha x} - e^{-i\alpha x}}{2i} \right)^2 = -\frac{1}{4} (e^{i2\alpha x} + e^{-i2\alpha x} - 2) = -\frac{1}{2} \cos(2\alpha x) + \frac{1}{2}$$

$$\text{quindi} \quad \int x \sin^2(\alpha x) dx = -\frac{1}{2} \int x \cos(2\alpha x) dx + \frac{1}{2} \int x dx = -\frac{1}{4} \frac{d}{d\alpha} \int \sin(2\alpha x) dx + \frac{1}{2} \int x dx$$

Nel caso particolare $\alpha = \frac{\pi}{a}$, $\frac{2\pi}{a}$ abbiamo $\int_0^a \sin(2\alpha x) dx = 0$ e quindi:

$$\int_0^a x \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) dx = \int_0^a x \sin^2\left(\frac{2\pi}{a}x\right) dx = \frac{a^2}{4}.$$

$$\begin{aligned} \sin(\alpha x) \sin(2\alpha x) &= \frac{e^{i\alpha x} - e^{-i\alpha x}}{2i} \cdot \frac{e^{i2\alpha x} - e^{-i2\alpha x}}{2i} = -\frac{1}{4} (e^{i3\alpha x} + e^{-i3\alpha x} - e^{i\alpha x} - e^{-i\alpha x}) = \\ &= -\frac{1}{2} (\cos(3\alpha x) - \cos(\alpha x)) \end{aligned}$$

$$\int_0^a x \sin(\alpha x) \sin(2\alpha x) dx = \frac{1}{2} \int_0^a x (\cos(\alpha x) - \cos(3\alpha x)) dx = \frac{1}{2} \frac{d}{d\alpha} \int_0^a \sin(\alpha x) dx - \frac{1}{6} \frac{d}{d\alpha} \int_0^a \sin(3\alpha x) dx =$$

$$= \frac{1}{2} \frac{d}{d\alpha} \left(-\frac{\cos(\alpha a)}{\alpha} + \frac{1}{\alpha} \right) - \frac{1}{6} \frac{d}{d\alpha} \left(-\frac{\cos(3\alpha a)}{3\alpha} + \frac{1}{3\alpha} \right) = \frac{1}{2} \frac{d}{d\alpha} \left(\frac{2}{\alpha} \right) - \frac{1}{6} \frac{d}{d\alpha} \left(\frac{2}{3\alpha} \right) =$$

$$= \frac{8}{9} \frac{d}{d\alpha} \frac{1}{\alpha} = -\frac{8}{9} \frac{1}{\alpha^2} = -\frac{8}{9} \left(\frac{a}{\pi} \right)^2$$

Rimettendo insieme i pezzi abbiamo

$$\langle x \rangle = \frac{1}{a} \left[\frac{a^2}{4} + \frac{a^2}{4} + 3 \cos(3\omega t) \left(-\frac{8}{9} \frac{a^2}{\pi^2} \right) \right] = \frac{a}{2} \left(1 - \frac{32}{9\pi^2} \cos(3\omega t) \right)$$

quindi la ampiezza delle oscillazioni è $\frac{32}{9\pi^2} \frac{a}{2} \approx 0.36 \frac{a}{2}$ ($< \frac{a}{2}$, ok!)

mentre la frequenza di oscillazione è $3\omega = \frac{3\pi^2 \hbar}{8ma^2} \left(= \frac{E_2 - E_1}{\hbar} \right)$

4) Calcolare il valore medio $\langle p \rangle$

Possibile usare $\langle p \rangle = -i\hbar \int_0^a \psi^*(x,t) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x,t)$ ma fastidioso, passare in rappresentar. dell'impulso per usare $\langle p \rangle = \int p |\tilde{\psi}(p,t)|^2 dp$ è pure peggio. * vedi sotto

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{d}{dt} \langle \psi(x,t) | x | \psi(x,t) \rangle = \frac{d}{dt} \langle \psi(x,0) | e^{iHt/\hbar} x e^{-iHt/\hbar} | \psi(x,0) \rangle =$$

$$= \langle \psi(x,0) | \left(e^{iHt/\hbar} \frac{i\hbar}{\hbar} x e^{-iHt/\hbar} + e^{iHt/\hbar} x \left(-\frac{i\hbar}{\hbar} \right) e^{-iHt/\hbar} \right) | \psi(x,0) \rangle =$$

$$= \langle \psi(x,t) | \frac{i}{\hbar} [H, x] | \psi(x,t) \rangle$$

$$\text{inoltre } \frac{i}{\hbar} [H, x] = \frac{i}{2m\hbar} [p^2, x] = \frac{i}{2m\hbar} (p[p, x] + [p, x]p) = \frac{1}{m} p \quad \text{quindi}$$

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{1}{m} \langle p \rangle \quad \text{e dal risultato precedente per } \langle x \rangle \text{ abbiamo}$$

$$\langle p \rangle = m \frac{d}{dt} \langle x \rangle = m \frac{a}{2} \left(-\frac{32}{9\pi^2} \right) (-3\omega \sin(3\omega t)) = \frac{16}{3\pi^2} m a \omega \sin(3\omega t) = \frac{8\hbar}{3a} \sin(3\omega t)$$

$\omega = \frac{\hbar \pi^2}{8ma^2}$

5) Se si misura l'energia del sistema che valori si possono ottenere e con che probabilità? Dedurre $\langle H \rangle$

Si può ottenere E_1 con prob. $\frac{1}{2}$ e E_2 con prob. $\frac{1}{2}$, quindi

$$\langle H \rangle = \frac{1}{2} (E_1 + E_2) = \frac{1}{2} (1+4) \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} = \frac{5}{4} \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$$

Nel caso lo stato a $t=0$ sia un generico $|\psi\rangle$, per calcolare l'evol. temporale si può usare

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\psi\rangle \quad \text{quindi} \quad e^{-iHt/\hbar} |\psi\rangle = \sum_n e^{-iHt/\hbar} |n\rangle \langle n|\psi\rangle = \sum_n e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle \langle n|\psi\rangle$$

la prob di misurare una energia E_n è $|\langle n|\psi\rangle|^2$ ind. dal tempo e quindi

$$\langle H \rangle = \sum_n E_n |\langle n|\psi\rangle|^2$$

* per le trasformate $\tilde{\psi}_n(p)$ degli autostati vedi Cohen-Tannoudji complementi A_{III}

Buca infinita 3d & friends

Consideriamo una particella in 3d con il potenziale

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } 0 < x < L_x \text{ e } 0 < y < L_y \text{ e } 0 < z < L_z \\ \infty & \text{altrimenti} \end{cases}$$

Il problema è separabile: la eq. di Schr. è $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = E \psi$ e cerchiamo soluzioni della forma $\psi(x,y,z) = X(x)Y(y)Z(z)$, allora

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{X''}{X} + \frac{Y''}{Y} + \frac{Z''}{Z} \right) X(x)Y(y)Z(z) = E X(x)Y(y)Z(z), \text{ quindi si deve avere}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} X'' = E_x X; \quad -\frac{\hbar^2}{2m} Y'' = E_y Y; \quad -\frac{\hbar^2}{2m} Z'' = E_z Z; \quad E = E_x + E_y + E_z$$

con condizioni al bordo $X(0)=X(L_x)=0$; $Y(0)=Y(L_y)=0$; $Z(0)=Z(L_z)=0$.

Il problema si riduce quindi al prodotto diretto di tre buche infinite 1d.

$X(x) = \sqrt{\frac{2}{L_x}} \sin\left(\frac{m_x \pi}{L_x} x\right)$ con $m_x \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$, $E_x = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{m_x \pi}{L_x}\right)^2$ e analogamente per le altre direzioni.

$$E_{m_x m_y m_z} = \frac{\hbar^2}{2m} \pi^2 \left(\frac{m_x^2}{L_x^2} + \frac{m_y^2}{L_y^2} + \frac{m_z^2}{L_z^2} \right); \quad \psi_{m_x m_y m_z}(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \sin\left(\frac{m_x \pi}{L_x} x\right) \sin\left(\frac{m_y \pi}{L_y} y\right) \sin\left(\frac{m_z \pi}{L_z} z\right)$$

Sia N_E il numero di stati legati con energia $\leq E$ e vogliamo come è fatto

$$N_E = \# m_x, m_y, m_z \text{ t.c. } \frac{\hbar^2}{2m} \pi^2 \left(\frac{m_x^2}{L_x^2} + \frac{m_y^2}{L_y^2} + \frac{m_z^2}{L_z^2} \right) \leq E$$

Associamo al punto (m_x, m_y, m_z) il cubetto di volume 1^3 il numero di tutti i punti è (a parte effetti di bordo trascurabili se $m_x, m_y, m_z \gg 1$) il volume della parte nel primo quadrante ($m_x, m_y, m_z \geq 0$) dell'ellissoide

$$\frac{\hbar^2}{2m} \pi^2 \left(\frac{x^2}{L_x^2} + \frac{y^2}{L_y^2} + \frac{z^2}{L_z^2} \right) \leq E \quad \text{che introducendo } E^2 = \frac{2mE}{\hbar^2 \pi^2} \text{ si scrive}$$

$$\frac{x^2}{E^2 L_x^2} + \frac{y^2}{E^2 L_y^2} + \frac{z^2}{E^2 L_z^2} \leq 1 \quad \text{quindi } N_E \simeq \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} L_x L_y L_z E^3$$

Definendo $P_{\max}$ come $E = \frac{P_{\max}^2}{2m}$ abbiamo $E^2 = \frac{P_{\max}^2}{\hbar^2 \pi^2}$, $E = \frac{P_{\max}}{\hbar \pi}$ quindi

$$N_E = \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} V \frac{P_{\max}^3}{(\hbar \pi)^3} = \frac{4\pi}{3} V \frac{P_{\max}^3}{(2\pi \hbar)^3} \text{ che corrisponde a una densità } \frac{d^3 q d^3 p}{(2\pi \hbar)^3} \text{ uniforme}$$

$$N_E \propto E^{3/2} \quad \text{Densità degli stati: } \frac{dN_E}{dE} \propto \sqrt{E}$$

Prisma infinito $V(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } 0 < x < L_x, 0 < y < L_y, \text{ ogni } z \\ \infty & \text{altrimenti} \end{cases}$

$$E_{m_x m_y k} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{m_x \pi}{L_x} \right)^2 + \left(\frac{m_y \pi}{L_y} \right)^2 + k^2 \right]; \quad \psi(x,y,z) \propto \sin\left(\frac{m_x \pi}{L_x} x\right) \sin\left(\frac{m_y \pi}{L_y} y\right) e^{ikz}$$

Rotazioni, riflessioni, degenerazioni

Consideriamo un sistema con spazio di Hilbert 3-dim, che sia invariante sotto la trasformazione generata dall'operatore unitario U che agisce sulla base $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ come $U|1\rangle = |3\rangle$; $U|2\rangle = |3\rangle$; $U|3\rangle = |1\rangle$ (rot. di $2\pi/3$) e sotto l'operatore unitario R che agisce come $R|1\rangle = |2\rangle$; $R|2\rangle = |1\rangle$; $R|3\rangle = |3\rangle$ (riflessione)

- 1) Scrivere la forma generale della Hamiltoniana assumendo invarianza sotto U e/o R

Da $UH=HU$ abbiamo $UH U^\dagger = H$ e quindi

$$H_{11} \equiv \langle 1|H|1\rangle = \langle 1|U^\dagger U H U^\dagger|1\rangle = \langle 3|U H U^\dagger|2\rangle = \langle 3|H|2\rangle = H_{22} \stackrel{\text{analogamente}}{=} H_{33}$$

in modo identico si vede che $H_{12} = H_{23} = H_{31}$, quindi la più generale H che

commuta con U è
$$\begin{pmatrix} E_0 & a & a^* \\ a^* & E_0 & a \\ a & a^* & E_0 \end{pmatrix} \quad \text{con } E_0 \in \mathbb{R} \text{ e } a \in \mathbb{C}$$

In modo identico l'invarianza sotto R implica $H_{11} = H_{22}$ e $H_{12} = H_{21}$ e $H_{13} = H_{23}$

quindi
$$\begin{pmatrix} E_0 & a & b \\ a & E_0 & b \\ b^* & b^* & E_1 \end{pmatrix} \quad \text{con } E_0, E_1, a \in \mathbb{R} \text{ e } b \in \mathbb{C}$$

Invarianza sotto U e R implica quindi
$$\begin{pmatrix} E_0 & a & a \\ a & E_0 & a \\ a & a & E_0 \end{pmatrix} \quad \text{con } E_0, a \in \mathbb{R}$$

- 2) Mostrare che U e R non commutano

Si possono usare le forme esplicite $U = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ e $R = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ oppure, più semplicemente

$$UR|1\rangle = U|2\rangle = |3\rangle$$

$$RU|1\rangle = R|2\rangle = |1\rangle \quad \text{quindi evidentemente } UR \neq RU$$

- 3) Calcolare gli autovalori di H

$$\det(H - \lambda I) = 3a^3 - 3a^2(E_0 - \lambda) + (E_0 - \lambda)^3 \stackrel{\text{fattorizz. fatta vedendo a occhio sol. } 2a + E_0}{=} (a - E_0 + \lambda)^2 (2a + E_0 - \lambda)$$

Modo intelligente:

$$H = (E_0 - a)\mathbb{1} + aM \quad \text{con } M = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad M^\dagger = M; \quad M^2 = 3M \quad \text{quindi } \left(\frac{M}{3}\right)^2 = \frac{M}{3}$$

quindi $P = \frac{1}{3}M$ è un proiettore e $\text{Tr} P = 1$, quindi P è un proiettore su un sottospazio 1d

quindi P è unitariamente equivalente a $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ e quindi $H = (E_0 - a)\mathbb{1} + 3aP$

ha autovalori $\lambda_1 = E_0 + 2a$
 $\lambda_{2,3} = E_0 - a$

- 4) Trovare base comune di autovettori di H, R e H, U

Gli autovettori di R si trovano facilmente: $R = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ quindi gli autovettori sono

$$|w_1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad |w_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad |w_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Dove $|w_1\rangle$ e $|w_3\rangle$ sono autovettr. corrispondenti all'autovalore 1, mentre $|w_2\rangle$ corrisponde a -1. $|w_2\rangle$ è non deg. quindi deve essere autovettore anche di H . Gli altri due autovett. di H sono in generale combinaz. lineari di $|w_1\rangle$ e $|w_3\rangle$. I due autovettr. sono $(\sqrt{2}|w_3\rangle - 2|w_1\rangle)/\sqrt{6}$ e $(|w_1\rangle + \sqrt{2}|w_3\rangle)/\sqrt{3}$.

Autovettr. di U : $U \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c \\ a \\ b \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$ quindi $c = \lambda a = \lambda^2 b = \lambda^3 c$, $\lambda^3 = 1$

3 autovalori non deg. $1, e^{i\frac{2}{3}\pi}, e^{i\frac{4}{3}\pi}$ quindi gli autovettr. corrispondenti devono essere autovettr. di H . Usando $a=1$, $c=\lambda$, $b=\lambda^2$ troviamo

$$|v_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} ; \quad |v_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\frac{4}{3}\pi} \\ e^{i\frac{2}{3}\pi} \end{pmatrix} ; \quad |v_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\frac{2}{3}\pi} \\ e^{i\frac{4}{3}\pi} \end{pmatrix}$$

5) esempio di sistema fisico con invarianza per rotaz. di $2\pi/3$ e riflessioni

Sia $V(\vec{r})$ un potenziale centrale e siano $\vec{P}_1, \vec{P}_2, \vec{P}_3$ i vertici di un triangolo

equilatero, allora $H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{r}-\vec{P}_1) + V(\vec{r}-\vec{P}_2) + V(\vec{r}-\vec{P}_3)$ è invariante sotto

il gruppo cercato, quindi ha necessariamente alcuni autostati degeneri.

Spettro continuo/discreto e localizzazione degli stati

Caso discreto $|\psi\rangle = \sum_n a_n |n\rangle$ con $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ e $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$

$$\langle x|\psi\rangle = \sum_n a_n \psi_n(x) ; \quad |\langle x|\psi\rangle|^2 = \sum_{nm} a_n^* a_m \psi_n^*(x) \psi_m(x)$$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle ; \quad \langle x|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(x);$$

$$|\langle x|\psi(t)\rangle|^2 = \sum_{nm} a_n^* a_m e^{i(E_n - E_m)t/\hbar} \psi_n^*(x) \psi_m(x)$$

$$\frac{1}{2T} \int_{-T}^T |\langle x|\psi(t)\rangle|^2 dt = \sum_{nm} a_n^* a_m \psi_n^*(x) \psi_m(x) \frac{1}{2T} \int_{-T}^T e^{i(E_n - E_m)t/\hbar} dt$$

inoltre $\frac{1}{2T} \int_{-T}^T e^{i(E_n - E_m)t/\hbar} dt \begin{cases} 1 & \text{se } E_n = E_m \\ \frac{1}{2T} \frac{\hbar}{i(E_n - E_m)} e^{i(E_n - E_m)t/\hbar} \Big|_{-T}^T \rightarrow 0 & \text{per } T \rightarrow \infty \text{ se } E_n \neq E_m \end{cases}$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T |\langle x|\psi(t)\rangle|^2 dt = \sum_{nm} a_n^* a_m \psi_n^*(x) \psi_m(x) \delta_{nm} = \sum_n |a_n \psi_n(x)|^2$$

Caso continuo $|\psi\rangle = \int a(E) |E\rangle dE$; $H|E\rangle = E|E\rangle$; $\langle E|E'\rangle = \delta(E - E')$

$$\langle \psi|\psi\rangle = \int a^*(E) a(E') \langle E|E'\rangle dE dE' = \int |a(E)|^2 dE$$

$$\langle x|\psi\rangle = \int a(E) \psi_E(x) dE ; \quad |\langle x|\psi\rangle|^2 = \int a^*(E) \psi_E^*(x) a(E') \psi_{E'}(x) dE dE'$$

$$|\psi(t)\rangle = \int a(E) e^{-iEt/\hbar} |E\rangle dE ; \quad \langle x|\psi(t)\rangle = \int a(E) e^{-iEt/\hbar} \psi_E(x) dE$$

$$|\langle x|\psi(t)\rangle|^2 = \int a^*(E) \psi_E^*(x) a(E') \psi_{E'}(x) e^{i(E - E')t/\hbar} dE dE'$$

$$\int_{-T}^T e^{i(E - E')t/\hbar} dt \xrightarrow{T \rightarrow \infty} 2\pi \delta\left(\frac{E - E'}{\hbar}\right) = 2\pi \hbar \delta(E - E') \quad \text{quindi si ha}$$

$$\int_{-T}^T |\langle x|\psi(t)\rangle|^2 dt \rightarrow \int a^*(E) \psi_E^*(x) a(E') \psi_{E'}(x) 2\pi \hbar \delta(E - E') dE dE' = 2\pi \hbar \int |a(E) \psi_E(x)|^2 dE$$

e quindi infine $\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T |\langle x|\psi(t)\rangle|^2 dt = 0$

Quindi gli stati costruiti con autostati discreti della hamiltoniana rimangono localizzati, mentre quelli costruiti con autostati continui no.

La versione matematicamente "pulita" di questo fatto costituisce il teorema RAGE (da Ruelle, Amrein, Georgescu, Ems), vedi

TESCHL "Mathematical methods in quantum mechanics, with appl. to Schrodinger operators" § 5.2

STERNBERG "A mathematical companion to quantum mechanics" § 18

Evoluzione libera pacchetti gaussiani

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = \hat{H} \Psi(x,t) & \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \\ \Psi(x,0) = \Psi(x) \end{cases}$$

Come la risolverebbe un matematico

$$\begin{aligned} \Psi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\Psi}(k,t) e^{ikx} dk & \hat{H} \Psi(x,t) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x,t) = +\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tilde{\Psi}(k,t) e^{ikx} dk \\ +i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) &= +i\hbar \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Psi}(k,t) e^{ikx} dk \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Psi}(k,t) &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tilde{\Psi}(k,t) \quad \text{con cond. iniziale } \tilde{\Psi}(k,0) = \tilde{\Psi}(k), \text{ quindi:} \\ \tilde{\Psi}(k,t) &= \tilde{\Psi}(k,0) e^{-i \frac{\hbar k^2}{2m} t} = \tilde{\Psi}(k) e^{-i \frac{\hbar k^2}{2m} t} & \tilde{\Psi}(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x) e^{-ikx} dx \\ \text{antitransformando } \Psi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\Psi}(k) e^{-i \frac{\hbar k^2}{2m} t} e^{ikx} dk \end{aligned}$$

Come la risolverebbe un fisico

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle &= \frac{\hat{p}^2}{2m} |\Psi(t)\rangle, \text{ moltiplica per } \langle p| \text{ autostato di } \hat{p} \text{ (indip. del tempo)} \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle p|\Psi(t)\rangle &= \frac{\hbar^2 p^2}{2m} \langle p|\Psi(t)\rangle \quad \text{quindi: } \langle p|\Psi(t)\rangle = e^{-i \frac{\hbar p^2}{2m} t} \langle p|\Psi(t=0)\rangle \\ \text{quindi: } |\Psi(t)\rangle &= \sum_p |p\rangle \langle p|\Psi(t)\rangle = \sum_p e^{-i \frac{\hbar p^2}{2m} t} \langle p|\Psi(t=0)\rangle |p\rangle \\ \text{Ricordiamo che } \langle x|p\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \text{ con } k=p/\hbar \text{ e } \langle p|p'\rangle = \delta(k-k') \\ \langle p|\Psi(t=0)\rangle &= \sum_x \langle p|x\rangle \langle x|\Psi(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} \Psi(x,t=0) dx = \tilde{\Psi}(k) \\ \Psi(x,t) &= \langle x|\Psi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{-i \frac{\hbar k^2}{2m} t} \tilde{\Psi}(k) \langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\Psi}(k) e^{-i \frac{\hbar k^2}{2m} t} e^{ikx} dk \end{aligned}$$

Integrali gaussiani complessi

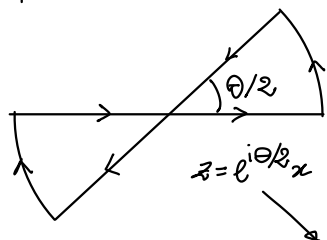
$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(ax^2+bx)} dx \quad \text{con } a, b \in \mathbb{C} \text{ e } \operatorname{Re} a > 0$$

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a(x^2 + \frac{b}{a}x)} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a(x^2 + \frac{b}{a}x + \frac{b^2}{4a^2} - \frac{b^2}{4a^2})} dx = e^{+b^2/(4a)} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a(x + \frac{b}{2a})^2} dx$$

Se $a, b \in \mathbb{R}$ si può effettuare il cambio di variabile $x \rightarrow x' = x + \frac{b}{2a}$. Nel caso complesso in generale un simile cambio di variabile equivale a cambiare il dominio di integrazione

da $\mathbb{R}$ a $\mathbb{R} + i \text{const}$. Poiché e^{-az^2} è funzione analitica che si annulla per $z \rightarrow \pm\infty$ l'integrale non cambia.

Rimangono con $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx$; se $a \in \mathbb{R}$ il risultato è $\sqrt{\frac{\pi}{a}}$ con la determinazione positiva della radice. Consideriamo ora in generale $a = |a| e^{i\theta}$ con $|\theta| < \frac{\pi}{2}$ (poiché $\text{Re } a > 0$).



$$\oint_C e^{-|a|z^2} dz = 0 \text{ poiché } e^{-|a|z^2} \text{ è una funzione analitica}$$

Considerando il percorso disegnato i contributi dei semicerchi vanno a zero quando il raggio diverge, quindi

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-|a|x^2} dx - e^{i\theta/2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-|a|e^{i\theta} x^2} dx = 0 \quad \text{quindi} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-|a|e^{i\theta} x^2} dx = e^{-i\theta/2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-|a|x^2} dx$$

e questo fissa il ramo della radice da usare in $\sqrt{\frac{\pi}{a}}$ quando $a \in \mathbb{C}$

Riassumendo $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(ax^2+bx)} dx = e^{+b^2/4a} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$ e se $a = |a|e^{i\theta}$ si ha $\sqrt{\frac{\pi}{a}} = \sqrt{\frac{\pi}{|a|}} e^{-i\theta/2}$

Evoluzione pacchetti gaussiani a impulso nullo

$$\varphi(x) = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4} e^{-ax^2}; \quad \tilde{\varphi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} e^{-ikx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{-k^2/4a} = \frac{1}{(2\pi a)^{1/4}} e^{-k^2/4a}$$

e quindi

$$\begin{aligned} \psi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(2\pi a)^{1/4}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{k^2}{4a}} e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t} e^{ikx} dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(2\pi a)^{1/4}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left[\left(\frac{1}{4a} + i\frac{\hbar t}{2m}\right)k^2 - ikx\right]} dk \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(2\pi a)^{1/4}} \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\frac{1}{4a} + i\frac{\hbar t}{2m}}} e^{-x^2 / \left[4\left(\frac{1}{4a} + i\frac{\hbar t}{2m}\right)\right]} = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4} \frac{e^{-ax^2/(1+2i\hbar a t/m)}}{\sqrt{1+2i\hbar a t/m}} \end{aligned}$$

Introduciamo per semplicità $\theta = 2\hbar a t/m$, allora

$$|\psi(x,t)|^2 = \sqrt{\frac{2a}{\pi}} \frac{e^{-ax^2/(1+i\theta)} e^{-ax^2/(1-i\theta)}}{\sqrt{1+\theta^2}} = \sqrt{\frac{2a}{\pi}} \frac{e^{-2ax^2/(1+\theta^2)}}{\sqrt{1+\theta^2}}$$

$$\frac{1}{1+i\theta} + \frac{1}{1-i\theta} = \frac{1-i\theta+1+i\theta}{1+\theta^2} = \frac{2}{1+\theta^2}$$

quindi $|\psi(x,t)|^2$ è una gaussiana con varianza $\sqrt{\frac{1+\theta^2}{4a}} < t$ per t grande. Si vuole

similare $|\psi(x,t)|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi}} w e^{-2w^2 x^2}$ con $w = \sqrt{\frac{a}{1+\theta^2}}$

$\langle x \rangle = 0$ per parità; $\langle p \rangle = 0$ per parità

Nota: se $\psi(x,t)$ è reale e a quadrato sommabile allora $\langle p \rangle = 0$, infatti

$$\langle p \rangle = -i\hbar \int \psi \psi' dx = \text{immaginaria} \quad \text{ma } \langle p \rangle \in \mathbb{R} \quad \text{quindi } \langle p \rangle = 0$$

in alternativa $\langle p \rangle = -i\hbar \int \psi \psi' dx = -\frac{i\hbar}{2} \int \frac{d}{dx} (\psi^2) dx = 0$.

Se $|\psi\rangle$ è autostato della parità P allora

$P^\dagger P = -P$
 $\langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle = \langle \psi | P^\dagger P p P^\dagger P | \psi \rangle = \langle \psi | P p P | \psi \rangle = -\langle \psi | p | \psi \rangle$ quindi $\langle \psi | p | \psi \rangle = 0$

$$\langle x^2 \rangle = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \omega \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-2\omega^2 x^2} dx = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \omega \frac{d}{d(-2\omega^2)} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\omega^2 x^2} dx = -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \omega \frac{d}{d\omega^2} \sqrt{\frac{\pi}{2\omega^2}}$$
$$= -\frac{1}{2} \omega \left[-\frac{1}{2} (\omega^2)^{-3/2} \right] = \frac{1}{4\omega^2}$$

$\langle p^2 \rangle$ si può calcolare in diversi modi $\langle p^2 \rangle = -\hbar^2 \int \psi^*(x,t) \frac{d^2}{dx^2} \psi(x,t) dx$ oppure

$\langle \psi | p^2 | \psi \rangle = \| p | \psi \rangle \|^2 = \hbar^2 \int \frac{d\psi^*}{dx} \frac{d\psi}{dx} dx$ (che si ottiene integrando per parti)

oppure $\langle \psi | \hat{p}^2 | \psi \rangle = \sum_{p_1 p_2} \langle \psi | p_1 \rangle \langle p_1 | \hat{p}^2 | p_2 \rangle \langle p_2 | \psi \rangle = \sum_p p^2 \langle \psi | p \rangle \langle p | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} p^2 |\tilde{\psi}(p,t)|^2 dp$
 $\langle p_1 | \hat{p}^2 | p_2 \rangle = p_2^2 \langle p_1 | p_2 \rangle = p_2^2 \delta(p_1 - p_2)$

e si era visto che $\tilde{\psi}(p,t) = \langle p | \psi(t) \rangle = e^{-i\frac{p^2}{2m\hbar}t} \langle p | \psi(t=0) \rangle = e^{-i\frac{p^2}{2m\hbar}t} \tilde{\varphi}(k)$

quindi $\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} p^2 |\tilde{\varphi}(k)|^2 dk$ e si era visto che $\tilde{\varphi}(k) = \frac{1}{(2\pi a)^{1/4}} e^{-k^2/4a}$

dunque $\langle p^2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \int_{-\infty}^{+\infty} \hbar^2 k^2 e^{-k^2/2a} dk = \frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi a}} \int_{-\infty}^{+\infty} (-2) \frac{d}{d(1/a)} e^{-k^2/2a} dk = \frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi a}} (-2) \frac{d}{d(1/a)} \sqrt{\frac{2\pi}{1/a}} =$
 $= \frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi a}} (-2) \sqrt{2\pi} \left(-\frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{a}\right)^{-3/2} = \hbar^2 a$

Riassumendo $\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0$ $\langle x^2 \rangle = \frac{1}{4\omega^2} = \frac{1}{4} \frac{1+\theta^2}{a} = \frac{1}{4a} \left(1 + \frac{4\hbar^2 a^2 t^2}{m^2}\right)$; $\langle p^2 \rangle = \hbar^2 a$

quindi $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \frac{1}{2\sqrt{a}} \sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 a^2 t^2}{m^2}}$ $\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \hbar\sqrt{a}$ e infine

$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 a^2 t^2}{m^2}} \geq \frac{\hbar}{2}$ ok con rel. di indeterminazione.

Evolutione pacchetti gaussiani

$\phi(x) = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4} e^{-ax^2} e^{ik_0 x} = \psi(x) e^{ik_0 x}$ quindi $\tilde{\phi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \phi(x) e^{-ikx} dx = \tilde{\psi}(k - k_0)$

e usando il risultato ottenuto in prec. $\tilde{\phi}(k) = \frac{1}{(2\pi a)^{1/4}} e^{-(k-k_0)^2/4a}$ quindi

$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\phi}(k) e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t} e^{ikx} dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(2\pi a)^{1/4}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(k-k_0)^2/4a} e^{ikx - i\frac{\hbar k^2}{2m}t} dk$
 $= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(2\pi a)^{1/4}} e^{ik_0(x - \frac{\hbar k_0}{2m}t)} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\zeta^2 \left(\frac{1}{4a} + i\frac{\hbar \zeta}{2m}\right) + i\zeta \left(x - \frac{\hbar k_0}{m}t\right)} d\zeta =$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(2\pi a)^{1/4}} e^{ik_0(x - \frac{\hbar k_0}{2m}t)} \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\frac{1}{4a} + i\frac{\hbar t}{2m}}} e^{-\frac{(x - \frac{\hbar k_0}{2m}t)^2}{[4(\frac{1}{4a} + i\frac{\hbar t}{2m})]}}$$

introducendo $\gamma^2 = 1 + \frac{2i\hbar t}{m}$ questa espressione si riscrive

$$\psi(x,t) = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\gamma} \underbrace{e^{-a(x - \frac{\hbar k_0}{m}t)^2/\gamma^2}}_{\text{si muove con vel. } \frac{\hbar k_0}{m}} \underbrace{e^{ik_0(x - \frac{\hbar k_0}{2m}t)}}_{\text{si muove con vel. } \frac{\hbar k_0}{2m}}$$

Abbiamo $|\psi(x,t)|^2 = \sqrt{\frac{2a}{\pi}} \frac{1}{|\gamma|^2} e^{-2a(x - \frac{\hbar k_0}{m}t)^2 \left(\frac{1}{\gamma^2} + \frac{1}{(\gamma^*)^2}\right)}$ inoltre

$|\gamma|^2 = \sqrt{1 + \theta^2}$, dove come prima $\theta = \frac{2\hbar at}{m}$ e $\frac{1}{\gamma^2} + \frac{1}{(\gamma^*)^2} = \frac{1}{|\gamma|^4} (\gamma^2 + (\gamma^*)^2) = \frac{2}{|\gamma|^4}$

quindi $|\psi(x,t)|^2 = \sqrt{\frac{2a}{\pi}} \frac{1}{\sqrt{1 + \theta^2}} e^{-2a(x - \frac{\hbar k_0}{m}t)^2/(1 + \theta^2)} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} w e^{-2w^2(x - \frac{\hbar k_0}{m}t)^2}$

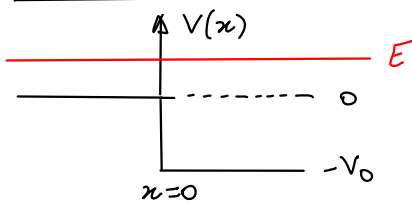
dove come prima $w = \sqrt{\frac{a}{1 + \theta^2}}$. Otteniamo quindi la stessa forma trovata per $k_0=0$ ma che ora si muove con velocità di gruppo $\frac{\hbar k_0}{m}$.

È semplice vedere che $\langle x \rangle = \frac{\hbar k_0}{m}t$ e $\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \hbar k |\tilde{\psi}(k,t)|^2 dk = \int_{-\infty}^{+\infty} \hbar k |\tilde{\phi}(k,t)|^2 dk = \hbar k_0$

($\langle p \rangle$ si può ottenere anche usando $\langle p \rangle = m \frac{d}{dt} \langle x \rangle$ che si ottiene subito in rapp. di Heisenberg)

Poiché $|\psi(x,t)|^2$ per $k_0 \neq 0$ non è altro che $|\psi(x,t)|^2$ per $k_0=0$ traslata con vel. costante si capisce subito che $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$ ha lo stesso valore che per $k_0=0$ e analogo ragionamento vale per Δp , quindi per le relazioni di indeterminazione si ottengono le stesse espressioni che per $k_0=0$.

Scalini



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

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad ; \quad p = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar} \quad E > 0$$

$$\psi(x) = \begin{cases} \alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx} & \text{se } x < 0 \\ \gamma e^{ipx} + \delta e^{-ipx} & \text{se } x > 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \alpha + \beta = \gamma + \delta \\ ik(\alpha - \beta) = ip(\gamma - \delta) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \gamma + \delta = \alpha + \beta \\ \gamma - \delta = \frac{k}{p}(\alpha - \beta) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \gamma = \frac{1}{2} \left[\left(1 + \frac{k}{p}\right) \alpha + \left(1 - \frac{k}{p}\right) \beta \right] \\ \delta = \frac{1}{2} \left[\left(1 - \frac{k}{p}\right) \alpha + \left(1 + \frac{k}{p}\right) \beta \right] \end{cases}$$

$$\begin{pmatrix} \gamma \\ \delta \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

M = matrice di trasferimento

$$M = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + k/p & 1 - k/p \\ 1 - k/p & 1 + k/p \end{pmatrix}$$

Corrente di probabilità $\vec{j} = \frac{1}{m} \text{Re}(\psi^* \vec{p} \psi) = \frac{1}{m} \text{Re}(-i\hbar \psi^* \nabla \psi) = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\psi^* \nabla \psi)$

$$\psi^* \nabla \psi = (\alpha^* e^{-ikx} + \beta^* e^{ikx})(ik\alpha e^{ikx} - ik\beta e^{-ikx}) = ik|\alpha|^2 - ik|\beta|^2 + \underbrace{ik\alpha\beta^* e^{2ikx} - ik\alpha^*\beta e^{-2ikx}}_{\text{reale + c.c.}}$$

$$\vec{j} = \frac{\hbar k}{m} (|\alpha|^2 - |\beta|^2)$$

$$\begin{array}{c} \alpha \longrightarrow \\ \beta \longleftarrow \end{array} \quad \begin{array}{c} \longrightarrow \gamma \\ \longleftarrow \delta \end{array}$$

Consideriamo il caso di particelle incidenti da sinistra. Possiamo allora usare $\delta=0$ (nessuna onda che propaga a destra verso sinistra) e volendo si può anche fissare $\alpha=1$.

$$\begin{pmatrix} \gamma \\ 0 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} 1 \\ \beta \end{pmatrix} \quad \begin{cases} \gamma = \frac{1}{2} \left[\left(1 + \frac{k}{p}\right) + \left(1 - \frac{k}{p}\right) \beta \right] \\ 0 = \frac{1}{2} \left[\left(1 - \frac{k}{p}\right) + \left(1 + \frac{k}{p}\right) \beta \right] \end{cases} \quad \begin{cases} \beta = \frac{k/p - 1}{k/p + 1} \\ \gamma = \frac{1}{2(k/p + 1)} \left[\left(1 + \frac{k}{p}\right)^2 - \left(1 - \frac{k}{p}\right)^2 \right] = \frac{2k/p}{1 + k/p} \end{cases}$$

coefficiente di riflessione $R = \frac{j_{\text{rifl}}}{j_{\text{in}}} = \frac{\frac{\hbar k}{m} |\beta|^2}{\frac{\hbar k}{m}} = \frac{(k/p - 1)^2}{(k/p + 1)^2}$

coefficiente di trasmissione $T = \frac{j_{\text{tr}}}{j_{\text{in}}} = \frac{\frac{\hbar p}{m} |\gamma|^2}{\frac{\hbar k}{m}} = \frac{4k/p}{(1 + k/p)^2}$

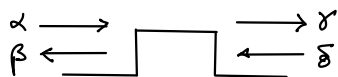
$$T + R = \frac{(k/p - 1)^2 + 4k/p}{(1 + k/p)^2} = 1$$

$$\begin{cases} R \rightarrow 1 \\ T \rightarrow 0 \end{cases} \quad \text{se } E \ll V_0 \quad (\text{quando } k \ll p) \quad ; \quad \begin{cases} R \rightarrow 0 \\ T \rightarrow 1 \end{cases} \quad \text{se } E \gg V_0 \quad (\text{quando } p \sim k)$$

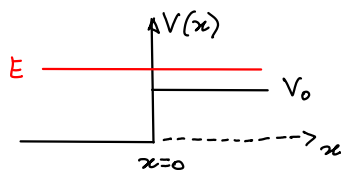
Dim generale che $T+R=1$: per stati stazionari ψ evolve con $e^{-iEt/\hbar}$ quindi $\rho = |\psi(x)|^2$ è indipendente dal tempo e $\partial_t \rho + \nabla \cdot \vec{j} = 0$ diventa in una dimensione $\partial_x j = 0$, cioè $j = \text{const.}$

$$\text{quindi } \frac{\hbar k}{m} (|\alpha|^2 - |\beta|^2) = \frac{\hbar p}{m} (|\gamma|^2 - |\delta|^2).$$

Per onde incidente da sinistra $\delta=0$ quindi $j_{\text{in}} - j_{\text{rifl}} = j_{\text{tr}}$ e $1 = \frac{j_{\text{rifl}}}{j_{\text{in}}} + \frac{j_{\text{tr}}}{j_{\text{in}}} = R + T$



Per onda incidente da destra: $\delta \leftarrow j_{\text{in}}; \gamma \leftarrow j_{\text{refl}}; \beta \leftarrow j_{\text{tr}}$
 $j_{\text{in}} = j_{\text{refl}} + j_{\text{tr}}$ e di nuovo $1 = \tilde{R} + \tilde{T}$



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

Supponiamo $E > V_0$: $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ $p = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$

$\psi(x) = \begin{cases} \alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx} & \text{se } x < 0 \\ \gamma e^{ipx} + \delta e^{-ipx} & \text{se } x > 0 \end{cases}$ tutte esattamente come nel caso dello scolinio in basso
 quindi la matrice di trasferimento $\tilde{t}$ (nota: $\tilde{t}$ diverso da prima)

$M = \frac{1}{2i} \begin{pmatrix} 1+k/p & 1-k/p \\ 1-k/p & 1+k/p \end{pmatrix}$ e per incidenza da sinistra $R = \frac{(k/p-1)^2}{(k/p+1)^2}; T = \frac{4k/p}{(k/p+1)^2}$
 ma ora $k > p$

Per $E \rightarrow V_0$ abbiamo $p=0$ quindi $\begin{cases} R = \left(\frac{k-p}{k+p}\right)^2 \rightarrow 1 \\ T = \frac{4kp}{(k+p)^2} \rightarrow 0 \end{cases}$ per $E \gg V_0$, $p \sim k$ quindi $\begin{cases} R \rightarrow 0 \\ T \rightarrow 1 \end{cases}$

Se $0 < E < V_0$ allora $p = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$ e $\psi(x) = \begin{cases} \alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx} & \text{se } x < 0 \\ \gamma e^{-px} + \delta e^{px} & \text{se } x > 0 \end{cases}$

per incidenza da sinistra si fissa $\delta=0$ (il modo corretto di vederlo è considerare lo scattering su una barriera e poi aumentare lo spessore della barriera).

$$j_{\text{tr}} = \frac{\hbar}{m} \Im m(\psi^* \nabla \psi) = \frac{\hbar}{m} \Im m(-p|\gamma|^2) = 0$$

e quindi abbiamo $j_{\text{in}} - j_{\text{refl}} = 0$ quindi $R = \frac{j_{\text{in}}}{j_{\text{refl}}} = 1$

Scattering su δ

$V(x) = -g\delta(x)$ autofunzioni a energia fissa positiva $\psi(x) = \begin{cases} \alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx} \\ \gamma e^{ikx} + \delta e^{-ikx} \end{cases}; k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$
 Impostiamo continuità di ψ e $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi'(0) - g\psi(0) = 0$

$$\begin{cases} \psi(0^+) = \psi(0^-) \\ \Delta\psi'(0) = -\frac{2mg}{\hbar^2}\psi(0) \end{cases} \quad \begin{cases} \gamma + \delta = \alpha + \beta \\ ik(\gamma - \delta) - ik(\alpha - \beta) = -\frac{2mg}{\hbar^2}(\alpha + \beta) \end{cases}; \quad \gamma - \delta = \alpha - \beta + i\frac{2mg}{\hbar^2 k}(\alpha + \beta)$$

$k_0 = \frac{mg}{\hbar^2}$ $\begin{cases} \gamma = \alpha + i\frac{k_0}{k}(\alpha + \beta) \\ \delta = \beta - i\frac{k_0}{k}(\alpha + \beta) \end{cases} \quad \begin{pmatrix} \gamma \\ \delta \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad M = \begin{pmatrix} 1 + i\frac{k_0}{k} & i\frac{k_0}{k} \\ -i\frac{k_0}{k} & 1 - i\frac{k_0}{k} \end{pmatrix}$

Consideriamo particella incidente da sinistra $\alpha=1, \delta=0$

$$\begin{pmatrix} \gamma \\ 0 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} 1 \\ \beta \end{pmatrix} \quad \begin{cases} \gamma = 1 + i\frac{k_0}{k} + i\frac{k_0}{k}\beta \\ 0 = -i\frac{k_0}{k} + (1 - i\frac{k_0}{k})\beta \end{cases}$$

$$\begin{cases} \beta = \frac{i k_0 / k}{1 - i k_0 / k} \\ \gamma = 1 + i\frac{k_0}{k} - \frac{k_0^2 / k^2}{1 - i k_0 / k} = \frac{1}{1 - i k_0 / k} \end{cases} \quad \begin{aligned} R = |\beta|^2 &= \frac{k_0^2}{k^2 + k_0^2} \\ T = |\gamma|^2 &= \frac{k^2}{k^2 + k_0^2} \end{aligned} \quad \text{e ovviamente } R+T=1$$

Relazione tra matrice di trasferimento e stati legati: partiamo dalla soluzione per $E > 0$ $\psi(x) = \begin{cases} \alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx} & x < 0 \\ \gamma e^{ikx} + \delta e^{-ikx} & x > 0 \end{cases}$ con $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

ed effettuiamo una continuazione analitica a $E < 0$ usando $k = i\rho$ con $\rho > 0$

quindi $\psi(x) = \begin{cases} \alpha e^{-\rho x} + \beta e^{\rho x} \\ \gamma e^{-\rho x} + \delta e^{\rho x} \end{cases}$

Se vogliamo che ψ sia soluz. normalizzabile si deve avere $\alpha=0$ e $\delta=0$ quindi i valori di ρ associati agli stati legati soddisfano $\begin{pmatrix} \gamma \\ 0 \end{pmatrix} = M(k=i\rho) \begin{pmatrix} 0 \\ \beta \end{pmatrix}$

$M(k=i\rho) = \begin{pmatrix} 1 + \frac{k_0}{\rho} & \frac{k_0}{\rho} \\ -\frac{k_0}{\rho} & 1 - \frac{k_0}{\rho} \end{pmatrix}$ quindi si ottiene l'equaz. $(1 - \frac{k_0}{\rho})\beta = 0$
 cioè $\rho = k_0$, che è ammissibile se $k_0 > 0$ cioè $g > 0$
 Questa soluz. coincide con quella trovata in precedenza.

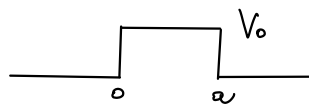
Notiamo inoltre che per $k = i k_0$ il coefficiente di trasmissione $\frac{k^2}{k_0^2 + k^2} = \frac{k^2}{(k_0 + ik)(k_0 - ik)}$ ha un polo.

È un fatto generale che gli stati legati corrispondono, sotto continuazione analitica, ai poli del coeff. di trasmissione nel semipiano complesso superiore.

Per dimostra. esplicita di completamento stati legati e di scatt. per pot. a δ vedi Komishi-Poffuti §20.3

Scattering su barriera rettangolare

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



Assumiamo $V_0 > 0$ ma si vedrà dopo come combinatebbero le cose con $V_0 < 0$

Caso $E > V_0$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}; \quad p = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$$

$$\psi(x) = \begin{cases} \alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx} & x < 0 \\ \gamma e^{ipx} + \delta e^{-ipx} & 0 < x < a \\ \epsilon e^{ikx} + \eta e^{-ikx} & x > a \end{cases}$$

$$e^{\pm i} \text{ in } x=0 \quad \begin{cases} \alpha + \beta = \gamma + \delta \\ ik(\alpha - \beta) = ip(\gamma - \delta) \end{cases} \quad \begin{cases} \gamma = \frac{1}{2} \left(\alpha + \beta + \frac{k}{p} (\alpha - \beta) \right) = \frac{1}{2} \left[\left(1 + \frac{k}{p} \right) \alpha + \left(1 - \frac{k}{p} \right) \beta \right] \\ \delta = \frac{1}{2} \left(\alpha + \beta - \frac{k}{p} (\alpha - \beta) \right) = \frac{1}{2} \left[\left(1 - \frac{k}{p} \right) \alpha + \left(1 + \frac{k}{p} \right) \beta \right] \end{cases}$$

$$e^{\pm i} \text{ in } x=a \quad \begin{cases} \gamma e^{ipa} + \delta e^{-ipa} = \epsilon e^{ika} + \eta e^{-ika} \\ ip(\gamma e^{ipa} - \delta e^{-ipa}) = ik(\epsilon e^{ika} - \eta e^{-ika}) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \epsilon e^{ika} = \frac{1}{2} \left[\left(1 + \frac{p}{k} \right) \gamma e^{ipa} + \left(1 - \frac{p}{k} \right) \delta e^{-ipa} \right] \\ \eta e^{-ika} = \frac{1}{2} \left[\left(1 - \frac{p}{k} \right) \gamma e^{ipa} + \left(1 + \frac{p}{k} \right) \delta e^{-ipa} \right] \end{cases}$$

e sostituiamo ora in queste equazioni

$$\begin{aligned} \epsilon &= \frac{1}{4} e^{-ika} \left[\left(1 + \frac{p}{k} \right) e^{ipa} \left(1 + \frac{k}{p} \right) \alpha + \left(1 + \frac{p}{k} \right) e^{ipa} \left(1 - \frac{k}{p} \right) \beta + \left(1 - \frac{p}{k} \right) e^{-ipa} \left(1 - \frac{k}{p} \right) \alpha + \left(1 - \frac{p}{k} \right) e^{-ipa} \left(1 + \frac{k}{p} \right) \beta \right] = \\ &= \frac{1}{4} e^{-ika} \left[\left\{ \left(2 + \frac{p}{k} + \frac{k}{p} \right) e^{ipa} + \left(2 - \frac{p}{k} - \frac{k}{p} \right) e^{-ipa} \right\} \alpha + \left\{ \left(\frac{p}{k} - \frac{k}{p} \right) e^{ipa} - \left(\frac{p}{k} - \frac{k}{p} \right) e^{-ipa} \right\} \beta \right] = \\ &= \frac{1}{2} e^{-ika} \left[\left(2 \cos(pa) + \left(\frac{p}{k} + \frac{k}{p} \right) i \sin(pa) \right) \alpha + \left(\frac{p}{k} - \frac{k}{p} \right) i \sin(pa) \beta \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \eta &= \frac{1}{4} e^{ika} \left[\left(1 - \frac{p}{k} \right) e^{ipa} \left(1 + \frac{k}{p} \right) \alpha + \left(1 - \frac{p}{k} \right) e^{ipa} \left(1 - \frac{k}{p} \right) \beta + \left(1 + \frac{p}{k} \right) e^{-ipa} \left(1 - \frac{k}{p} \right) \alpha + \left(1 + \frac{p}{k} \right) e^{-ipa} \left(1 + \frac{k}{p} \right) \beta \right] = \\ &= \frac{1}{4} e^{ika} \left[\left\{ \left(\frac{k}{p} - \frac{p}{k} \right) e^{ipa} + \left(\frac{p}{k} - \frac{k}{p} \right) e^{-ipa} \right\} \alpha + \left\{ \left(2 - \frac{p}{k} - \frac{k}{p} \right) e^{ipa} + \left(2 + \frac{p}{k} + \frac{k}{p} \right) e^{-ipa} \right\} \beta \right] \\ &= \frac{1}{2} e^{ika} \left[- \left(\frac{p}{k} - \frac{k}{p} \right) i \sin(pa) \beta + \left(2 \cos(pa) - \left(\frac{p}{k} + \frac{k}{p} \right) i \sin(pa) \right) \alpha \right] \end{aligned}$$

$$\text{quindi } \begin{pmatrix} \epsilon \\ \eta \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad \text{con } M = \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \quad \begin{cases} A = \frac{1}{2} e^{-ika} \left(2 \cos(pa) + \left(\frac{p}{k} + \frac{k}{p} \right) i \sin(pa) \right) \\ B = \frac{1}{2} e^{-ika} \left(\frac{p}{k} - \frac{k}{p} \right) i \sin(pa) \end{cases}$$

$$\text{notiamo che } \det M = |A|^2 - |B|^2 = \frac{1}{4} \left(4 \cos^2(pa) + \left(\frac{p}{k} + \frac{k}{p} \right)^2 \sin^2(pa) - \left(\frac{p}{k} - \frac{k}{p} \right)^2 \sin^2(pa) \right) = 1$$

che $\det M = 1$ e che M abbia la forma $\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix}$ e' in realta' un fatto generale, come si vedra' piu' avanti, per tutti i potenziali t.c. $V(x) \rightarrow 0$ per $|x| \rightarrow \infty$.

Consideriamo il caso di particella incidente da sinistra, dunque $\eta = 0$, $\alpha = 1$

$$\begin{cases} E = A + B\beta \\ 0 = B^* + A^*\beta \end{cases} \quad \beta = -\frac{B^*}{A^*}$$

$$E = A - \frac{|B|^2}{A^*} = \frac{|A|^2 - |B|^2}{A^*} = \frac{1}{A^*}$$

Il coefficiente di trasmissione e' allora $T = \frac{J_{out}}{J_{in}} = \frac{\frac{\hbar k}{m} |E|^2}{\frac{\hbar k}{m}} = \frac{1}{|A|^2} = \frac{4}{4 \cos^2(pa) + \left(\frac{p}{k} + \frac{k}{p}\right)^2 \sin^2(pa)}$

inoltre $4 \cos^2(pa) + \left(\frac{p}{k} + \frac{k}{p}\right)^2 \sin^2(pa) = 4 + \left[\left(\frac{p}{k} + \frac{k}{p}\right)^2 - 4\right] \sin^2(pa) = 4 + \left(\frac{p}{k} - \frac{k}{p}\right)^2 \sin^2(pa)$

quindi $\frac{1}{T} = 1 + \frac{1}{4} \left(\frac{p}{k} - \frac{k}{p}\right)^2 \sin^2(pa)$ e c' e' trasmissione completa per $pa = n\pi$, $n \in \mathbb{Z}$

scritto in termini dell'energia questo risultato diventa

$$\frac{1}{T} = 1 + \frac{1}{4} \left(\sqrt{\frac{E-V_0}{E}} - \sqrt{\frac{E}{E-V_0}} \right)^2 \sin^2 \left(\frac{a \sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar} \right) = 1 + \frac{1}{4} \frac{V_0^2}{E(E-V_0)} \sin^2 \left(\frac{a \sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar} \right)$$

$$\frac{E-V_0}{E} + \frac{E}{E-V_0} - 2 = \frac{E^2 + V_0^2 - 2EV_0 + E^2 - 2E^2 + 2EV_0}{E(E-V_0)} = \frac{V_0^2}{E(E-V_0)}$$

Per $E \gg V_0$ ovviamente $T \rightarrow 1$ mentre per $E \rightarrow V_0^+$

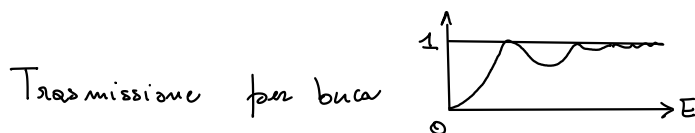
$$\frac{1}{T} \simeq 1 + \frac{V_0^2}{4V_0(E-V_0)} \frac{a^2 2m(E-V_0)}{\hbar^2} = 1 + \frac{V_0 m a^2}{2\hbar^2}$$

Tutti gli argomenti usati continuano a valere anche per $V_0 < 0$. In particolare se $V_0 = -V_B$ con $V_B > 0$ profondita' della buca, otteniamo il coeff di trasmissione sulla buca

$$\frac{1}{T} = 1 + \frac{1}{4} \frac{V_B^2}{E(E+V_B)} \sin^2 \left(\frac{a \sqrt{2m(E+V_B)}}{\hbar} \right)$$

e le energie per le quali si ha trasmissione completa sono

$\frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_B)} = n\pi$ quindi $E = -V_B + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{a} \right)^2$ che sono i livelli di una buca "infinita" con valore al minimo $-V_B$ (effetto Ramsauer-Townsend).



Per barriera e' simile ma con il

calcolo effettuato finora si prende solo la regione $E > V_0$ e a V_0 la trasmissione assume il valore non nullo calcolato in precedenza.

Caso $0 < E < V_0$

In questo caso $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$; $p = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$ e la funzione d'onda ha la forma

$$\psi(x) = \begin{cases} \alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx} & x < 0 \\ \gamma e^{px} + \delta e^{-px} & 0 < x < a \\ \epsilon e^{ikx} + \eta e^{-ikx} & x > a \end{cases} \quad C^1 \text{ in } x=0 \text{ implica } \begin{cases} \alpha + \beta = \gamma + \delta \\ ik(\alpha - \beta) = p(\gamma - \delta) \end{cases}$$

quindi $\begin{cases} \gamma = \frac{1}{2} \left[(1 + i\frac{k}{p})\alpha + (1 - i\frac{k}{p})\beta \right] \\ \delta = \frac{1}{2} \left[(1 - i\frac{k}{p})\alpha + (1 + i\frac{k}{p})\beta \right] \end{cases}$

C^1 in $x=a$ impone $\begin{cases} \gamma e^{pa} + \delta e^{-pa} = \epsilon e^{ika} + \eta e^{-ika} \\ p(\gamma e^{pa} - \delta e^{-pa}) = ik(\epsilon e^{ika} - \eta e^{-ika}) \end{cases}$ quindi

$\begin{cases} \epsilon e^{ika} = \frac{1}{2} \left[(1 - i\frac{p}{k})e^{pa}\gamma + (1 + i\frac{p}{k})e^{-pa}\delta \right] \\ \eta e^{-ika} = \frac{1}{2} \left[(1 + i\frac{p}{k})e^{pa}\gamma + (1 - i\frac{p}{k})e^{-pa}\delta \right] \end{cases}$ e sostituendo otteniamo

$$\begin{aligned} \epsilon &= \frac{1}{4} e^{-ika} \left[(1 - i\frac{p}{k})e^{pa} (1 + i\frac{k}{p})\alpha + (1 - i\frac{p}{k})e^{pa} (1 - i\frac{k}{p})\beta + (1 + i\frac{p}{k})e^{-pa} (1 - i\frac{k}{p})\alpha + (1 + i\frac{p}{k})e^{-pa} (1 + i\frac{k}{p})\beta \right] = \\ &= \frac{1}{4} e^{-ika} \left[\left\{ (2 - i\frac{p}{k} + i\frac{k}{p})e^{pa} + (2 + i\frac{p}{k} - i\frac{k}{p})e^{-pa} \right\} \alpha + \left\{ (-i\frac{p}{k} - i\frac{k}{p})e^{pa} + (i\frac{p}{k} + i\frac{k}{p})e^{-pa} \right\} \beta \right] = \\ &= \frac{1}{2} e^{-ika} \left[(2 \cosh(pa) - i(\frac{p}{k} - \frac{k}{p}) \sinh(pa)) \alpha - i(\frac{p}{k} + \frac{k}{p}) \sinh(pa) \beta \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \eta &= \frac{1}{4} e^{ika} \left[(1 + i\frac{p}{k})e^{pa} (1 + i\frac{k}{p})\alpha + (1 + i\frac{p}{k})e^{pa} (1 - i\frac{k}{p})\beta + (1 - i\frac{p}{k})e^{-pa} (1 - i\frac{k}{p})\alpha + (1 - i\frac{p}{k})e^{-pa} (1 + i\frac{k}{p})\beta \right] = \\ &= \frac{1}{2} e^{ika} \left[i(\frac{p}{k} + \frac{k}{p}) \sinh(pa) \alpha + (2 \cosh(pa) + i(\frac{p}{k} - \frac{k}{p}) \sinh(pa)) \beta \right] = \end{aligned}$$

quindi di nuovo $\begin{pmatrix} \epsilon \\ \eta \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ con $M = \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix}$ e

$$A = \frac{1}{2} e^{-ika} (2 \cosh(pa) - i(\frac{p}{k} - \frac{k}{p}) \sinh(pa)) \quad B = -\frac{1}{2} e^{-ika} i(\frac{p}{k} + \frac{k}{p}) \sinh(pa)$$

di nuovo si vede facilmente che $\det M = |A|^2 - |B|^2 = 1$.

Consideriamo nuovamente scattering da sinistra. In modo identico al caso $E > V_0$ si trova

imponendo $\alpha = 1, \eta = 0$: $\beta = -\frac{B^*}{A^*}$, $E = \frac{1}{A^*}$, $T = |E|^2 = \frac{1}{|A|^2}$

e abbiamo $\frac{1}{T} = \frac{1}{4} \left(4 \cosh^2(pa) + \left(\frac{p}{k} - \frac{k}{p} \right)^2 \sinh^2(pa) \right) = 1 + \frac{1}{4} \left(\frac{p}{k} + \frac{k}{p} \right)^2 \sinh^2(pa)$
 $\cosh^2 = 1 + \sinh^2$

in termini di E

$$\left(\frac{p}{k} + \frac{k}{p} \right)^2 = \frac{V_0 - E}{E} + \frac{E}{V_0 - E} + 2 = \frac{V_0^2 - 2EV_0 + E^2 + E^2 + 2EV_0 - 2E^2}{E(V_0 - E)} = \frac{V_0^2}{E(V_0 - E)}$$

quindi $\frac{1}{T} = 1 + \frac{1}{4} \frac{V_0^2}{E(V_0 - E)} \sinh^2\left(\frac{a\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}\right)$

Per $E \rightarrow V_0^-$ si trova $\frac{1}{T} \approx 1 + \frac{1}{4} \frac{V_0^2}{V_0(V_0 - E)} \frac{a^2 2m(V_0 - E)}{\hbar^2} = 1 + \frac{1}{2} \frac{V_0 a^2 m}{\hbar^2}$ come per $E \rightarrow V_0^+$

Ovviamente $T \rightarrow 0$ per $E \rightarrow 0^+$ e anche a E fisso per $a \rightarrow \infty$.

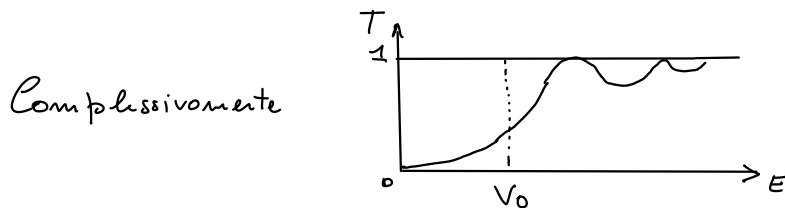
Ricordiamo che $\gamma = \frac{1}{2} \left[\left(1 + i\frac{k}{p}\right) + \left(1 - i\frac{k}{p}\right)\beta \right]$ (abbiamo usato $\alpha=1$) inoltre

$$\beta = -\frac{B^*}{A^*} = -\frac{i\left(\frac{p}{k} + \frac{k}{p}\right) \sinh(pa)}{2 \cosh(pa) + i\left(\frac{p}{k} - \frac{k}{p}\right) \sinh(pa)} \quad \text{e per } pa \gg 1 \text{ abbiamo}$$

$$\beta \approx -\frac{i\left(\frac{p}{k} + \frac{k}{p}\right)}{2 + i\left(\frac{p}{k} - \frac{k}{p}\right)} \quad \text{quindi} \quad \gamma = \frac{1}{2\left(2 + i\left(\frac{p}{k} - \frac{k}{p}\right)\right)} \left[\left(1 + i\frac{k}{p}\right)\left(2 + i\left(\frac{p}{k} - \frac{k}{p}\right)\right) - \left(1 - i\frac{k}{p}\right)i\left(\frac{p}{k} + \frac{k}{p}\right) \right] =$$

$$= \frac{1}{2\left(2 + i\left(\frac{p}{k} - \frac{k}{p}\right)\right)} \left(\cancel{2 + i\frac{p}{k} - i\frac{k}{p}} + \cancel{2i\frac{k}{p} - 1 + \frac{k^2}{p^2}} - \cancel{i\frac{p}{k} - i\frac{k}{p} - 1 - \frac{k^2}{p^2}} \right) = 0$$

Quindi nel limite $pa \gg 1$ la componente esp crescente è soppressa.



Aspetti generali della matrice di trasferimento

Proprietà generali

Si sa visto che sia per il potenziale a δ che per la barriera la matrice di trasferimento della forma

$$M = \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix}$$

Per $V(x) = -g\delta(x)$ si ha $A = 1 + i\frac{k_0}{k}$, $B = i\frac{k_0}{k}$ e $k_0 = mg/\hbar^2$

Per $V(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x < 0 \text{ e } x > a \\ V_0 & \text{altrimenti} \end{cases}$ e $E > V_0$ si ha

In entrambi i casi $\det M = 1$
e per la δ si ha B immag. pure

$$\begin{cases} A = \frac{1}{2} e^{-ika} (2\cos(pa) + (\frac{p}{k} + \frac{k}{p})i \sin(pa)) \\ B = (\frac{p}{k} - \frac{k}{p})i \sin(pa) \end{cases}$$

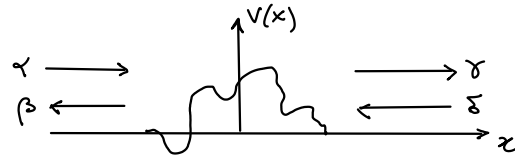
$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$p = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$$

Consideriamo ora il caso di un generico potenz. $V(x)$ con $V(x) \rightarrow 0$ per $x \rightarrow \pm\infty$.

quindi

$$\psi(x) \rightarrow \begin{cases} \alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx} & \text{per } x \rightarrow -\infty \\ \gamma e^{ikx} + \delta e^{-ikx} & \text{per } x \rightarrow +\infty \end{cases}$$



e abbiamo la matrice di trasferimento $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma \\ \delta \end{pmatrix}$

Conseguenza di $V(x) \in \mathbb{R}$

Se $V(x) \in \mathbb{R}$ e ψ è soluz. dell'eq. di Schrodinger indip. del tempo, anche ψ^* è soluzione con la stessa energia

$$\psi^*(x) \rightarrow \begin{cases} \alpha^* e^{-ikx} + \beta^* e^{ikx} & x \rightarrow -\infty \\ \gamma^* e^{-ikx} + \delta^* e^{ikx} & x \rightarrow +\infty \end{cases}$$

quindi rispetto a ψ abbiamo $\alpha \rightarrow \beta^*$, $\beta \rightarrow \alpha^*$, $\gamma \rightarrow \delta^*$, $\delta \rightarrow \gamma^*$

$$\text{quindi } \begin{pmatrix} \delta^* \\ \gamma^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta^* \\ \alpha^* \end{pmatrix} \text{ e coniugando } \begin{pmatrix} \delta \\ \gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^* & B^* \\ C^* & D^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix} \text{ inoltre } \begin{pmatrix} \delta \\ \gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^* & B^* \\ C^* & D^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^* & B^* \\ C^* & D^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

$$\text{quindi } \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^* & B^* \\ C^* & D^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ che diventa}$$

$$\begin{pmatrix} C & D \\ A & B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B^* & A^* \\ D^* & C^* \end{pmatrix}$$

$$\text{da cui infine } A = D^*, C = B^* \text{ quindi per pot. reali } M = \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix}$$

Conseguenze della cons. della corrente

Per stati stazionari 1d si ha $\partial_t \rho = 0$ quindi $j = \text{const.}$ quindi abbiamo dalla cons. di

$$j = \frac{1}{m} \text{Re}(\psi^* \hat{p} \psi) \text{ la relazione } |\alpha|^2 - |\beta|^2 = |\gamma|^2 - |\delta|^2$$

$$\text{Siano } \vec{v} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \text{ e } \vec{w} = \begin{pmatrix} \gamma \\ \delta \end{pmatrix}, \text{ allora abbiamo } \vec{v} = M \vec{w} \text{ e inoltre}$$

$$|a|^2 - |b|^2 = \bar{u}^\dagger \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \bar{u} \quad \text{e quindi} \quad |\delta|^2 - |\bar{\delta}|^2 = \bar{v}^\dagger \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \bar{v} = \bar{u}^\dagger H^\dagger \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} H \bar{u}$$

e quindi: $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = H^\dagger \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} H$ usando $H = \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix}$ si ha

$$\begin{pmatrix} A^* & B \\ B^* & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^* & B \\ B^* & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ -B^* & A^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |A|^2 - |B|^2 & 0 \\ 0 & |B|^2 - |A|^2 \end{pmatrix} \quad \text{quindi}$$

$$\det H = |A|^2 - |B|^2 = 1 \quad \text{a causa della conservaz. della corrente}$$

Conseguenza dell'invarianza sotto parità

Se per $V(x)$ si ha $\psi(x) \rightarrow \begin{cases} \alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx} & x \rightarrow -\infty \\ \gamma e^{ikx} + \delta e^{-ikx} & x \rightarrow +\infty \end{cases}$ e $\begin{pmatrix} \gamma \\ \delta \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$

per $W(x) = V(-x)$ dobbiamo cambiare $x \rightarrow -x$ e scambiare $+\infty \leftrightarrow -\infty$ quindi:

$$\psi_p(x) \rightarrow \begin{cases} \bar{\delta} e^{+ikx} + \gamma e^{-ikx} & x \rightarrow -\infty \\ \beta e^{+ikx} + \alpha e^{-ikx} & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad \text{quindi} \quad \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix} = M_p \begin{pmatrix} \bar{\delta} \\ \gamma \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix} = M_p \begin{pmatrix} \bar{\delta} \\ \gamma \end{pmatrix} = M_p \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma \\ \delta \end{pmatrix} = M_p \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} H \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad \text{quindi}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = M_p \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} H \quad \text{da cui} \quad M_p = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} H^{-1} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Ricordiamo $H = \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix}$ e $\det H = 1$, quindi abbiamo

$$H^{-1} = \frac{\begin{pmatrix} \text{complementi} \\ \text{algebrici di } H \end{pmatrix}^T}{\det H} = \begin{pmatrix} A^* & -B^* \\ -B & A \end{pmatrix}^T = \begin{pmatrix} A^* & -B \\ -B^* & A \end{pmatrix} \quad \text{come si verifica anche direttamente}$$

$$M_p = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A^* & -B \\ -B^* & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -B & A^* \\ A & -B^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & -B^* \\ -B & A^* \end{pmatrix}$$

Per potenziali pari si deve avere $M_p = H$, quindi $B^* = -B$ e B è immaginario puro.

Matrice di trasferimento di $W(x) = V(x-a)$

forma asintotica delle autofunz. con $V(x)$: $\psi(x) = \begin{cases} \alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx} & x \rightarrow -\infty \\ \gamma e^{ikx} + \delta e^{-ikx} & x \rightarrow +\infty \end{cases}$

Consideriamo $x \rightarrow x-a$, quindi: $\psi_w(x) = \begin{cases} \alpha e^{-ika} e^{ikx} + \beta e^{ika} e^{-ikx} & x \rightarrow -\infty \\ \gamma e^{-ika} e^{ikx} + \delta e^{ika} e^{-ikx} & x \rightarrow +\infty \end{cases}$ e dunque

$$\begin{pmatrix} \gamma e^{-ika} \\ \delta e^{ika} \end{pmatrix} = M_w \begin{pmatrix} \alpha e^{-ika} \\ \beta e^{ika} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} e^{-ika} & 0 \\ 0 & e^{ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma \\ \delta \end{pmatrix} = M_w \begin{pmatrix} e^{-ika} & 0 \\ 0 & e^{ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad \text{e usando}$$

$$\begin{pmatrix} \gamma \\ \delta \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad \text{otteniamo} \quad \begin{pmatrix} e^{-ika} & 0 \\ 0 & e^{ika} \end{pmatrix} H = M_w \begin{pmatrix} e^{-ika} & 0 \\ 0 & e^{ika} \end{pmatrix} \quad \text{da cui infine}$$

$$M_w = \begin{pmatrix} e^{-ika} & 0 \\ 0 & e^{ika} \end{pmatrix} H \begin{pmatrix} e^{ika} & 0 \\ 0 & e^{-ika} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B e^{-2ika} \\ B^* e^{2ika} & A^* \end{pmatrix} \quad \text{usando} \quad H = \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix}$$

Scattering da sinistra e da destra

$$M = \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \quad \det M = |A|^2 - |B|^2 = 1$$

Per particella incidente da sinistra $\psi(x) \rightarrow \begin{cases} e^{ikx} + \beta e^{-ikx} & x \rightarrow -\infty \\ \gamma e^{ikx} & x \rightarrow +\infty \end{cases}$

$$\begin{pmatrix} \gamma \\ 0 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} 1 \\ \beta \end{pmatrix} \quad \text{quindi} \quad \begin{pmatrix} \gamma \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A + \beta B \\ B^* + \beta A^* \end{pmatrix} \quad \text{dalla seconda } \beta = -\frac{B^*}{A^*}$$

e sostituendo nella prima $\gamma = A - \frac{|B|^2}{A^*} = \frac{1}{A^*}$ quindi

$$T = \frac{1}{|A|^2}, \quad R = \frac{|B|^2}{|A|^2} \quad \text{e da } |A|^2 - |B|^2 = 1 \quad \text{segue } T + R = 1$$

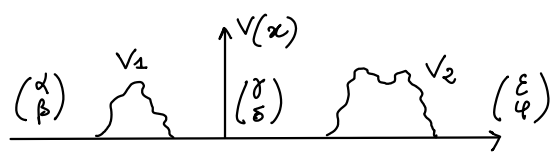
Per particella incidente da destra $\psi(x) \rightarrow \begin{cases} \tilde{\beta} e^{-ikx} & x \rightarrow -\infty \\ \tilde{\gamma} e^{ikx} + e^{-ikx} & x \rightarrow +\infty \end{cases}$ quindi

$$\begin{pmatrix} \tilde{\gamma} \\ 1 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} 0 \\ \tilde{\beta} \end{pmatrix} \quad \begin{cases} \tilde{\gamma} = B \tilde{\beta} \\ 1 = A^* \tilde{\beta} \end{cases} \quad \tilde{\beta} = \frac{1}{A^*} \quad \tilde{\gamma} = \tilde{\beta} B = \frac{B}{A^*} \quad \text{e infine}$$

$$\tilde{T} = |\tilde{\beta}|^2 = \frac{1}{|A|^2} = T \quad \tilde{R} = |\tilde{\gamma}|^2 = \frac{|B|^2}{|A|^2} = R$$

Quindi coeff. di trasmissione e di riflessione da destra e da sinistra sono uguali

Composizione delle matrici di trasferimento



$$\begin{pmatrix} \epsilon \\ \phi \end{pmatrix} = M_{TOT} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \epsilon \\ \phi \end{pmatrix} = M_2 \begin{pmatrix} \gamma \\ \delta \end{pmatrix} = M_2 M_1 \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad \text{quindi} \quad M_{TOT} = M_2 M_1$$

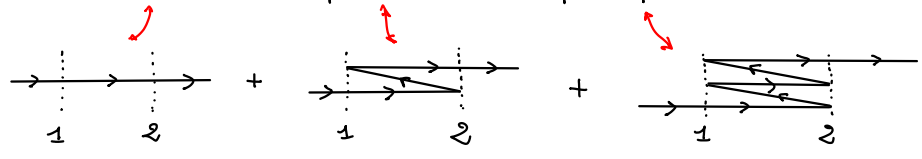
Usando la forma generale $M = \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix}$ abbiamo $M_{TOT} = \begin{pmatrix} A_2 & B_2 \\ B_2^* & A_2^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 & B_1 \\ B_1^* & A_1^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1 A_2 + B_1^* B_2 & \dots \\ \dots & \dots \end{pmatrix}$

Per onda incidente da sinistra indichiamo con γ_{TOT} l'ampiezza trasmessa totale e con γ_1 e γ_2 le ampiezze di trasmissione da 1 e 2 da sinistra abbiamo

$$\gamma_{TOT} = \frac{1}{A_{TOT}^*} = \frac{1}{A_1^* A_2^* \left[1 - \left(-\frac{B_2^*}{A_2^*} \right) \left(\frac{B_1}{A_1^*} \right) \right]} = \underbrace{\gamma_1 \gamma_2}_{\text{ampiezze trasmesse da 1,2 con incidenza da sinistra}} \frac{1}{1 - \underbrace{\beta_2 \tilde{\gamma}_1}_{\text{ampiezza riflessa da 2 con incidenza da sinistra}}}$$

$$\frac{1}{1-x} = 1 + x + x^2 + \dots$$

$$\gamma_{TOT} = \gamma_1 \gamma_2 (1 + \beta_2 \tilde{\gamma}_1 + \beta_2 \tilde{\gamma}_1 \beta_2 \tilde{\gamma}_1 + \dots) = \gamma_1 \gamma_2 + \gamma_1 \beta_2 \tilde{\gamma}_1 \gamma_2 + \gamma_1 \beta_2 \tilde{\gamma}_1 \beta_2 \tilde{\gamma}_1 \gamma_2 + \dots$$



Con i prodotti delle matrici di trasferimento si riassumono gli scattering multipli nelle ampiezze

Potenziale a doppia δ

Consideriamo il potenziale $V(x) = -g\delta(x) - g\delta(x-2a)$ cioè due δ separate da distanza $2a$

Per il potenziale $-g\delta(x)$ si è visto che $M = \begin{pmatrix} 1 + i k_0/k & i k_0/k \\ -i k_0/k & 1 - i k_0/k \end{pmatrix}$ dove $k_0 = \frac{mg}{\hbar^2}$

inoltre si è visto che se $M = \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix}$ allora la matrice di trasferimento associata al potenziale traslato di $2a$ è $\begin{pmatrix} A & B e^{-i 4 k a} \\ B^* e^{i 4 k a} & A^* \end{pmatrix}$ quindi per la matrice di trasferimento totale è

$$M_{TOT} = \begin{pmatrix} A & B e^{-i 4 k a} \\ B^* e^{i 4 k a} & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^2 + |B|^2 e^{-4 i k a} & \dots \\ \dots & \dots \end{pmatrix} \quad \begin{matrix} A = 1 + i k_0/k \\ B = i k_0/k \end{matrix}$$

Coef. di trasmissione $T = \frac{1}{|A^2 + |B|^2 e^{-4 i k a}|^2} = \frac{1}{\left| 1 - \frac{k_0^2}{k^2} + 2i \frac{k_0}{k} + \frac{k_0^2}{k^2} e^{-4 i k a} \right|^2}$

introducendo la notaz. $ka = y$; $k_0 a = \beta$ abbiamo

$$T = \frac{1}{\left(1 - \frac{\beta^2}{y^2} + \frac{\beta^2}{y^2} \cos(4y) \right)^2 + \left(2 \frac{\beta}{y} - \frac{\beta^2}{y^2} \sin(4y) \right)^2}$$

$$\cos(4y) = \cos^2(2y) - \sin^2(2y) = 1 - 2\sin^2(2y)$$

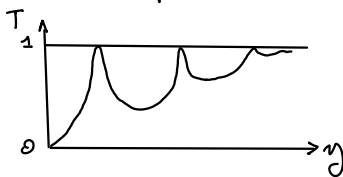
$$\sin(4y) = 2\sin(2y)\cos(2y)$$

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{\beta^2}{y^2} + \frac{\beta^2}{y^2} \cos(4y) \right)^2 + \left(2 \frac{\beta}{y} - \frac{\beta^2}{y^2} \sin(4y) \right)^2 &= \left(1 - 2 \frac{\beta^2}{y^2} \sin^2(2y) \right)^2 + \left(2 \frac{\beta}{y} - \frac{\beta^2}{y^2} 2 \sin(2y)\cos(2y) \right)^2 = \\ &= 1 - 4 \frac{\beta^2}{y^2} \sin^2(2y) + 4 \frac{\beta^4}{y^4} \sin^4(2y) + 4 \frac{\beta^2}{y^2} - 8 \frac{\beta^3}{y^3} \sin(2y)\cos(2y) + 4 \frac{\beta^4}{y^4} \sin^2(2y) \cos^2(2y) = \\ &= 1 + 4 \frac{\beta^2}{y^2} \cos^2(2y) + 4 \frac{\beta^4}{y^4} \sin^2(2y) - 8 \frac{\beta^3}{y^3} \sin(2y)\cos(2y) = 1 + 4 \frac{\beta^2}{y^2} \left[\cos(2y) - \frac{\beta}{y} \sin(2y) \right]^2 \end{aligned}$$

quindi $T = 1 / \left\{ 1 + 4 \frac{\beta^2}{y^2} \left[\cos(2y) - \frac{\beta}{y} \sin(2y) \right]^2 \right\}$

Si vede che $T=1$ quando $\cos(2y) - \frac{\beta}{y} \sin(2y) = 0$ cioè $\tan(2y) = y/\beta$. Se $g \rightarrow \pm\infty$

abbiamo $\beta \rightarrow \pm\infty$ e quindi $T=1$ per $2ka \approx n\pi$ che sono i valori che corrispondono ai livelli energetici della buca infinita di larghezza $2a$



Abbiamo quindi $A_{TOT}^*(k) = (A^*)^2 + |B|^2 e^{4 i k a} = 1 - \frac{k_0^2}{k^2} - 2i \frac{k_0}{k} + \frac{k_0^2}{k^2} e^{4 i k a}$

e continuando analiticamente $k = i\rho$ con $\rho > 0$ abbiamo $A^*(i\rho) = 1 + \frac{k_0^2}{\rho^2} - 2 \frac{k_0}{\rho} - \frac{k_0^2}{\rho^2} e^{-4\rho a}$

e gli stati legati sono gli zeri di questa espressione, in quanto

$$\begin{cases} \alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx} \rightarrow \alpha e^{-\rho x} + \beta e^{\rho x} \\ \gamma e^{ikx} + \delta e^{-ikx} \rightarrow \gamma e^{-\rho x} + \delta e^{\rho x} \end{cases} \quad \text{e per normalizz.} \quad \begin{pmatrix} \gamma \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A(i\rho) & B(i\rho) \\ B^*(i\rho) & A^*(i\rho) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \beta \end{pmatrix}$$

quindi stati legati corrispondono a $(\rho - k_0)^2 = k_0^2 e^{-4\rho a}$ da cui $\begin{cases} \rho - k_0 = k_0 e^{-2\rho a} \\ \rho - k_0 = -k_0 e^{-2\rho a} \end{cases}$ come si era visto nella sezione "stati legati".

Modelli di Kronig-Penney per cristalli 1dim.

Indichiamo con $\mathcal{U} = \begin{pmatrix} e^{-ika} & 0 \\ 0 & e^{ika} \end{pmatrix}$ la matrice di traslazione di una sporcatura "a" e consideriamo una successione di buche/borniere sporcate "a". Allora $M(a) = \mathcal{U} H \mathcal{U}^\dagger$, $M(2a) = \mathcal{U}^2 H(\mathcal{U}^2)^\dagger \dots$

M $\mathcal{U} H \mathcal{U}^\dagger$ $\mathcal{U}^2 H(\mathcal{U}^2)^\dagger$ $\dots$ $\mathcal{U}^{m-1} H(\mathcal{U}^{m-1})^\dagger$ e usiamo la regola di composizione delle matrici di transf.

0 a $2a$ $(m-1)a$ $\mathcal{U}^\dagger \mathcal{U} = 1$

$$M_{\text{tot}} = \underbrace{\mathcal{U}^{m-1} H(\mathcal{U}^{m-1})^\dagger}_{m-1} \dots \underbrace{\mathcal{U}^2 H(\mathcal{U}^2)^\dagger}_2 \underbrace{\mathcal{U} H \mathcal{U}^\dagger}_1 \underbrace{H}_0 = \underbrace{\mathcal{U}^m}_{m-1} \underbrace{\mathcal{U}^\dagger H}_{m-1} \mathcal{U}^\dagger H \dots \underbrace{\mathcal{U}^\dagger H}_0 = \mathcal{U}^m (\mathcal{U}^\dagger H)^m$$

Coef. di trasmissione totale $T = \frac{1}{|M_{\text{tot}}|_{11}|^2}$ inoltre $|\mathcal{U}^m (\mathcal{U}^\dagger H)^m|_{11}| = |[(\mathcal{U}^\dagger H)^m]_{11}|$

Poiché $\det(\mathcal{U}^\dagger H) = \det \mathcal{U}^\dagger \det H = 1$, se λ_1, λ_2 sono i due autovalori di $\mathcal{U}^\dagger H$ si ha $\lambda_1 \lambda_2 = 1$ e supponiamo $\mathcal{U}^\dagger H$ diagonalizzabile (sicuramente vero se $\lambda_1 \neq \lambda_2$, unico caso "pericoloso" $\lambda_1 = \lambda_2 = \pm 1$), allora

$$\mathcal{U}^\dagger H = U \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} U^\dagger \quad \text{con } U U^\dagger = 1, \quad \text{quindi } (\mathcal{U}^\dagger H)^m = U \begin{pmatrix} \lambda_1^m & 0 \\ 0 & \lambda_2^m \end{pmatrix} U^\dagger, \quad \text{di conseguenza}$$

$$[(\mathcal{U}^\dagger H)^m]_{11} = [U \begin{pmatrix} \lambda_1^m & 0 \\ 0 & \lambda_2^m \end{pmatrix} U^\dagger]_{11} = c_1 \lambda_1^m + c_2 \lambda_2^m \quad \text{con } c_1 \text{ e } c_2 \text{ che sono indipendenti da } m.$$

Poiché $\lambda_1 \lambda_2 = 1$, se $|\lambda_1| \neq 1$ allora per $m \rightarrow \infty$ si ha o $|\lambda_1|^m \rightarrow \infty$ o $|\lambda_2|^m \rightarrow \infty$ e in entrambi i casi $T \rightarrow 0$ esponenzialmente in m (nel caso non diagonalizzabile si ha

$$\mathcal{U}^\dagger H = U \begin{pmatrix} \pm 1 & 1 \\ 0 & \pm 1 \end{pmatrix} U^\dagger \quad \text{e } T \rightarrow 0 \text{ come } 1/m^2).$$

Derivoli per k generici $T \rightarrow 0$ esp in m . Per avere $T \neq 0$ si deve avere $\lambda_1 = e^{i\varphi}$, quindi

$$\det(\mathcal{U}^\dagger H - e^{i\varphi}) = 0 \quad \text{quindi } \det(H - e^{i\varphi} \mathcal{U}) = 0, \quad \text{che usando } H = \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \text{ si scrive}$$

$$0 = \det \begin{pmatrix} A - e^{i(\varphi - ka)} & B \\ B^* & A^* - e^{i(\varphi + ka)} \end{pmatrix} = |A|^2 - A e^{i(\varphi + ka)} - A^* e^{i(\varphi - ka)} + e^{2i\varphi} - |B|^2. \quad \text{Ricorrendo } |A|^2 - |B|^2 = 1$$

$$\text{e introducendo la nota. } A(k) = |A(k)| e^{i\varphi(k)} \text{ si ha } -|A| e^{i\varphi} (e^{i(\varphi + ka)} + e^{-i(\varphi + ka)}) + e^{2i\varphi} + 1 = 0$$

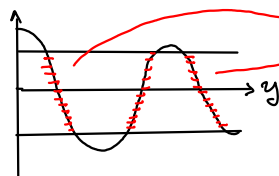
cioè $|A(k)| \cos(\varphi(k) + ka) = \cos \varphi$ che ha soluz. solo se $|A(k) \cos(\varphi(k) + ka)| \leq 1$, che definisce le bande di conduzione.

Per la Σ si ha $A(k) = 1 + i k_0/k$ quindi $|A| = \sqrt{1 + k_0^2/k^2}$ e $\tan \varphi = \frac{k_0}{k}$ da cui

$$\cos \varphi = \frac{1}{\sqrt{1 + k_0^2/k^2}}; \quad \sin \varphi = \frac{k_0/k}{\sqrt{1 + k_0^2/k^2}}; \quad \cos(\varphi + ka) = \cos \varphi \cos(ka) - \sin \varphi \sin(ka) \quad \text{e dunque}$$

$$|A| \cos(\varphi + ka) = \cos(ka) - \frac{k_0}{k} \sin(ka) = \cos(y) - \frac{\beta}{y} \sin y \quad \text{definendo } y = ka \text{ e } \beta = k_0 a$$

Un andamento tipico è



bande di trasmissione

(Per maggiori dettagli Gross, Pannicini "Solid state physics" cap 1)

Sistemi a due livelli

Matrici di Pauli e loro proprietà

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{matrici hermitiane a traccia nulla}$$

Si verifica tramite calcolo esplicito che

$$1) \quad \sigma_i^2 = \mathbb{1} \quad (\text{mo' somma su "i"}) \quad (\text{da (1) segue } \lambda = \pm 1 \text{ poich\'e } \text{tr} \sigma_i = 0)$$

$$2) \quad [\sigma_i, \sigma_j] = 2i \epsilon_{ijk} \sigma_k$$

$$3) \quad \sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 0 \quad \text{se } i \neq j$$

Da (2) e (3) segue $\sigma_i \sigma_j = i \epsilon_{ijk} \sigma_k$ se $i \neq j$ e usando anche (1) si trova infine

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} \mathbb{1} + i \epsilon_{ijk} \sigma_k \quad (\text{nota: di solito la matrice identica } \mathbb{1} \text{ si sottintende})$$

Se $\vec{a}, \vec{b} \in \mathbb{R}$ si ha

$$(\vec{a} \cdot \vec{\sigma})(\vec{b} \cdot \vec{\sigma}) = a_i b_j \sigma_i \sigma_j = a_i b_j (\delta_{ij} + i \epsilon_{ijk} \sigma_k) = \vec{a} \cdot \vec{b} + i (\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{\sigma}$$

quindi in particolare $(\vec{a} \cdot \vec{\sigma})^2 = |\vec{a}|^2$. 3matrice

$$e^{i \vec{a} \cdot \vec{\sigma}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{i^k}{k!} (\vec{a} \cdot \vec{\sigma})^k = \underbrace{\sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{(2j)!} |\vec{a}|^{2j}}_{k=2j} + i \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{(2j+1)!} |\vec{a}|^{2j+1} \frac{\vec{a} \cdot \vec{\sigma}}{|\vec{a}|} = \cos |\vec{a}| + i \frac{\vec{a} \cdot \vec{\sigma}}{|\vec{a}|} \sin |\vec{a}|$$

NOTA: la dimensione dello spazio delle matrici hermitiane 2×2 \(\epsilon\) 4 e la pi\`u generale matrice hermitiana \(\epsilon\) in $\text{span}\{\mathbb{1}, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}$

Sistemi a due livelli

La pi\`u generale matrice 2×2 hermitiana si scrive $H = \begin{pmatrix} a & c^* \\ c & b \end{pmatrix}$ con $a, b \in \mathbb{R}$, $c \in \mathbb{C}$

Autovettori $0 = \det(H - \lambda \mathbb{1}) = (a - \lambda)(b - \lambda) - |c|^2 = \lambda^2 - (a+b)\lambda + ab - |c|^2$

$$E_{\pm} = \frac{a+b \pm \sqrt{(a+b)^2 - 4ab + 4|c|^2}}{2} = \frac{a+b}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4}[(a-b)^2 + 4|c|^2]} = \frac{a+b}{2} \pm \sqrt{\frac{(a-b)^2}{4} + |c|^2}$$

altro modo di procedere $\begin{pmatrix} a & c^* \\ c & b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{a+b}{2} & 0 \\ 0 & \frac{a-b}{2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{a-b}{2} & 0 \\ 0 & \frac{b-a}{2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \text{Re } c \\ \text{Re } c & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -i \text{Im } c \\ i \text{Im } c & 0 \end{pmatrix} =$

$$= \frac{a+b}{2} \mathbb{1} + \frac{a-b}{2} \sigma_z + (\text{Re } c) \sigma_x + (\text{Im } c) \sigma_y = \frac{a+b}{2} + \Delta \hat{n} \cdot \vec{\sigma}$$

dove $\Delta \hat{n} = (\text{Re } c, \text{Im } c, \frac{a-b}{2})$ quindi $\Delta^2 = \frac{(a-b)^2}{4} + |c|^2$

autovettori di $\left\{ \frac{a+b}{2} + \Delta \hat{n} \cdot \vec{\sigma} \right\} = \frac{a+b}{2} + \Delta \left\{ \text{autovettori di } \hat{n} \cdot \vec{\sigma} \right\}$ inoltre $(\hat{n} \cdot \vec{\sigma})^2 = \mathbb{1}$, $\text{tr}(\hat{n} \cdot \vec{\sigma}) = 0$

quindi $\left\{ \text{autovettori di } \hat{n} \cdot \vec{\sigma} \right\} = \pm \mathbb{1}$

Gli autovettori sono fastidiosi da calcolare, meglio volerli dopo aver fatto gli op. di rotazione. Usando

$\hat{n} = (\cos \alpha \sin \beta, \sin \alpha \sin \beta, \cos \beta) = \frac{1}{\Delta} (\text{Re } c, \text{Im } c, \frac{a-b}{2})$ con $\Delta^2 = \frac{(a-b)^2}{4} + |c|^2$ e si vedr\`a che

$$|E_+\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} \cos(\beta/2) \\ e^{i\alpha/2} \sin(\beta/2) \end{pmatrix}; \quad |E_-\rangle = \begin{pmatrix} -e^{-i\alpha/2} \sin(\beta/2) \\ e^{i\alpha/2} \cos(\beta/2) \end{pmatrix}$$

L'evoluzione temporale si scrive facilmente

$$e^{-iHt/\hbar} = e^{-i\frac{a+b}{2\hbar}t} e^{-i\frac{t\Delta}{\hbar}\hat{m}\cdot\vec{\sigma}} = e^{-i\frac{a+b}{2\hbar}t} \left(\cos\left(\frac{t\Delta}{\hbar}\right) - i\hat{m}\cdot\vec{\sigma} \sin\left(\frac{t\Delta}{\hbar}\right) \right)$$

come evolono i $\langle \sigma_i \rangle = \langle \psi(t) | \sigma_i | \psi(t) \rangle$?

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_i \rangle = \frac{d}{dt} \langle \psi(t=0) | e^{iHt/\hbar} \sigma_i e^{-iHt/\hbar} | \psi(t=0) \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | [H, \sigma_i] | \psi(t) \rangle$$

$$\text{inoltre } [H, \sigma_i] = \Delta m_j [\sigma_j, \sigma_i] = 2\Delta m_j i \epsilon_{jik} \sigma_k$$

$$\text{quindi } \frac{d}{dt} \langle \sigma_i \rangle = \frac{2\Delta}{\hbar} (\hat{m} \times \langle \vec{\sigma} \rangle)_i \text{ e infine } \frac{d}{dt} \langle \vec{\sigma} \rangle = \vec{\omega} \times \langle \vec{\sigma} \rangle \text{ con } \vec{\omega} = \frac{2\Delta}{\hbar} \hat{m} \text{ quindi } \langle \vec{\sigma} \rangle$$

precede attorno a $\hat{m}$ con frequenza $\vec{\omega}$.

• Se a $t=0$ si è nello stato $|1_z\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ (autostato di σ_z con autovalore ± 1), quale è la probabilità

di osservare $|1_z\rangle$ in una misura di σ_z al tempo t ?

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{a+b}{2\hbar}t} \left(\cos\frac{t\Delta}{\hbar} - i\hat{m}\cdot\vec{\sigma} \sin\frac{t\Delta}{\hbar} \right) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$P_{++} = |\langle 1_z | \psi(t) \rangle|^2 = \left| \cos\frac{t\Delta}{\hbar} - i\hat{m}\cdot\vec{\sigma} \sin\frac{t\Delta}{\hbar} \right|_{\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}}^2 = \left| \cos\frac{t\Delta}{\hbar} - i \cos\beta \sin\frac{t\Delta}{\hbar} \right|^2 =$$

$$= \cos^2\left(\frac{t\Delta}{\hbar}\right) + \cos^2\beta \sin^2\left(\frac{t\Delta}{\hbar}\right) = 1 - \sin^2\left(\frac{t\Delta}{\hbar}\right) + \cos^2\beta \sin^2\left(\frac{t\Delta}{\hbar}\right) = 1 - \sin^2\beta \sin^2\left(\frac{t\Delta}{\hbar}\right)$$

• In particolare si può avere $P_{++}=0$ solo se $\sin^2\beta=1$, cioè $\cos^2\beta=0$ cioè $\hat{m} \perp \hat{z}$.

Risonanza di spin

Consideriamo $H = \vec{\gamma} \cdot \vec{\sigma}$ con $\vec{\gamma} = (\gamma_1 \cos(\omega t), \gamma_1 \sin(\omega t), \gamma_0)$, quindi

$$H = \gamma_0 \sigma_z + \gamma_1 \{ \sigma_x \cos(\omega t) + \sigma_y \sin(\omega t) \}$$

corrispondente a un campo magnetico statico lungo $\hat{z}$ e un campo rotante $\perp \hat{z}$.

$$\text{Si ha } e^{-i\omega t \sigma_z/2} \sigma_x e^{i\omega t \sigma_z/2} = \sigma_x \cos(\omega t) + \sigma_y \sin(\omega t)$$

$$\text{dim 1 } \sigma_x e^{i\omega t \sigma_z/2} = \sigma_x \cos(\omega t/2) + \sigma_y \sin(\omega t/2) \text{ poiché } \sigma_x \sigma_z = -i\sigma_y$$

$$e^{-i\omega t \sigma_z/2} \sigma_x e^{i\omega t \sigma_z/2} = (\cos(\omega t/2) - i\sigma_z \sin(\omega t/2)) (\sigma_x \cos(\omega t/2) + \sigma_y \sin(\omega t/2)) =$$

$$= \sigma_x \cos^2(\omega t/2) + \sigma_y \sin(\omega t/2) \cos(\omega t/2) + \sigma_y \cos(\omega t/2) \sin(\omega t/2) - \sigma_x \sin^2(\omega t/2) =$$

$$= \sigma_x \cos(\omega t) + \sigma_y \sin(\omega t) \quad \square$$

$$\text{dim 2 } f(t) = e^{-i\omega t \sigma_z/2} \sigma_x e^{i\omega t \sigma_z/2}$$

$$f'(t) = e^{-i\omega t \sigma_z/2} \left(\frac{-i\omega}{2} \right) \underbrace{[\sigma_z, \sigma_x]}_{2i\sigma_y} e^{i\omega t \sigma_z/2} = \omega e^{-i\omega t \sigma_z/2} \sigma_y e^{i\omega t \sigma_z/2}$$

$$f''(t) = \omega e^{-i\omega t \sigma_z/2} \left(\frac{-i\omega}{2} \right) \underbrace{[\sigma_z, \sigma_y]}_{-2i\sigma_x} e^{i\omega t \sigma_z/2} = -\omega^2 e^{-i\omega t \sigma_z/2} \sigma_x e^{i\omega t \sigma_z/2} = -\omega^2 f(t)$$

$$f''(t) = -\omega^2 f(t) \Rightarrow f(t) = A \cos(\omega t) + B \sin(\omega t)$$

$$f(0) = \sigma_x, f'(0) = \omega \sigma_y \Rightarrow f(t) = \sigma_x \cos(\omega t) + \sigma_y \sin(\omega t) \quad \square$$

Quindi: $H = \gamma_0 \sigma_z + \gamma_1 (\sigma_x \cos(\omega t) + \sigma_y \sin(\omega t)) = \gamma_0 \sigma_z + \gamma_1 e^{-i\omega t \sigma_z/2} \sigma_x e^{i\omega t \sigma_z/2} =$
 $= e^{-i\omega t \sigma_z/2} (\gamma_0 \sigma_z + \gamma_1 \sigma_x) e^{i\omega t \sigma_z/2}$

$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H |\psi\rangle$ e introduciamo $|\varphi\rangle = e^{i\omega t \sigma_z/2} |\psi\rangle$, $|\psi\rangle = e^{-i\omega t \sigma_z/2} |\varphi\rangle$

$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (e^{-i\omega t \sigma_z/2} |\varphi\rangle) = e^{-i\omega t \sigma_z/2} (\gamma_0 \sigma_z + \gamma_1 \sigma_x) \underbrace{e^{i\omega t \sigma_z/2} |\varphi\rangle}_{|\varphi\rangle}$
 $\parallel$
 $i\hbar \left(-i\omega \frac{\sigma_z}{2} e^{-i\omega t \sigma_z/2} |\varphi\rangle + e^{-i\omega t \sigma_z/2} \frac{d}{dt} |\varphi\rangle \right)$

quindi: $\frac{\hbar\omega}{2} \sigma_z |\varphi\rangle + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\varphi\rangle = (\gamma_0 \sigma_z + \gamma_1 \sigma_x) |\varphi\rangle$ da cui

$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\varphi\rangle = \left[\left(\gamma_0 - \frac{\hbar\omega}{2} \right) \sigma_z + \gamma_1 \sigma_x \right] |\varphi\rangle$

Poiché $|\varphi_{t=0}\rangle = |\psi_{t=0}\rangle$ si ha

$|\varphi\rangle = \exp\left\{-i \frac{t}{\hbar} \left[\left(\gamma_0 - \frac{\hbar\omega}{2} \right) \sigma_z + \gamma_1 \sigma_x \right] \right\} |\varphi_{t=0}\rangle \Rightarrow |\psi\rangle = e^{-i\omega t \sigma_z/2} \exp\left\{-i \frac{t}{\hbar} \left[\left(\gamma_0 - \frac{\hbar\omega}{2} \right) \sigma_z + \gamma_1 \sigma_x \right] \right\} |\varphi_{t=0}\rangle$

• se $|\varphi_{t=0}\rangle = |1_z\rangle$ quale è la probabilità di osservare $|-1_z\rangle$ come autostato di σ_z a tempo t ?

$P_{-+} = \left| \langle -1_z | e^{-i\omega t \sigma_z/2} \exp\left\{-i \frac{t}{\hbar} \left[\left(\gamma_0 - \frac{\hbar\omega}{2} \right) \sigma_z + \gamma_1 \sigma_x \right] \right\} | 1_z \rangle \right|^2 =$ solo σ_x contribuisce
 $= \left| \frac{-i\gamma_1}{\Gamma} \sin\left(\frac{\Gamma t}{\hbar}\right) \right|^2$ dove $\Gamma = \sqrt{\left(\gamma_0 - \frac{\hbar\omega}{2}\right)^2 + \gamma_1^2}$

Oscillazioni di Rabi: in risonanza ($\omega = \frac{2\gamma_0}{\hbar}$) esistono tempi per i quali $P_{-+} = 1$ (quindi $P_{++} = 0$)

indipendentemente da quanto è piccolo γ_1 , contrariamente al caso statico visto in precedenza.

Formula utile $e^{-B} A e^B = A + [A, B] + \frac{1}{2} [[A, B], B] + \frac{1}{3!} [[[A, B], B], B] + \dots$

dim: $F(t) = e^{-tB} A e^{tB}$; $F'(t) = -B e^{-tB} A e^{tB} + e^{-tB} A e^{tB} B = [F(t), B]$

$G(t) = A + t[A, B] + \frac{1}{2} t^2 [[A, B], B] + \frac{1}{3!} t^3 [[[A, B], B], B] + \dots$

$G'(t) = [A, B] + t[[A, B], B] + \frac{1}{2} t^2 [[[A, B], B], B] + \dots = [G(t), B]$

Quindi sia $F(t)$ che $G(t)$ soddisfanno $H'(t) = [H(t), B]$ con $H(0) = A$, quindi $F(t) = G(t)$ in particolare $F(1) = G(1)$ $\square$

$\hat{G} = \hat{\vec{p}} \cdot \vec{V} t - m \hat{\vec{q}} \cdot \vec{V}$ importante: $\vec{V}$ è un parametro costante $\hat{K}_V = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{G}}$

.) $[\hat{q}_i, \hat{G}] = [\hat{q}_i, \hat{p}_j] V_j t = i\hbar V_i t$ quindi $[[\hat{q}_i, \hat{G}], \hat{G}] = 0$

$\hat{K}_V \hat{q}_i \hat{K}_V^\dagger = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{G}} \hat{q}_i e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{G}} = \hat{q}_i - \frac{i}{\hbar} [\hat{q}_i, \hat{G}] = \hat{q}_i + V_i t$ quindi se $|\vec{q}\rangle$ è un autostato di $\hat{q}$ si ha

$\hat{K}_V \hat{q}_i |\vec{q}\rangle = \hat{K}_V q_i |\vec{q}\rangle = q_i \hat{K}_V |\vec{q}\rangle$

.) $\hat{K}_V \hat{q}_i \hat{K}_V^\dagger \hat{K}_V |\vec{q}\rangle = (\hat{q}_i + V_i t) \hat{K}_V |\vec{q}\rangle$ quindi $\hat{q}_i \hat{K}_V |\vec{q}\rangle = (q_i - V_i t) \hat{K}_V |\vec{q}\rangle$

cioè $\hat{K}_V |\vec{q}\rangle$ è autostato di $\hat{q}$ con autovalore $\vec{q} - \vec{V}t$.

.) $[\hat{p}_i, \hat{G}] = -m[\hat{p}_i, \hat{q}_j] V_j = i\hbar m V_i$ quindi $[[\hat{p}_i, \hat{G}], \hat{G}] = 0$ e dunque

$\hat{K}_V \hat{p}_i \hat{K}_V^\dagger = \hat{p}_i - \frac{i}{\hbar} [\hat{p}_i, \hat{G}] = \hat{p}_i + m V_i$ Se $|\vec{p}\rangle$ è un autostato di $\hat{p}$ si ha allora

$\hat{K}_V \hat{p}_i |\vec{p}\rangle = \hat{K}_V p_i |\vec{p}\rangle = p_i \hat{K}_V |\vec{p}\rangle$

.) $\hat{K}_V \hat{p}_i \hat{K}_V^\dagger \hat{K}_V |\vec{p}\rangle = (\hat{p}_i + m V_i) \hat{K}_V |\vec{p}\rangle$ cioè $\hat{K}_V |\vec{p}\rangle$ è autostato di $\hat{p}$ con autovalore $\vec{p} - m\vec{V}$

$\hat{K}_V$ è quindi il generatore di una trasf. di Galileo con velocità $\vec{V}$

Forma esplicita di $\hat{K}_V$ sulle funzioni d'onda

Formula utile: se $[A, B] = c\mathbb{1}$ con $c \in \mathbb{C}$ allora $e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A, B]}$

(caso particolare delle formule di Campbell-Baker-Hausdorff e di Zassenhaus)

dim: $\underbrace{e^{t(A+B)}}_{f(t)} = \underbrace{e^{tA} e^{tB}}_{g(t)} e^{\frac{t^2}{2} C}$ (questa è la definiz. dell'operatore C)

Chiaro che $f(0) = g(0)$ e inoltre abbiamo $f'(t) = (A+B) e^{t(A+B)} = (A+B) f(t)$

$$g'(t) = A e^{tA} e^{tB} e^{t^2 C} + e^{tA} B e^{tB} e^{t^2 C} + e^{tA} e^{tB} 2tC e^{t^2 C} =$$

$$= A g(t) + \underbrace{e^{tA} B e^{-tA}}_{= B + [B, -tA] = B + tC} g(t) + e^{tA} e^{tB} 2tC e^{-tB} e^{-tA} g(t)$$

$$= B + [B, -tA] = B + tC$$

Se usiamo $C = -\frac{1}{2}C$ si trova $g'(t) = (A+B)g(t)$ e quindi $f(t) = g(t)$ □

Usando questa formula in $\hat{K}_V = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{G}}$ con $\hat{G} = \hat{\vec{p}} \cdot \vec{V} t - m \hat{\vec{q}} \cdot \vec{V}$ abbiamo

$$[\frac{i}{\hbar} \hat{\vec{p}} \cdot \vec{V} t, -\frac{i}{\hbar} m \hat{\vec{q}} \cdot \vec{V}] = -\frac{1}{\hbar^2} m t V_i V_j [\hat{q}_i, \hat{p}_j] = -\frac{i}{\hbar} m V^2 t$$

quindi usando $A = -\frac{i}{\hbar} m \hat{\vec{q}} \cdot \vec{V}$, $B = \frac{i}{\hbar} \hat{\vec{p}} \cdot \vec{V} t$ si ottiene

$$\hat{K}_V = e^{-\frac{i}{\hbar} m \hat{\vec{q}} \cdot \vec{V}} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{\vec{p}} \cdot \vec{V} t} e^{-\frac{i}{2\hbar} V^2 m t}$$

Si ripon. di Schrodinger $e^{\frac{i}{\hbar} \hat{\vec{p}} \cdot \vec{V} t} \psi(\vec{x}, t) \stackrel{\hat{\vec{p}} = -i\hbar \vec{\nabla}}{\downarrow} e^{t \vec{V} \cdot \vec{\nabla}} \psi(\vec{x}, t) \stackrel{\text{serie di Taylor}}{=} \psi(\vec{x} + \vec{V} t, t)$

quindi $\hat{K}_V \psi(\vec{x}, t) = \exp(-\frac{i}{2\hbar} V^2 m t - \frac{i}{\hbar} m \vec{V} \cdot \vec{x}) \psi(\vec{x} + \vec{V} t, t)$

Invarianza sotto trasformazioni di Galileo

Supponiamo che $|\psi(t)\rangle$ soddisfi $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$ e vediamo in che condizioni $\hat{K}_V |\psi\rangle$ soddisfa ancora la solita equazione.

$$\hat{K}_V |\psi\rangle \simeq |\psi\rangle + \frac{i}{\hbar} \hat{G} |\psi\rangle, \text{ dunque } i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{K}_V |\psi\rangle \simeq i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (|\psi\rangle + \frac{i}{\hbar} \hat{G} |\psi\rangle) =$$

$$= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle - (\frac{\partial \hat{G}}{\partial t}) |\psi\rangle - \hat{G} \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle - (\frac{\partial \hat{G}}{\partial t}) |\psi\rangle + \frac{i}{\hbar} \hat{G} \hat{H} |\psi\rangle$$

$$\uparrow \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} |\psi\rangle$$

e vogliamo che questa espressione sia uguale a $\hat{H} \hat{K}_V |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle + \frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{G} |\psi\rangle$ quindi

$$\hat{H} |\psi\rangle - \frac{\partial \hat{G}}{\partial t} |\psi\rangle + \frac{i}{\hbar} \hat{G} \hat{H} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle + \frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{G} |\psi\rangle \quad \text{quindi} \quad i\hbar \frac{\partial \hat{G}}{\partial t} + [\hat{G}, \hat{H}] = 0$$

(cioè $\frac{d}{dt} \hat{G}$ in rapp. di Heisenberg)

Usando $\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}$, $\hat{G} = \hat{\vec{p}} \cdot \vec{V} t - m \hat{\vec{q}} \cdot \vec{V}$ e $[\hat{q}, f(\hat{\vec{p}})] = i\hbar \frac{\partial f(\hat{\vec{p}})}{\partial \vec{p}}$ abbiamo

$$i\hbar \frac{\partial \hat{G}}{\partial t} + [\hat{G}, \hat{H}] = i\hbar \hat{\vec{p}} \cdot \vec{V} - m \vec{V} \cdot [\hat{\vec{q}}, \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}] = i\hbar \hat{\vec{p}} \cdot \vec{V} - m \vec{V} \cdot \frac{\hat{\vec{p}}}{m} i\hbar = 0$$

In generale se supponiamo $\hat{H}$ invariante per traslazioni $[\hat{H}, \hat{\vec{p}}] = 0$ quindi $\hat{H} = f(\hat{\vec{p}})$

e l'invarianza di Galileo impone

$$0 = i\hbar \frac{\partial \hat{G}}{\partial t} + [\hat{G}, \hat{H}] = i\hbar \hat{\vec{p}} \cdot \vec{V} - m \vec{V} \cdot [\hat{\vec{q}}, f(\hat{\vec{p}})] = i\hbar \hat{\vec{p}} \cdot \vec{V} - i\hbar m \vec{V} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} \quad \text{quindi} \quad \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = \frac{\vec{p}}{m}$$

quindi $f(\hat{\vec{p}}) = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}$

Per un sistema di particelle, usando $\hat{G} = \hat{\vec{P}}_{\text{Tot}} \cdot \vec{V} t - M \hat{\vec{Q}}_{\text{CM}} \cdot \vec{V}$ con $M = \sum m_\alpha$

$\hat{\vec{P}}_{\text{Tot}} = \sum \hat{\vec{p}}_\alpha$ e $M \hat{\vec{Q}}_{\text{CM}} = \sum m_\alpha \hat{\vec{q}}_\alpha$ si ottiene analogamente $\hat{H} = \frac{\hat{\vec{P}}_{\text{Tot}}^2}{2M} + \hat{H}_{\text{rel}}$.

Oscillatore 1d in rappr. di Schrodinger

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

$$l = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = \text{scala tipica di lunghezza}$$

Funzioni d'onda del fondamentale e del primo eccitato si possono scrivere

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{l}} \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-x^2/2l^2} ; \quad \psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{l}} \frac{\sqrt{2}}{\pi^{1/4}} \frac{x}{l} e^{-x^2/2l^2}$$

Valori medi di posizione e impulso

Su ogni autostato $|n\rangle$ si ha $\langle n|x|n\rangle = 0$ in quanto $|n\rangle$ è autostato dell'operatore parità (conseguenza di $[\hat{P}, \hat{H}] = 0$ e th. di non degener. per sistemi 1d), quindi

$\hat{P}|n\rangle = \pm |n\rangle$ e di conseguenza

$$\langle n|x|n\rangle = \langle n|\hat{P}^\dagger \hat{x} \hat{P}|n\rangle = \langle \hat{P}n|\hat{x}|\hat{P}n\rangle = \langle n|\hat{x}|\hat{P}n\rangle = -\langle n|x|n\rangle$$

quindi $\langle n|x|n\rangle = 0$. $\exists$ m. modo identico $\langle n|p|n\rangle = 0$

Usando esplicitamente le funzioni d'onda si avrebbe

$$\langle n|x|n\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi_n(x)|^2 dx = 0 \quad \text{usando la parità di } |\psi_n|^2. \quad \text{Per l'impulso si ha}$$

$$\langle n|p|n\rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) \psi_n'(x) dx \quad \text{e si può procedere in diversi modi.}$$

1) $\psi \in \mathbb{R}$ (poiché $V \in \mathbb{R}$ e non deg.) quindi $\langle n|p|n\rangle = -i\hbar \int \psi_n(x) \psi_n'(x) dx$ quindi

$\langle n|p|n\rangle$ è immaginario puro, mentre $\langle n|p|n\rangle$ deve essere reale perché

p è autoaggiunto, quindi $\langle n|p|n\rangle = 0$

2) $\psi \in \mathbb{R}$ (poiché $V \in \mathbb{R}$ e non deg.) quindi $\langle n|p|n\rangle = -i\hbar \int \psi_n(x) \psi_n'(x) dx =$

$$= -i\hbar \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d}{dx} \psi^2(x) dx = 0 \quad \text{poiché } \psi \in \mathcal{D}(\mathbb{R}) \quad (\text{nota: } \psi \in L^2(\mathbb{R}) \text{ non basterebbe})$$

3) ψ_n è autostato della parità, quindi $\langle n|p|n\rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) \psi_n'(x) dx$ e $\psi_n^* \psi_n'$ è

una funzione dispari, in quanto $\begin{cases} \psi_n \text{ pari} \Rightarrow \psi_n' \text{ dispari} \\ \psi_n \text{ dispari} \Rightarrow \psi_n' \text{ pari} \end{cases}$ quindi $\langle n|p|n\rangle = 0$

Valori medi sul fondamentale di x^2 e p^2

$$\langle 0|x^2|0\rangle = \frac{1}{l\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-x^2/l^2} dx \quad \text{quindi possiamo usare}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = -\frac{d}{da} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = -\frac{d}{da} \sqrt{\frac{\pi}{a}} = \frac{1}{2} \sqrt{\pi} a^{-3/2} \quad \text{ottenendo}$$

$$\langle 0|x^2|0\rangle = \frac{1}{l\sqrt{\pi}} \frac{1}{2} \sqrt{\pi} l^3 = \frac{l^2}{2}$$

Calcoliamo ora $\langle 0 | p^2 | 0 \rangle$: usando $p = p^\dagger$ abbiamo $p^2 = p^\dagger p$ e quindi $\langle 0 | p^2 | 0 \rangle = \|p|0\rangle\|^2$
 cioè $\langle 0 | p^2 | 0 \rangle = \hbar^2 \int \psi_0'^*(x) \psi_0'(x) dx$, che si sarebbe anche potuta ottenere integrando per
 parti: $\langle 0 | p^2 | 0 \rangle = -\hbar^2 \int \psi_0''^*(x) \psi_0''(x) dx$

Da $\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{e}} \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-x^2/2e^2}$ otteniamo $\psi_0'(x) = -\frac{x}{e^2} \frac{1}{\sqrt{e}} \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-x^2/2e^2}$ da cui

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0'^*(x) \psi_0'(x) dx = \frac{1}{e^5} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-x^2/e^2} dx = \frac{1}{e^4} \langle 0 | x^2 | 0 \rangle = \frac{1}{e^4} \frac{e^2}{2} = \frac{1}{2e^2}$$
 di conseguenza $\langle 0 | p^2 | 0 \rangle = \frac{\hbar^2}{2e^2}$

$$\Delta_x^2 = \langle \psi | x^2 | \psi \rangle - \langle \psi | x | \psi \rangle^2, \quad \Delta_p^2 = \langle \psi | p^2 | \psi \rangle - \langle \psi | p | \psi \rangle^2, \quad \text{relaz. di indeterminazione.} \quad \Delta_x \Delta_p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Per il fondamentale $\Delta_x = \frac{e}{\sqrt{2}}$, $\Delta_p = \frac{\hbar}{e\sqrt{2}}$ quindi $\Delta_x \Delta_p = \frac{\hbar}{2}$ e la relazione di indeterminazione è saturata

Calcolo di $\langle \psi_m | x^2 | \psi_m \rangle$ e $\langle \psi_m | p^2 | \psi_m \rangle$ richiede in rappr. di Schr. l'uso di alcune proprietà dei polinomi di Hermite, meglio usare op. di salita/discesa.

Oscillatore 1d in rappresentazione dell'impulso

Modo "bohros" di procedere: $\psi_m(x) = \langle x | m \rangle$ quindi otteniamo

$$\tilde{\psi}_m(p) = \langle p | m \rangle = \sum_x \langle p | x \rangle \langle x | m \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ipx/\hbar} \psi_m(x) dx \quad \text{cioè } \tilde{\psi}_m(p) \text{ è la T.F. di } \psi_m(x)$$

$$\langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(ikx) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i(px/\hbar)}$$

Ad esempio $\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{e}} \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-x^2/2e^2}$ quindi (usando $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2-bx} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{b^2/4a}$)

$$\tilde{\psi}_0(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{e}} \frac{1}{\pi^{1/4}} \int e^{-ipx/\hbar} e^{-x^2/2e^2} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{e}} \frac{1}{\pi^{1/4}} \sqrt{\pi} \sqrt{2e^2} e^{-\frac{p^2}{\hbar^2} \frac{e^2}{2}} = \sqrt{\frac{e}{\hbar}} \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-p^2/2(\hbar/e)^2}$$

Modo intelligente di procedere: partiamo dall'equazione $\frac{1}{2m} \hat{p}^2 |\psi\rangle + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2 |\psi\rangle = E |\psi\rangle$, quindi

$$\langle p | \hat{p}^2 | \psi \rangle = p^2 \langle p | \psi \rangle$$

$$\langle p | \hat{x}^2 | \psi \rangle = \sum_{x'} \langle p | x' \rangle \langle x' | \hat{x}^2 | \psi \rangle = \sum_{x'} (x')^2 \langle p | x' \rangle \langle x' | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{-ipx/\hbar} x^2 \psi(x) dx =$$

$$= -\hbar^2 \frac{d^2}{dp^2} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{-ipx/\hbar} \psi(x) dx \right] = -\hbar^2 \frac{d^2}{dp^2} \langle p | \psi \rangle \quad \left[\text{questo se non si ricorda che} \right. \\ \left. \hat{p} \tilde{\psi}_m(p) = p \tilde{\psi}_m(p), \quad \hat{x} \tilde{\psi}_m(p) = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \tilde{\psi}_m(p) \right]$$

quindi $\frac{p^2}{2m} \tilde{\psi}(p) - \frac{1}{2} m \omega^2 \hbar^2 \frac{d^2}{dp^2} \tilde{\psi}(p) = E \tilde{\psi}(p)$ che è ancora della forma che si ha in

rapp. di Schrödinger, solo che $\frac{1}{2} m_p \omega_p^2 = \frac{1}{2m}$ e $-\frac{\hbar^2}{2m_p} = -\frac{1}{2} m \omega^2 \hbar^2$ quindi abbiamo

$$\text{quindi } m_p = \frac{1}{m \omega^2}, \quad \omega_p = \frac{1}{\sqrt{m m_p}} = \omega \quad \text{e infine } e_p = \sqrt{\frac{\hbar}{m_p \omega_p}} = \sqrt{\frac{\hbar m \omega^2}{\omega}} = \sqrt{\hbar m \omega} = \frac{\hbar}{e}$$

Viste che le funzioni d'onda $\psi_n(x)$ dipendono dai parametri dell'oscillatore armonico solo tramite ℓ , si vede che $\tilde{\psi}_n(p)$ si ottiene da $\psi_n(x)$ semplicemente con la sostituz. $\ell \rightarrow \frac{\hbar}{\ell}$ come si vede dall'espressione esplicita di $\tilde{\psi}_0(x)$ calcolata prima

In particolare si è visto prima che $\langle \psi_0 | x^2 | \psi_0 \rangle = \frac{\ell^2}{2}$ e $\langle \psi_0 | p^2 | \psi_0 \rangle = \frac{\hbar^2}{2\ell^2}$, che scrivendo $\langle \psi_0 | p^2 | \psi_0 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} p^2 |\tilde{\psi}_0(p)|^2 dp = \frac{\ell_p^2}{2}$ si vede essere consistente con la regola $\ell_p = \frac{\hbar}{\ell}$.

Oscillatore 1d con $a, a^\dagger$

$$\begin{cases} a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{\ell} + i \frac{\ell}{\hbar} p \right) \\ a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{\ell} - i \frac{\ell}{\hbar} p \right) \end{cases} \quad \begin{cases} x = \frac{\ell}{\sqrt{2}} (a + a^\dagger) \\ p = \frac{i\hbar}{\ell\sqrt{2}} (a^\dagger - a) \end{cases} \quad \text{e da } [x, p] = i\hbar \text{ segue } [a, a^\dagger] = 1$$

$$\psi_n(x) = \langle x | n \rangle \quad \begin{cases} a | n \rangle = \sqrt{n} | n-1 \rangle \\ a^\dagger | n \rangle = \sqrt{n+1} | n+1 \rangle \end{cases} \quad \text{regola mnemonica } \sqrt{\text{più grande}}$$

Valori medi di posizione e impulso

$$\langle n | x | n \rangle = \frac{\ell}{\sqrt{2}} \langle n | (a + a^\dagger) | n \rangle = \frac{\ell}{\sqrt{2}} \langle n | (\sqrt{n} | n-1 \rangle + \sqrt{n+1} | n+1 \rangle) = 0 \quad \text{poiché } \langle n | n \pm 1 \rangle = 0$$

$$\langle n | p | n \rangle = \frac{i\hbar}{\ell\sqrt{2}} \langle n | (a^\dagger - a) | n \rangle = \frac{i\hbar}{\ell\sqrt{2}} \langle n | (\sqrt{n+1} | n+1 \rangle - \sqrt{n} | n-1 \rangle) = 0 \quad \text{poiché } \langle n | n \pm 1 \rangle = 0$$

Valori medi di x^2 e p^2

$$x^2 = \frac{\ell^2}{2} (a + a^\dagger)^2 = \frac{\ell^2}{2} (a^2 + a a^\dagger + a^\dagger a + a^\dagger a^\dagger) \quad \text{quindi}$$

$$\begin{aligned} x^2 | n \rangle &= \frac{\ell^2}{2} (a^2 + a a^\dagger + a^\dagger a + a^\dagger a^\dagger) | n \rangle = \frac{\ell^2}{2} (a \sqrt{n} | n-1 \rangle + a \sqrt{n+1} | n+1 \rangle + a^\dagger \sqrt{n} | n-1 \rangle + a^\dagger \sqrt{n+1} | n+1 \rangle) = \\ &= \frac{\ell^2}{2} (\sqrt{n} \sqrt{n-1} | n-2 \rangle + (n+1) | n \rangle + n | n \rangle + \sqrt{n+1} \sqrt{n+2} | n+2 \rangle) = \frac{\ell^2}{2} (2n+1) | n \rangle + \text{" } \perp | n \rangle \end{aligned}$$

$$\text{quindi } \langle n | x^2 | n \rangle = \frac{\ell^2}{2} (2n+1) \quad (\text{consistente con } \langle 0 | x^2 | 0 \rangle = \frac{\ell^2}{2} \text{ calcolato prima})$$

$$\text{Modo alternativo: } \langle n | x^2 | n \rangle = \| x | n \rangle \|^2 \quad \text{inoltre}$$

$$x | n \rangle = \frac{\ell}{\sqrt{2}} (a + a^\dagger) | n \rangle = \frac{\ell}{\sqrt{2}} (\sqrt{n} | n-1 \rangle + \sqrt{n+1} | n+1 \rangle) \quad \text{quindi } \| x | n \rangle \|^2 = \frac{\ell^2}{2} (n + n+1) = \frac{\ell^2}{2} (2n+1)$$

$$\text{Analogamente } p^2 = -\frac{\hbar^2}{2\ell^2} (a^\dagger - a)^2 = -\frac{\hbar^2}{2\ell^2} (a^\dagger a^\dagger - \underbrace{a^\dagger a + a a^\dagger}_{\text{unici due che contribuiscono a } \langle n | p^2 | n \rangle} + a^2)$$

unici due che contribuiscono a $\langle n | p^2 | n \rangle$

$$\text{e quindi } \langle n | p^2 | n \rangle = \frac{\hbar^2}{2\ell^2} (\langle n | a^\dagger a | n \rangle + \langle n | a a^\dagger | n \rangle) = \frac{\hbar^2}{2\ell^2} (n + n+1) = \frac{\hbar^2}{2\ell^2} (2n+1).$$

Per il livello n -esimo dell'oscillatore armonico abbiamo quindi:

$$\Delta x \Delta p = \frac{\ell}{\sqrt{2}} \sqrt{2n+1} \frac{\hbar}{\sqrt{2}\ell} \sqrt{2n+1} = \frac{\hbar}{2} (2n+1) \geq \frac{\hbar}{2} \quad \text{e la relazione di indeterminazione}$$

è saturata solo per $n=0$.

Altri esempi

•) Calcoliamo $\langle 0 | x^m | m \rangle$: usiamo $x = \frac{\ell}{\sqrt{2}} (a + a^\dagger)$ si capisce subito che l'unico contributo non nullo è quello in cui si applica m -volte "a" quindi

$$\langle 0 | x^m | m \rangle = \left(\frac{\ell}{\sqrt{2}} \right)^m \langle 0 | a^m | m \rangle = \left(\frac{\ell}{\sqrt{2}} \right)^m \sqrt{m!}$$

•) Calcoliamo $\langle 0 | x^4 | 0 \rangle$: $\langle 0 | x^4 | 0 \rangle = \| x^2 | 0 \rangle \|^2$ inoltre

$$x^2 | 0 \rangle = \frac{\ell^2}{2} (a + a^\dagger)^2 | 0 \rangle = \frac{\ell^2}{2} (a + a^\dagger) | 1 \rangle = \frac{\ell^2}{2} (| 0 \rangle + \sqrt{2} | 2 \rangle) \quad \text{quindi} \quad \langle 0 | x^4 | 0 \rangle = \frac{\ell^4}{4} (1 + 2) = \frac{3}{4} \ell^4$$

Oscillatore armonico conico in campo elettrico esterno

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 - e E x \quad (\text{nel seguito supponiamo } e > 0 \text{ ma } e \text{ in gran parte irrilevante})$$

eq. di Schrodinger: $-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + \left(\frac{1}{2} m \omega^2 x^2 - e E x \right) \psi = E \psi$

$$\frac{1}{2} m \omega^2 (x-a)^2 - b = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 - m \omega^2 a x + \frac{1}{2} m \omega^2 a^2 - b$$

quindi $e E = m \omega^2 a$ e $\frac{1}{2} m \omega^2 a^2 - b = 0$: $a = \frac{e E}{m \omega^2}$, $b = \frac{1}{2} \frac{e^2 E^2}{m \omega^2}$

dunque $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{1}{2} m \omega^2 (x-a)^2 \psi(x) - b \psi(x) = E \psi(x)$

Definendo $y = x - a$; $\frac{dy}{dx} = 1$; $\psi(x) = \varphi(y)$ otteniamo $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} \varphi(y) + \frac{1}{2} m \omega^2 y^2 \varphi(y) = \tilde{E} \varphi(y)$

dove $\tilde{E} = E + b$. Questa è ancora l'equazione di un oscillatore armonico, quindi

$\tilde{E} = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega$ e $\varphi_n(y)$ sono della forma (pol. di Hermite) $\cdot e^{-y^2/2\ell^2}$

quindi

$E = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega - b = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega - \frac{1}{2} \frac{e^2 E^2}{m \omega^2}$ autostati

$\psi_n(x) = \varphi_n(x-a) = \varphi_n(x - \frac{e E}{m \omega^2})$ autofunzioni

Ad es. per il fondamentale si ha $\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\ell}} \frac{1}{\pi^{1/4}} \exp \left[- (x - \frac{e E}{m \omega^2})^2 / 2 \ell^2 \right]$

Vari contributi energetici

Il valore medio del dipolo $\hat{d} = e \hat{x}$ sullo stato n-esimo è

$\langle \hat{d} \rangle_E = e \langle x \rangle_E = e \int_{-\infty}^{+\infty} x |\varphi_n(y)|^2 dx = e \int_{-\infty}^{+\infty} (y + \frac{e E}{m \omega^2}) |\varphi_n(y)|^2 dy = \frac{e^2 E}{m \omega}$
dispari, non contribuisce

Supponiamo ora che il campo E sia acceso molto lentamente ($|\dot{E}/E| \ll 1/\omega$), in modo da passare con continuità da $\varphi_n(x)$ a $\varphi_n(y)$ con $y = x - \frac{e E}{m \omega^2}$ (approx. adiabatica, si vedrà meglio nel secondo semestre) e vediamo come cambiano i vari contributi all'energia totale del sistema.

Cambiamento dell'energia cinetica

$\frac{1}{2m} \langle p^2 \rangle_E - \frac{1}{2m} \langle p^2 \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n^*(y) \frac{d^2}{dx^2} \varphi_n(x) dx - \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n(x) \frac{d^2}{dx^2} \varphi_n(x) dx \right) = 0$

Termine di dipolo: $-E \langle d \rangle_E = -\frac{e^2 E^2}{m \omega^2}$ (calcolato prima)

Contributo elastico: $\langle \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \rangle_E - \langle \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \rangle = \frac{1}{2} m \omega^2 \left(\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\varphi_n(y)|^2 dx - \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\varphi_n(x)|^2 dx \right) =$

$= \frac{1}{2} m \omega^2 \left(\int_{-\infty}^{+\infty} y^2 |\varphi_n(y)|^2 dy + \frac{2eE}{m \omega^2} \int_{-\infty}^{+\infty} y |\varphi_n(y)|^2 dy + \frac{e^2 E^2}{m^2 \omega^4} \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi_n(y)|^2 dy - \int_{-\infty}^{+\infty} y^2 |\varphi_n(y)|^2 dy \right) =$
= 0 per parità

$= \frac{1}{2} m \omega^2 \frac{e^2 E^2}{m^2 \omega^4} = \frac{1}{2} \frac{e^2 E^2}{m \omega^2}$

$\mathcal{H}_m$ totale $\Delta \langle U \rangle = \frac{1}{2} \frac{e^2 E^2}{m \omega^2} - \frac{e^2 E^2}{m \omega^2} = -\frac{1}{2} \frac{e^2 E^2}{m \omega^2}$, che è il termine aggiuntivo presente
in $E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega - \frac{1}{2} \frac{e^2 E^2}{m \omega^2}$

NOTA: gli autostati $\psi_n(x - \frac{eE}{m\omega^2})$ si ottengono da $\psi_n(x)$ usando l'operatore di traslazione:

$$e^{i\lambda p/\hbar} \psi(x) = e^{\lambda \nabla} \psi(x) = \psi(x + \lambda)$$

$\uparrow$ $p = -i\hbar \nabla$ $\uparrow$ Taylor

quindi usando $\lambda = -\frac{eE}{m\omega^2}$ si può scrivere $\psi_n(x - \frac{eE}{m\omega^2})$ nella forma

$$\psi_n(x - \frac{eE}{m\omega^2}) = \exp\left(-i \frac{eE}{m\omega^2} \frac{p}{\hbar}\right) \psi_n(x) = \exp\left(\frac{eE}{m\omega^2 l \sqrt{2}} (a^\dagger - a)\right) |n\rangle$$

$\uparrow$ $p = \frac{i\hbar}{l\sqrt{2}} (a^\dagger - a)$

che si può scrivere
tramite stati coerenti

Stati coerenti

Autovettori di $a, a^\dagger$

Consideriamo dapprima autostati di a : cerchiamo $|\psi\rangle$ t.c. $a|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$

$$\begin{cases} |\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle + \dots + c_{m-1}|m-1\rangle + c_m|m\rangle + \dots \\ a|\psi\rangle = c_1|0\rangle + c_2\sqrt{2}|1\rangle + \dots + c_m\sqrt{m}|m-1\rangle + \dots \end{cases} \quad \text{quindi } a|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \text{ diventa}$$

$$c_1 = \lambda c_0; \quad \sqrt{2}c_2 = \lambda c_1; \quad \dots \quad \sqrt{m}c_m = \lambda c_{m-1} \quad \text{e per induzione si trova } c_m = \frac{1}{\sqrt{m!}} \lambda^m c_0$$

Imponendo la normalizzazione $1 = \sum_m |c_m|^2 = |c_0|^2 \sum_m \frac{1}{m!} (|\lambda|^2)^m = |c_0|^2 e^{|\lambda|^2}$ quindi

$$c_0 = e^{-|\lambda|^2/2} \quad \text{quindi troviamo infine}$$

$$|\psi\rangle = e^{-|\lambda|^2/2} \sum_m \frac{\lambda^m}{\sqrt{m!}} |m\rangle$$

Questa espressione può essere scritta utilizzando il fatto che $a^\dagger|m-1\rangle = \sqrt{m}|m\rangle$ quindi

$$|m\rangle = \frac{1}{\sqrt{m}} a^\dagger|m-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{m(m-1)}} (a^\dagger)^2|m-2\rangle = \dots = \frac{1}{\sqrt{m!}} (a^\dagger)^m|0\rangle$$

$$\text{dunque abbiamo } |\psi\rangle = e^{-|\lambda|^2/2} \sum_m \frac{\lambda^m}{\sqrt{m!}} |m\rangle = e^{-|\lambda|^2/2} \sum_m \frac{\lambda^m}{m!} (a^\dagger)^m|0\rangle = e^{-|\lambda|^2/2} e^{\lambda a^\dagger}|0\rangle$$

NOTA: $|\psi\rangle$ tale che $a|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$ si chiama "stato coerente" e si indica con $|\lambda\rangle$

La soluzione di $a|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$ può essere ottenuta anche in rapp. delle coordinate:

ricordando che $a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{\ell} + i \frac{\ell}{\hbar} p \right)$, usando $p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ abbiamo

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{\ell} + \ell \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x) = \lambda \psi(x) \quad \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) = \frac{1}{\ell} (\sqrt{2}\lambda - \frac{x}{\ell}) \psi(x) \quad \text{da cui otteniamo}$$

$$\psi(x) = A \exp\left(-\frac{1}{2}(\sqrt{2}\lambda - x/\ell)^2\right) = A \exp\left(-\frac{1}{2\ell^2}(\sqrt{2}\lambda\ell - x)^2\right)$$

Consideriamo ora gli autostati di $a^\dagger$: da $a^\dagger|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$ abbiamo

$$\begin{cases} |\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle + \dots + c_m|m\rangle + \dots \\ a^\dagger|\psi\rangle = c_0|1\rangle + c_1\sqrt{2}|2\rangle + \dots + c_{m-1}\sqrt{m}|m\rangle + \dots \end{cases} \quad \text{quindi } a^\dagger|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \text{ diventa}$$

$$\text{da cui si ottiene } \lambda c_0 = 0; \quad c_0 = \lambda c_1; \quad c_1\sqrt{2} = \lambda c_2; \quad \dots; \quad c_{m-1}\sqrt{m} = \lambda c_m$$

quindi se $\lambda \neq 0$ abbiamo $c_0 = 0, c_1 = 0, \dots, c_m = 0$, quindi $|\psi\rangle = 0$

Se invece $\lambda = 0$ abbiamo c_0 arbitrario, $c_0 = 0, c_1 = 0, \dots$ quindi di nuovo $|\psi\rangle = 0$

L'eq. $a^\dagger|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$ non ha quindi soluzioni.

Valori di aspettazione su stati coerenti

Sia $|\alpha\rangle$ (con $\alpha \in \mathbb{C}$) lo stato coerente definito da $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$ con $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$.

Abbiamo allora

$$\langle\alpha|\hat{x}|\alpha\rangle = \frac{\ell}{\sqrt{2}} \langle\alpha|(a^\dagger + a)|\alpha\rangle = \frac{\ell}{\sqrt{2}} (\alpha^* + \alpha) = \sqrt{2} \ell \operatorname{Re} \alpha$$

$$\langle\alpha|\hat{p}|\alpha\rangle = \frac{i\hbar}{\ell\sqrt{2}} \langle\alpha|(a^\dagger - a)|\alpha\rangle = \frac{i\hbar}{\ell\sqrt{2}} \underbrace{(\alpha^* - \alpha)}_{-2i\operatorname{Im}\alpha} = \sqrt{2} \frac{\hbar}{\ell} \operatorname{Im} \alpha \quad [a, a^\dagger] = 1$$

$$\langle\alpha|\hat{x}^2|\alpha\rangle = \frac{\ell^2}{2} \langle\alpha|(a^\dagger + a)^2|\alpha\rangle \quad (a^\dagger + a)^2 = (a^\dagger)^2 + a^2 + a^\dagger a + a a^\dagger = (a^\dagger)^2 + a^2 + 1 + 2a^\dagger a$$

$$\text{quindi } \langle\alpha|\hat{x}^2|\alpha\rangle = \frac{\ell^2}{2} ((\alpha^*)^2 + \alpha^2 + 1 + 2|\alpha|^2) = \frac{\ell^2}{2} (1 + (\alpha + \alpha^*)^2) \quad \text{e} \quad \Delta_x^2 = \langle\alpha|\hat{x}^2|\alpha\rangle - \langle\alpha|\hat{x}|\alpha\rangle^2$$

diventa $\Delta_x^2 = \frac{\ell^2}{2}$ come per il fononumero dell'oscillatore armonico

Analogamente abbiamo

$$\langle\alpha|\hat{p}^2|\alpha\rangle = -\frac{\hbar^2}{2\ell^2} \langle\alpha|(a^\dagger - a)^2|\alpha\rangle; \quad (a^\dagger - a)^2 = (a^\dagger)^2 + a^2 - a^\dagger a - a a^\dagger = (a^\dagger)^2 + a^2 - 1 - 2a^\dagger a$$

$$\text{quindi } \langle\alpha|\hat{p}^2|\alpha\rangle = -\frac{\hbar^2}{2\ell^2} ((\alpha^*)^2 + \alpha^2 - 1 - 2|\alpha|^2) = -\frac{\hbar^2}{2\ell^2} ((\alpha^* - \alpha)^2 - 1) \quad \text{e dunque}$$

$$\Delta_p^2 = \langle\alpha|\hat{p}^2|\alpha\rangle - \langle\alpha|\hat{p}|\alpha\rangle^2 = \frac{\hbar^2}{2\ell^2} \quad \text{e di conseguenza} \quad \Delta_x \Delta_p = \frac{\hbar}{2} \text{ per gli stati coerenti.}$$

$$\langle\alpha|\hat{H}|\alpha\rangle = \langle\alpha|\hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)|\alpha\rangle = \hbar\omega\left(|\alpha|^2 + \frac{1}{2}\right) \quad \text{come si potrebbe verificare anche}$$

usando i valori di $\langle\alpha|\hat{x}^2|\alpha\rangle$ e $\langle\alpha|\hat{p}^2|\alpha\rangle$ appena calcolati.

Evoluzione temporale degli stati coerenti

Per l'evoluzione temporale degli stati coerenti si può procedere in due modi

•) metodo diretto

Ricordiamo che $|\alpha\rangle = \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$, quindi per l'evoluzione temporale si ha

$$e^{-iHt/\hbar} |\alpha\rangle = \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-iHt/\hbar} |n\rangle = \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\omega(n+\frac{1}{2})t} |n\rangle = e^{-i\frac{\omega}{2}t} \sum_n \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = e^{-i\frac{\omega}{2}t} |\alpha e^{-i\omega t}\rangle$$

•) metodo indiretto con eq. di Heisenberg

$$O_H(t) = e^{+iHt/\hbar} O e^{-iHt/\hbar}, \quad \frac{d}{dt} O_H = \frac{i}{\hbar} H e^{iHt/\hbar} O e^{-iHt/\hbar} - e^{iHt/\hbar} O e^{-iHt/\hbar} \frac{iH}{\hbar} = \frac{i}{\hbar} [H, O_H]$$

$$H = \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2}); \quad [H, a] = \hbar\omega[a^\dagger a, a] = -\hbar\omega a \quad \text{usando } [a, a^\dagger] = 1 \quad \text{quindi}$$

$$\frac{d}{dt} a_H = -i\omega a_H \quad \text{quindi} \quad a_H(t) = e^{-i\omega t} a$$

da $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$ si ha allora $e^{iHt/\hbar} a e^{-iHt/\hbar} e^{iHt/\hbar} |\alpha\rangle = \alpha e^{iHt/\hbar} |\alpha\rangle$

cioè $e^{-i\omega t} a e^{+iHt/\hbar} |\alpha\rangle = \alpha e^{+iHt/\hbar} |\alpha\rangle$ da cui si vuole che $e^{+iHt/\hbar} |\alpha\rangle$ è autostato di a con autovalore $\alpha e^{i\omega t}$ e mandando t in $-t$ si trova $e^{-iHt/\hbar} |\alpha\rangle \propto |\alpha e^{-i\omega t}\rangle$
 $e^{-iHt/\hbar} |\alpha\rangle = e^{-i\omega t/2} |\alpha e^{-i\omega t}\rangle$ tiene conto del termine $\frac{\hbar\omega}{2}$ di H , che è invisibile per le equazioni di Heisenberg

Ricordiamo che $\langle\alpha|\hat{x}|\alpha\rangle = l\sqrt{2}\text{Re}\alpha$ e $\langle\alpha|\hat{p}|\alpha\rangle = \frac{\hbar}{l}\sqrt{2}\text{Im}\alpha$ mentre $\Delta_x^2 = \frac{l^2}{2}$, $\Delta_p^2 = \frac{\hbar^2}{2l^2}$

Durante l'evoluzione temporale si ha $\alpha \rightarrow \alpha e^{-i\omega t}$ quindi

$$\langle x \rangle_t = l\sqrt{2}\text{Re}(\alpha e^{-i\omega t}) \quad \text{e} \quad \langle p \rangle_t = \frac{\hbar}{l}\sqrt{2}\text{Im}(\alpha e^{-i\omega t}) \quad \text{da cui si ottiene}$$

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle_t = l\sqrt{2}\text{Re}(-i\omega \alpha e^{-i\omega t}) = l\sqrt{2}\omega \text{Im}(\alpha e^{-i\omega t}) = l\sqrt{2}\omega \frac{l}{\hbar\sqrt{2}} \langle p \rangle_t = \frac{1}{m} \langle p \rangle_t$$

$$\frac{d}{dt} \langle p \rangle_t = \frac{\hbar}{l}\sqrt{2}\text{Im}(-i\omega \alpha e^{-i\omega t}) = -\frac{\hbar}{l}\sqrt{2}\omega \text{Re}(\alpha e^{-i\omega t}) = -\frac{\hbar}{l}\sqrt{2}\omega \frac{1}{l\sqrt{2}} \langle x \rangle_t = -m\omega^2 \langle x \rangle_t$$

Quindi $\langle x \rangle_t$, $\langle p \rangle_t$ evolvono seguendo le equazioni classiche del moto rimanendo ad ogni istante stati a minima indeterminazione.

Im particolare $\frac{1}{\sqrt{2}l} \langle x \rangle_t$ e $\frac{l}{\hbar\sqrt{2}} \langle p \rangle_t$ percorrono in senso antiorario una circonferenza di raggio $|\alpha|$

Oscillatore armonico con accensione istantanea di campo elettrico

Una particella di massa m e carica q descritta da $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ si trova nel fondamentale, con funzione d'onda $\psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{l}} e^{-x^2/2l^2}$ (con $l = \sqrt{\hbar/m\omega}$). Al tempo $t=0$ si accende istantaneamente un campo elettrico E (quindi $\dot{E}/E \gg \omega$), quindi al tempo $t=0^+$ la funzione d'onda è ancora $\psi_0(x)$

1) scrivere la funzione d'onda $\psi_0(x)$ del fondamentale per $t>0$

$$H' = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - qEx = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \left(x - \frac{q}{m\omega^2} E\right)^2 - \frac{1}{2} \frac{q^2}{m\omega^2} E^2$$

che è parte una costante è un oscillatore armonico centrato in $x_0 = \frac{qE}{m\omega^2}$ quindi la funzione d'onda del fondamentale è $\psi_0(x) = \psi_0(x-x_0) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{l}} \exp\left(-\frac{1}{2l^2}(x-x_0)^2\right)$

2) se si effettua una misura di energia subito dopo l'accensione del campo, quale è la probabilità di trovare la particella nello stato ψ_0 ?

La probabilità cercata è $p_0 = |\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle|^2$

$$\begin{aligned} \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{l} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2/2l^2} e^{-(x-x_0)^2/2l^2} dx = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{l} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2/l^2 + x_0 x/l^2 - x_0^2/2l^2} dx = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{l} \sqrt{\pi l^2} e^{x_0^2/4l^2} e^{-x_0^2/2l^2} = e^{-x_0^2/4l^2} \end{aligned}$$

ottenuto usando $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2+bx} dx = e^{b^2/4a}$

Altre alternative di fare l'integrale $\frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{l} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2/2l^2 - (x-x_0)^2/2l^2} dx = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{l} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2l^2}[(y+\frac{x_0}{2})^2 + (y-\frac{x_0}{2})^2]} dy =$

$$= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{l} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2/l^2} e^{-x_0^2/4l^2} dy = e^{-x_0^2/4l^2} \quad \text{quindi} \quad p_0 = e^{-x_0^2/2l^2} \quad \text{con} \quad x_0 = \frac{qE}{m\omega^2}$$

3) se si effettua una misura di energia a $t = 4/\omega$ quale è la probabilità di trovare la particella nello stato ψ_0 ?

Indichiamo con $|\psi_n\rangle$ gli autostati della hamiltoniana per $t>0$, allora

$$|\psi_0\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n | \psi_0 \rangle \quad \text{quindi} \quad e^{-iH't/\hbar} |\psi_0\rangle = \sum_n e^{-iH't/\hbar} |\psi_n\rangle \langle \psi_n | \psi_0 \rangle = \sum_n e^{-iE_n t/\hbar} |\psi_n\rangle \langle \psi_n | \psi_0 \rangle$$

da cui $\langle \psi_0 | e^{-iH't/\hbar} |\psi_0\rangle = e^{-iE_0 t/\hbar} \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle$ quindi $|\langle \psi_0 | e^{-iH't/\hbar} |\psi_0\rangle|^2$ è indipendente da t e la probabilità di trovare lo stato $|\psi_0\rangle$ è indipendente dal tempo di osservazione.

4) Quale è la probabilità di trovare la particella nello stato ψ_n con n generico?

info utili: $x = \frac{l}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a)$, $p = i\frac{\hbar}{l\sqrt{2}}(a^\dagger - a)$, $e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]}$ se $[A,B] \propto 1$

La funzione d'onda iniziale è $\psi_0(x) = \psi_0(x+x_0) = e^{ipx_0/\hbar} \psi_0(x) = \exp\left\{\frac{x_0}{l\sqrt{2}}(a - a^\dagger)\right\} \psi_0(x)$

$$e^{\beta(a - a^\dagger)} = e^{-\beta a^\dagger} e^{\beta a} e^{-\frac{1}{2}[-\beta a^\dagger, \beta a]} = e^{-\beta a^\dagger} e^{\beta a} e^{-\frac{1}{2}\beta^2} \quad (\text{usando } [a, a^\dagger] = 1) \quad \text{quindi}$$

usando $\boxed{\beta = \frac{x_0}{l\sqrt{2}}}$ abbiamo

$$|\psi_0\rangle = e^{-\beta^2/2} e^{-\beta a^\dagger} e^{\beta a} |\psi_0\rangle = e^{-\beta^2/2} e^{-\beta a^\dagger} |\psi_0\rangle = e^{-\beta^2/2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^m}{m!} (a^\dagger)^m |\psi_0\rangle = e^{-\beta^2/2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^m}{\sqrt{m!}} |\psi_m\rangle$$

Quindi $\langle \psi_m | \psi_0 \rangle = e^{-\beta^2/2} \frac{(-\beta)^m}{\sqrt{m!}}$ e infine $p_m = e^{-\beta^2} \frac{\beta^{2m}}{m!}$ che nel caso $m=0$ riproduce il risultato p_0 ottenuto in precedenza.

Formula utile $e^{-B} A e^B = A + [A, B] + \frac{1}{2} [[A, B], B] + \frac{1}{3!} [[[A, B], B], B] + \dots$

$$\text{dim: } F(t) = e^{-tB} A e^{tB} ; \quad F'(t) = -B e^{-tB} A e^{tB} + e^{-tB} A e^{tB} B = [F(t), B]$$

$$G(t) = A + t[A, B] + \frac{1}{2} t^2 [[A, B], B] + \frac{1}{3!} t^3 [[[A, B], B], B] + \dots$$

$$G'(t) = [A, B] + t[[A, B], B] + \frac{1}{2} t^2 [[[A, B], B], B] + \dots = [G(t), B]$$

Quindi sia $F(t)$ che $G(t)$ soddisfanno $H'(t) = [H(t), B]$ con $H(0) = A$, quindi $F(t) = G(t)$ in particolare $F(1) = G(1)$ $\square$

Formula utile: se $[A, B] = c\mathbb{1}$ con $c \in \mathbb{C}$ allora $e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A, B]}$

(caso particolare delle formule di Campbell-Baker-Hausdorff e di Zassenhaus)

$$\text{dim: } \underbrace{e^{t(A+B)}}_{f(t)} = \underbrace{e^{tA} e^{tB} e^{t^2 C}}_{g(t)} \quad (\text{questa \u00e8 la def. dell'operatore } C)$$

$$\text{Chiaramente } f(0) = g(0) \text{ e inoltre abbiamo } f'(t) = (A+B) e^{t(A+B)} = (A+B) f(t)$$

$$\begin{aligned} g'(t) &= A e^{tA} e^{tB} e^{t^2 C} + e^{tA} B e^{tB} e^{t^2 C} + e^{tA} e^{tB} 2tC e^{t^2 C} = \\ &= A g(t) + \underbrace{e^{tA} B e^{-tA}}_{= B + [B, -tA] = B + tC} g(t) + e^{tA} e^{tB} 2tC e^{-tB} e^{-tA} g(t) \\ &= B + [B, -tA] = B + tC \end{aligned}$$

Se usiamo $C = -\frac{1}{2}c$ si trova $g'(t) = (A+B) g(t)$ e quindi $f(t) = g(t)$ $\square$

Regole di commutazione

$$[L_i, r_j] = [E_{i\alpha\beta} r_\alpha p_\beta, r_j] = E_{i\alpha\beta} \left(\overbrace{r_\alpha [p_\beta, r_j]}^{-i\hbar \delta_{\beta j}} + [r_\alpha, r_j] p_\beta \right) = -i\hbar E_{i\alpha\beta} r_\alpha \delta_{\beta j} =$$

$$= -i\hbar E_{i\alpha j} r_\alpha = i\hbar E_{ij\alpha} r_\alpha$$

In modo identico $[L_i, p_j] = i\hbar E_{ijk} p_k$ e in generale per ogni vettore $[L_i, V_j] = i\hbar E_{ijk} V_k$

$$[L_i, L_j] = [L_i, E_{j\alpha\beta} r_\alpha p_\beta] = E_{j\alpha\beta} (r_\alpha [L_i, p_\beta] + [L_i, r_\alpha] p_\beta) =$$

$$= E_{j\alpha\beta} (r_\alpha i\hbar E_{i\beta\gamma} p_\gamma + i\hbar E_{i\alpha\gamma} r_\gamma p_\beta) =$$

$$= i\hbar E_{\beta j\alpha} E_{\beta\gamma i} r_\alpha p_\gamma + i\hbar E_{\alpha\beta j} E_{\alpha\gamma i} r_\gamma p_\beta =$$

$$= i\hbar (\delta_{j\gamma} \delta_{\alpha i} - \delta_{ji} \delta_{\alpha\gamma}) r_\alpha p_\gamma + i\hbar (\delta_{\beta\gamma} \delta_{ji} - \delta_{\beta i} \delta_{j\gamma}) r_\gamma p_\beta =$$

$$= i\hbar (\delta_{i\alpha} \delta_{j\gamma} - \delta_{i\gamma} \delta_{j\alpha}) r_\alpha p_\gamma = i\hbar E_{k\alpha j} E_{k\alpha\gamma} r_\alpha p_\gamma =$$

$$= i\hbar E_{ijk} L_k$$

il momento orbitale trasforma come un vettore.

rinomino gli indici
muti $\beta \rightarrow \gamma, \gamma \rightarrow \alpha$

Rotazioni tridimensionali e $j=1$

3 generatori delle rotazioni tridimensionali sono $\Sigma_x = -i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}; \Sigma_y = -i \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \Sigma_z = -i \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

in breve $(\Sigma_\alpha)_{\alpha\beta} = i E_{\alpha\alpha\beta}$

Ad es. $e^{-i\theta \Sigma_z} = e^{-\theta \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}} = \sum_n \frac{(-\theta)^n}{n!} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^n$ inoltre $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}^{2n} = (-1)^n \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}^{2n+1} = (-1)^n \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$

quindi $\sum_n \frac{(-\theta)^n}{n!} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^n = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \sum_n \frac{(-1)^n (-\theta)^{2n+1}}{(2n+1)!} + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \sum_n \frac{(-1)^n (-\theta)^{2n}}{(2n)!} =$

$$= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \sin(\theta) + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cos(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

rotazione ortogonale di angolo θ
attorno a $\hat{z}$

Vogliamo ora descrivere i generatori nella base "standard", in cui Σ_z è diagonale

Chiaramente $\vec{v}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ è autostato con autovalore zero di Σ_z . Nel sottospazio ortogonale Σ_z si

riduce alla matrice $\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ $\begin{matrix} \text{tr}=0 \\ \text{det}=-1 \end{matrix} \Rightarrow$ autovalori ± 1

$$\vec{w}_{+1} = -\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix} \text{ è autovett. con autovel } \lambda = +1 : -\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix} = -\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix}$$

analogamente $\vec{w}_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix}$ è autovett. con autovalore $\lambda = -1$ quindi una base di autovett. di Σ_z è

$$\vec{v}_{+1} = -\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \vec{v}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad \vec{v}_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix}$$

ovviamente questi autovettori potrebbero essere moltiplicati per fasi, ma con questa convenzione si è consistenti con Condon-Shortley

$$\Sigma_+ = \Sigma_x + i\Sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -i \\ 1 & +i & 0 \end{pmatrix} \text{ ed } \acute{\text{e}} \text{ immediato verificare che } \Sigma_+ \vec{v}_{+1} = 0; \Sigma_+ \vec{v}_0 = \sqrt{2} \vec{v}_{+1} \\ \text{e infine } \Sigma_+ \vec{v}_{-1} = \sqrt{2} \vec{v}_0$$

consistente con la regola generale $\Sigma_+ |j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} |j, m+1\rangle$ per $j=1$ e si potrebbe analogamente verificare che $\Sigma_- |j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} |j, m-1\rangle$ sempre con $j=1$. Quindi $j=1$ corrisponde ai vettori

Consideriamo ora la representazione di Schrodinger

•) $f(r)$ con $r = |\vec{r}|$ è autovettore di $\vec{L}$ con autovalore zero (scalare)

$$\vec{L} = -i\hbar \vec{r} \times \vec{\nabla}, \quad \vec{\nabla} f(r) = \frac{df}{dr} \left(\frac{\partial r}{\partial x}, \frac{\partial r}{\partial y}, \frac{\partial r}{\partial z} \right) = \frac{df}{dr} \frac{\vec{r}}{r} \quad \text{e poich\'e } \vec{r} \times \vec{r} = 0 \text{ abbiamo } \vec{L} f(r) = 0$$

•) definiamo $|1\rangle = x f(r); |2\rangle = y f(r); |3\rangle = z f(r)$ allora abbiamo

$$L_x |1\rangle = L_x x f(r) = x L_x f(r) = 0 \text{ per quanto visto sopra}$$

$$\uparrow [x, L_x] = 0 \rightarrow \text{poich\'e } L_x f(r) = 0$$

$$L_x |2\rangle = L_x y f(r) = (L_x y - y L_x) f(r) = i\hbar z f(r) = i\hbar |3\rangle$$

$$\uparrow [L_x, r_y] = i\hbar \epsilon_{xjk} r_k$$

$$\text{e in modo identico } L_x |3\rangle = L_x z f(r) = [L_x, z] f(r) = -i\hbar y f(r) = -i\hbar |2\rangle$$

Quindi sui tre vettori $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ abbiamo $L_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i\hbar \\ 0 & i\hbar & 0 \end{pmatrix} = \hbar \Sigma_x$ e analogamente si vede che si hanno le relazioni $L_y = \hbar \Sigma_y$ e $L_z = \hbar \Sigma_z$, quindi il sottosistema generato da $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ corrisponde al sottosistema $j=1$ dello spazio di Hilbert $\mathbb{H}^2(\mathbb{R}^3)$. Sul particolare $\vec{r} f(r)$ è autostato di L^2 con autovalore $l=1$, quindi $L^2 \vec{r} f(r) = \hbar^2 \vec{r} f(r)$

Usando i vettori $\vec{v}_{+1}, \vec{v}_0$ e $\vec{v}_{-1}$ che diagonalizzano Σ_z possiamo costruire gli stati:

$$\vec{v}_{+1} = -\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow -\frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle + i|3\rangle) = -\frac{1}{\sqrt{2}} (x + iy) f(r)$$

$$\vec{v}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow |3\rangle = z f(r)$$

$$\vec{v}_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle - i|3\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (x - iy) f(r)$$

che si possono confrontare con le armoniche solide per $l=1$

$$r Y_{1,+1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} r \sin\theta e^{i\varphi} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \left[-\frac{1}{\sqrt{2}} (x + iy) \right]$$

$$r Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} r \cos\theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} z$$

$$r Y_{1,-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} r \sin\theta e^{-i\varphi} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} (x - iy) \right]$$

che si vedono avere la stessa struttura angolare degli stati costruiti in precedenza.

Valori medi e dispersione

Consideriamo i valori medi di $\vec{L}$ su uno stato $|j, m\rangle$. Ovviamente $L_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle$ quindi $\langle L_z \rangle = \hbar m$. Da $L_{\pm} = L_x \pm iL_y$ otteniamo $L_x = \frac{1}{2}(L_+ + L_-)$ e $L_y = \frac{1}{2i}(L_+ - L_-)$ e dal fatto che $\langle j, m | L_+ | j, m \rangle \propto \langle j, m | j, m+1 \rangle = 0$ e $\langle j, m | L_- | j, m \rangle \propto \langle j, m | j, m-1 \rangle = 0$ si ottiene $\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$.

Introducendo $\Delta_x^2 = \langle L_x^2 \rangle - \langle L_x \rangle^2 = \langle L_x^2 \rangle$ (poiché $\langle L_x \rangle = 0$) e analogamente $\Delta_y^2 = \langle L_y^2 \rangle - \langle L_y \rangle^2 = \langle L_y^2 \rangle$ abbiamo $\Delta_x^2 + \Delta_y^2 = \langle L_x^2 \rangle + \langle L_y^2 \rangle = \langle L^2 \rangle - \langle L_z^2 \rangle = \hbar^2 (l(l+1) - m^2) \neq 0$ se $l \neq 0$.

Rotazioni e operatori vettoriali

1) mostrare che $\psi(\vec{r}) = x f(r)$ è autostato di L_x con autovalore zero

$$L_x x f(r) = x L_x f(r) = 0 \quad \text{poiché } [x, L_x] = 0 \text{ e } f(r) \text{ è uno scalare (vedi sopra pag. 2)}$$

2) consideriamo una rotazione oraria di angolo θ del sistema attorno a $\hat{z}$. Scrivere la funz. d'onda trasformata

La rotazione oraria R di angolo θ attorno a $\hat{z}$ è
$$\begin{cases} x' = x \cos \theta + y \sin \theta \\ y' = -x \sin \theta + y \cos \theta \\ z' = z \end{cases} \quad \text{quindi } \psi(\vec{r}) \rightarrow \psi_R(\vec{r}) = \psi(R^{-1}\vec{r})$$

e R^{-1} si ottiene da R scambiando $\theta \rightarrow -\theta$ quindi

$$\psi_R(\vec{r}) = \psi(x \cos \theta - y \sin \theta, x \sin \theta + y \cos \theta, z) = (x \cos \theta - y \sin \theta) f(r)$$

3) Sotto la rotazione R il vettore $\hat{x}$ va in $\hat{m}'$. Dimostrare che $\psi_R(\vec{r})$ è autostato di $\hat{m}' \cdot \vec{L}$ con autov. zero

$$\hat{m}' = (\cos \theta, \sin \theta, 0) \quad \text{quindi } \hat{m}' \cdot \vec{L} = \cos \theta L_x + \sin \theta L_y \quad \text{Si è visto prima che } L_x x f(r) = 0$$

$$\text{inoltre } L_x y f(r) = [L_x, y] f(r) = i \hbar z f(r), \quad L_y x f(r) = [L_y, x] f(r) = -i \hbar z f(r) \text{ e infine } L_y y f(r) = 0$$

$$\begin{aligned} \hat{m}' \cdot \vec{L} \psi_R(\vec{r}) &= \cos \theta L_x (x \cos \theta - y \sin \theta) f(r) + \sin \theta L_y (x \cos \theta - y \sin \theta) f(r) = \\ &= -\cos \theta \sin \theta L_x y f(r) - \sin \theta \cos \theta L_y x f(r) = \cos \theta \sin \theta (-i \hbar z + i \hbar z) f(r) = 0 \end{aligned}$$

4) Mostrare che ψ_R è autostato di $\hat{m}' \cdot \vec{L}$ con autovalore zero usando il fatto che $\vec{L}$ è un op. vettoriale

Indicando con $U(R)$ la trasformazione nello spazio di Hilbert corrispondente alla rotazione R un operatore vettoriale soddisfa $U^{-1}(R) \vec{V} U(R) = R \vec{V}$ (cioè i valori medi trasformano nello stesso modo se $|\psi\rangle \rightarrow U(R)|\psi\rangle$ o $\vec{V} \rightarrow R \vec{V}$)

Sia $|\psi\rangle$ uno stato tale che $L_x |\psi\rangle = 0$, cioè tale che $\hat{m} \cdot \vec{L} |\psi\rangle = 0$ con $\hat{m} = (1, 0, 0)$, allora abbiamo

$$0 = \hat{m} \cdot \vec{L} |\psi\rangle = \hat{m} \cdot \vec{L} U(R^{-1}) U(R) |\psi\rangle \quad \text{quindi} \quad U(R) \hat{m} \cdot \vec{L} U(R^{-1}) U(R) |\psi\rangle = 0 \quad \text{inoltre}$$

$\underbrace{U(R) \hat{m} \cdot \vec{L} U(R^{-1})}_{= |\psi_R\rangle \text{ stato nullo}}$

$$U(R) \hat{m} \cdot \vec{L} U(R^{-1}) = \hat{m} \cdot U(R) \vec{L} U(R^{-1}) = \hat{m} \cdot R^{-1} \vec{L} = (R \hat{m}) \cdot \vec{L} = \hat{m}' \cdot \vec{L}$$

$$\text{quindi } \hat{m}' \cdot \vec{L} |\psi_R\rangle = 0$$

Nota su op. vettoriali: $U^{-1}(R)\vec{V}U(R) = R\vec{V}$, $U(R) = e^{-i\vec{\varphi}\cdot\vec{S}/\hbar}$, $R = e^{-i\vec{\varphi}\cdot\vec{S}}$ generatori rot. 3d
(Z_j) $_{\alpha\beta} = i\epsilon_{\alpha j\beta}$
 quindi per rot. infinitesime $(1 + i\frac{\vec{\varphi}\cdot\vec{S}}{\hbar})V_k(1 - i\frac{\vec{\varphi}\cdot\vec{S}}{\hbar}) = (1 - i\vec{\varphi}\cdot\vec{S})_{kl}V_l$ e prendendole la componente
 moltiplicata per φ_i otteniamo $\frac{i}{\hbar}[\tilde{S}_i, V_k] = -i(\tilde{S}_i)_{kl}V_l = \epsilon_{kil}V_l$ cioè $[\tilde{S}_i, V_k] = i\hbar\epsilon_{ikl}V_l$

Valori di aspettazione di L^2

Consideriamo $\psi(\vec{r}) = (Ay^2 + B(x^2 + z^2))f(r)$

1) se $A=B=1$ quali sono i valori possibili misurati di L^2 e L_z e con che probabilità?

per $A=B=1$ $\psi(\vec{r})$ è invariante per rotazioni, quindi $l=0$ e $m=0$ con probabilità 1

2) stessa domanda per $A=0$, $B=1$

$$x^2 + z^2 = r^2(\sin^2\theta\cos^2\varphi + \cos^2\theta) = r^2(\sin^2\theta(\frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2})^2 + \cos^2\theta) = r^2(\cos^2\theta + \frac{1}{4}\sin^2\theta(e^{2i\varphi} + e^{-2i\varphi} + 2)) =$$

$$= r^2(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\cos^2\theta + \frac{1}{4}\sin^2\theta(e^{2i\varphi} + e^{-2i\varphi}))$$

$$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{4\pi}}(\frac{3}{2}\cos^2\theta - \frac{1}{2}) \Rightarrow \cos^2\theta = \sqrt{\frac{4\pi}{5}}\frac{2}{3}Y_{20} + \frac{1}{3}$$

$$Y_{22} = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin^2\theta e^{2i\varphi} \Rightarrow \frac{1}{4}\sin^2\theta e^{2i\varphi} = \sqrt{\frac{8\pi}{15}}Y_{22} \text{ e analogamente per } Y_{2,-2} = Y_{22}^*$$

$$\text{quindi } x^2 + z^2 = r^2\left(\underbrace{\frac{1}{2} + \frac{1}{6}}_{\frac{2}{3}} + \frac{1}{3}\sqrt{\frac{4\pi}{5}}Y_{20} + \sqrt{\frac{8\pi}{15}}(Y_{22} + Y_{2,-2})\right) = r^2\frac{4\sqrt{\pi}}{3}\left(Y_{00} + \frac{1}{\sqrt{20}}Y_{20} + \sqrt{\frac{3}{40}}(Y_{22} + Y_{2,-2})\right)$$

$$\frac{2}{3} = \frac{2}{3}\sqrt{4\pi}Y_{00}$$

Si possono quindi misurare i valori $l=0,2$ e $m=0,2,-2$. Non sapendo la normalizzazione assoluta (che dipende da $f(r)$) possiamo parametrizzare le probabilità con

$$P_{l=0} = \alpha \quad ; \quad P_{l=2} = \left(\frac{1}{20} + 2 \times \frac{3}{40}\right)\alpha = \frac{1}{5}\alpha \quad \text{e da } P_{l=0} + P_{l=2} = 1 \text{ troviamo } \alpha = \frac{5}{6} \text{ quindi } P_{l=0} = \frac{5}{6}, P_{l=2} = \frac{1}{6}$$

Analogamente per m abbiamo

$$P_{m=0} = \left(1 + \frac{1}{20}\right)\beta \quad ; \quad P_{m=2} = \beta\frac{3}{40} = P_{m=-2}$$

e dalla somma otteniamo $1 = \left(\frac{21}{20} + \frac{6}{40}\right)\beta = \frac{6}{5}\beta$ quindi $\beta = \frac{5}{6}$ da cui

$$P_{m=0} = \frac{21}{20} \cdot \frac{5}{6} = \frac{7}{8} \quad P_{m=2} = P_{m=-2} = \frac{3}{40} \cdot \frac{5}{6} = \frac{1}{16}$$

Oscillatore armonico 3d e degenerazione

Poiché $[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$ si possono introdurre 3 diversi operatori di salita e discesa a_i che soddisfano

$$[a_i, a_j] = 0 \quad \text{e} \quad [a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij} \quad \text{quindi}$$

$$H = \hbar\omega \left(\sum_i a_i^\dagger a_i + \frac{3}{2} \right) \quad \text{e lo spettro è} \quad E_n = \hbar\omega(n + 3/2) \quad \text{con} \quad n = n_1 + n_2 + n_3$$

$$\deg E_n = \# \text{ modi di scrivere } n \text{ come somma di 3 interi non negativi} =$$

$$= \# \text{ modi di mettere } n \text{ "umi" in 3 urne} =$$

$$= \# \text{ modi di disporre } n \text{ "umi" e 3 sbarrette} = \frac{(n+3)!}{3! n!} = \frac{1}{6} (n+1)(n+2)$$

Dalla simmetria sotto rotazioni segue la degenerazione $2l+1$ degli stati a l fissi ma in generale (per potenziali generici) l diversi non sono degeneri. Nel caso dell'oscillatore armonico la degenerazione $\frac{1}{6}(n+1)(n+2)$ si spiega con la degenerazione di l diversi. Stessa cosa succede per potenziale Coulombiano, analogamente al teorema di Bertrand su orbite chiuse in meccanica classica.

Determiniamo ora i valori di l presenti nel livello n -esimo

$$\bullet) \text{ vincolo sulla parità: } \psi_{n_1 n_2 n_3}(\vec{r}) = \psi_{n_1}(x) \psi_{n_2}(y) \psi_{n_3}(z) \quad \text{inoltre} \quad \psi_{n_i}(x_i) = (-1)^{m_i} \psi_{n_i}(x_i)$$

$$\text{quindi} \quad \psi_{n_1 n_2 n_3}(-\vec{r}) = (-1)^{n_1+n_2+n_3} \psi_{n_1 n_2 n_3}(\vec{r}), \quad \text{quindi} \quad \psi_n(-\vec{r}) = (-1)^n \psi_n(\vec{r}).$$

In coordinate sferiche $Y_{lm}(-\hat{r}) = (-1)^l Y_{lm}(\hat{r})$, quindi nel livello n -esimo possono essere presenti solo gli " l " pari/dispari secondo che n di E_n sia pari/dispari.

$\bullet) \text{ vincolo delle potenze: l'autostato } n\text{-esimo dell'oscillatore 1d è della forma}$

$$(\text{polinomio di grado } n \text{ in } x) e^{-x^2/2l^2}$$

$$\text{quindi} \quad \psi_{n_1 n_2 n_3}(\vec{r}) = (\text{polinomio di grado } n \text{ in } x, y, z) e^{-(x^2+y^2+z^2)/2l^2}, \quad \text{e di conseguenza}$$

$$\psi_n(\vec{r}) = (\text{polinomio di grado } n \text{ in } x, y, z) e^{-r^2/2l^2}.$$

Le armoniche solide $r^l Y_{lm}$ sono polinomi omogenei di grado l in x, y, z che soddisfano

$$\text{l'equazione armonica} \quad \nabla^2(r^l Y_{lm}) = 0. \quad \text{Quindi un generico polinomio omogeneo di grado } n$$

può essere decomposto in somma di termini del tipo $f_{lm}(r) Y_{lm}(\hat{r})$ con $l \leq n$.

NOTA: $l \leq n$ poiché esistono polinomi di grado maggiore di zero invariati per rotazione, come

$$\text{ad esempio } x^2+y^2+z^2.$$

Abbiamo quindi che allo stato n -esimo possono contribuire i valori di l con

$\bullet) \text{ stessa parità di } n$

$\bullet) l \leq n$

Si può vedere che tutti questi valori contribuiscono mostrando che in questo modo si può riprodurre la degenerazione dei livelli calcolata prima.

→ $n=0$ solo $l=0$ può contribuire e infatti $\deg E_0 = \frac{1}{2}(0+1)(0+3) = 1 = 2 \cdot 0 + 1$

→ $n=1$ solo $l=1$ può contribuire e infatti $\deg E_1 = \frac{1}{2}(1+1)(1+3) = 3 = 2 \cdot 1 + 1$

$$\begin{aligned} \deg E_{m+2} - \deg E_m &= \frac{1}{2}(m+3)(m+4) - \frac{1}{2}(m+1)(m+2) = \frac{1}{2}(m+3)(m+2) + (m+3) - \frac{1}{2}(m+1)(m+2) = \\ &= \frac{1}{2} \cdot 2(m+2) + m+3 = 2m+5 = 2(m+2) + 1 \end{aligned}$$

quindi si vede per induzione che assumeremo che nel livello n -esimo sono presenti tutti i valori di l con $l \leq n$ e stessa ipotesi di n si riproduce la degenerazione dei livelli.

In meccanica quantistica le degenerazioni sono associate alla presenza di simmetrie che non commutano tra loro (vedi th. degenerazione). Che simmetrie per l'oscillatore armonico 3d?

Th Noether: simmetrie $\Rightarrow$ leggi di conservazione. Che leggi di conservazione per l'oscillatore armonico 3d?

$H = \hbar\omega \left(\sum_i a_i^\dagger a_i + 3/2 \right)$, consideriamo $a_i \rightarrow a_i = U_{ij} a_j$, quindi $a_i^\dagger \rightarrow a_j^\dagger U_{ij}^*$ e affinché

H sia invariante si deve avere $a_i^\dagger a_i = a_\alpha^\dagger U_{i\alpha}^* U_{i\beta} a_\beta$ quindi $U_{i\alpha}^* U_{i\beta} = \delta_{\alpha\beta}$ cioè $U^\dagger U = \mathbb{1}$.

Si vede quindi che la hamiltoniana ha una invarianza per trasformazioni di $U(3)$ che è parecchio più grande della simmetria per rotazioni $SO(3)$ (9 parametri contro 3)

(per calcolo con $U(3)$ della deg. dell'osc. armonico 3d vedi Georgi "Lie algebras in particle physics" §14)

Gli operatori $a_i^\dagger a_j$ sono operatori che commutano con la hamiltoniana, come si vede facilmente per verifica diretta:

$$\begin{aligned} [a_i^\dagger a_j, a_k^\dagger a_k] &= a_i^\dagger [a_j, a_k^\dagger a_k] + [a_i^\dagger, a_k^\dagger a_k] a_j = a_i^\dagger \left(a_k^\dagger [a_j, a_k] + [a_j, a_k^\dagger] a_k \right) + \\ &+ \left(a_k^\dagger [a_i^\dagger, a_k] + [a_i^\dagger, a_k^\dagger] a_k \right) a_j = a_i^\dagger a_j - a_i^\dagger a_j = 0 \end{aligned}$$

$\begin{matrix} \text{0} & \text{0} \\ \text{0} & \text{0} \\ \text{0} & \text{0} \end{matrix}$

e queste sono le 9 quantità conservate associate alla simmetria $U(3)$.

$$U_{\text{somme}} \begin{cases} x_i = \frac{\ell}{\sqrt{2}} (a_i + a_i^\dagger) \\ p_i = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}\ell} (a_i^\dagger - a_i) \end{cases} \quad \text{si possono descrivere in termini di operatori di solito e disuso } \vec{L} \text{ e } \vec{L}^2$$

$$\begin{aligned} L_i &= \epsilon_{ijk} x_j p_k = \epsilon_{ijk} \frac{i\hbar}{2} (a_j + a_j^\dagger)(a_k^\dagger - a_k) = \frac{i\hbar}{2} \epsilon_{ijk} (a_j a_k^\dagger - a_j a_k + a_j^\dagger a_k^\dagger - a_j^\dagger a_k) = \\ &= \frac{i\hbar}{2} \epsilon_{ijk} (a_j a_k^\dagger - a_j^\dagger a_k) = -i\hbar \epsilon_{ijk} a_j^\dagger a_k \end{aligned}$$

$$\epsilon_{ijk} a_j a_k^\dagger = \epsilon_{ijk} (a_k^\dagger a_j + \delta_{kj}) = \epsilon_{ikj} a_j^\dagger a_k = -\epsilon_{ijk} a_j^\dagger a_k$$

$j \leftrightarrow k$

$$\begin{aligned} L_i L_i &= -\hbar^2 \epsilon_{ijk} \epsilon_{imn} a_j^\dagger a_k a_m^\dagger a_n = -\hbar^2 (\delta_{jm} \delta_{kn} - \delta_{jn} \delta_{km}) a_j^\dagger a_k a_m^\dagger a_n = \\ &= -\hbar^2 (a_j^\dagger a_k a_j^\dagger a_k - a_j^\dagger a_k a_k^\dagger a_j) \end{aligned}$$

$$a_j^\dagger a_k a_j^\dagger a_k = a_j^\dagger (a_j^\dagger a_k + \delta_{jk}) a_k = a_j^\dagger a_j^\dagger a_k a_k + a_j^\dagger a_j$$

$$a_j^\dagger a_k a_k^\dagger a_j = a_j^\dagger a_k (a_j a_k^\dagger - \delta_{jk}) = a_j^\dagger a_k a_j a_k^\dagger - a_j^\dagger a_j = a_j^\dagger a_j (a_k^\dagger a_k + 3) - a_j^\dagger a_j = a_j^\dagger a_j a_k^\dagger a_k + 2 a_j^\dagger a_j$$

quindi L^2 si scrive infine

$$L^2 = -\hbar^2 (a_j^\dagger a_j^\dagger a_k a_k - a_j^\dagger a_j a_k^\dagger a_k - a_j^\dagger a_j)$$

Introducendo l'operatore $A = \sum_k a_k a_k$, abbiamo quindi sulle stato $|\psi\rangle$ autostato n -esimo di H

$$\langle \psi | L^2 | \psi \rangle = -\hbar^2 \langle \psi | A^\dagger A | \psi \rangle + \hbar^2 n(n+1) \quad \text{quindi se } L^2 |\psi\rangle = \hbar^2 \ell(\ell+1) |\psi\rangle \text{ si deve avere}$$

$$\hbar^2 [n(n+1) - \ell(\ell+1)] = \hbar^2 \langle \psi | A^\dagger A | \psi \rangle = \hbar^2 \|A|\psi\rangle\|^2 \geq 0 \quad \text{quindi } \ell \leq n, \text{ come si era visto prima usando la forma delle armoniche sferiche.}$$

Le quantità conservate $a_i^\dagger a_j$ ottenute prima non commutano con L^2 , infatti:

$$\begin{aligned} [a_\alpha^\dagger a_\alpha^\dagger a_\beta a_\beta, a_i^\dagger a_j] &= a_\alpha^\dagger [a_\alpha^\dagger a_\beta a_\beta, a_i^\dagger a_j] + [a_\alpha^\dagger, a_i^\dagger a_j] a_\alpha^\dagger a_\beta a_\beta = \\ &= a_\alpha^\dagger a_\alpha^\dagger [a_\beta a_\beta, a_i^\dagger a_j] + a_\alpha^\dagger [a_\alpha^\dagger, a_i^\dagger a_j] a_\beta a_\beta - a_i^\dagger \delta_{\alpha j} a_\alpha^\dagger a_\beta a_\beta = \\ &= a_\alpha^\dagger a_\alpha^\dagger a_\beta [a_\beta, a_i^\dagger a_j] + a_\alpha^\dagger a_\alpha^\dagger [a_\beta, a_i^\dagger a_j] a_\beta - a_i^\dagger a_i^\dagger \delta_{\alpha j} a_\beta a_\beta - a_i^\dagger a_j^\dagger a_\beta a_\beta = \\ &= a_\alpha^\dagger a_\alpha^\dagger (a_i a_j + a_j a_i) - (a_j^\dagger a_i^\dagger + a_i^\dagger a_j^\dagger) a_\beta a_\beta = 2 a_\alpha^\dagger a_\alpha^\dagger a_i a_j - 2 a_i^\dagger a_j^\dagger a_\beta a_\beta \end{aligned}$$

(gli altri termini di L^2 commutano con $a_i^\dagger a_j$, come si vuole subito usare $[a_\alpha^\dagger a_\alpha, a_i^\dagger a_j] = 0$ mostrata prima)

Combinazioni delle quantità $a_i^\dagger a_j$ che commutano con L^2 : le combinazioni antisimmetriche

$\epsilon_{ijk} a_j^\dagger a_k$ (che è proporzionale a L_i) e la somma totale $a_\alpha^\dagger a_\alpha$ (che è proporzionale a H).

↪ se i, j, k sono tutti diversi $a_i^\dagger, a_j$ e a_k commutano.

$$\text{Se introduciamo } \begin{cases} a_+ = -\frac{1}{\sqrt{2}} (a_x - i a_y) \\ a_- = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_x + i a_y) \end{cases} \quad \text{abbiamo } \begin{pmatrix} a_+ \\ a_- \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & i \\ 1 & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_x \\ a_y \end{pmatrix}$$

$$\text{inoltre } U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & i \\ 1 & i \end{pmatrix}, \quad U^\dagger U = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ -i & -i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & i \\ 1 & i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Se $b_i = \sum_j U_{ij} a_j$ con U unitaria e $[a_j, a_k^\dagger] = \delta_{kj}$, $[a_j, a_k] = 0$ si ha ovviamente $[b_j, b_k] = 0$

$$[b_i, b_j^\dagger] = \sum_{k\ell} U_{ik} U_{j\ell}^* [a_k, a_\ell^\dagger] = \sum_k U_{ik} U_{jk}^* = (U U^\dagger)_{ij} = \delta_{ij}$$

$$\sum_i b_i^\dagger b_i = \sum_{ik\ell} U_{ik}^* U_{i\ell} b_k^\dagger b_\ell = \sum_{k\ell} \delta_{k\ell} b_k^\dagger b_\ell = \sum_k b_k^\dagger b_k$$

Quindi $a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y = a_+^\dagger a_+ + a_-^\dagger a_-$, inoltre è semplice verificare che $L_z = \hbar(a_+^\dagger a_+ - a_-^\dagger a_-)$

$$\Rightarrow \begin{cases} E = \hbar \omega (M_+ + M_- + M_z) \\ L_z = \hbar (M_+ - M_-) \end{cases} \quad \text{usando le quali si possono ritrovare i risultati ottenuti in precedenza.}$$

Valori medi facili per l'atomo di idrogeno

Per ogni potenziale centrale $\psi_{n\ell m}(\vec{r}) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\hat{r})$ (e spesso si introduce la funzione d'onda radiale ridotta u definita da $R(r) = \frac{1}{r} u(r)$).

Per l'atomo di idrogeno $n \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$, per dato n si ha $\ell \in \{0, \dots, n-1\}$ e per dato ℓ si ha $m \in \{-\ell, -\ell+1, \dots, \ell-1, \ell\}$, $E_n = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{a n^2}$ con $a = \frac{\hbar^2}{m e^2}$ = raggio di Bohr, deg $E_n = n^2$
 $(\pi_c = \frac{e^2}{m c^2}; \lambda_c = \pi_c \frac{\hbar c}{e^2} = \frac{\hbar}{m c}; a = \lambda_c \frac{\hbar c}{e^2} = \frac{\hbar^2}{m e^2}; \frac{\hbar c}{e^2} = \frac{1}{\alpha} \approx 137)$

Per lo stato fondamentale si ha $R_{10} = \frac{2}{a^{3/2}} e^{-r/a}$ e consideriamo ora alcuni valori medi sul fondamentale. Ovviamente $\psi = R_{10}(r) Y_{00}(\hat{r})$ con $Y_{00}(\hat{r}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$.

Chiaramente $\langle \vec{r} \rangle = \langle \vec{p} \rangle = 0$ a causa dell'invarianza per parità (e dell'invarianza per rotazioni).

$$\begin{aligned} \langle r^2 \rangle &= \int |\psi(\vec{r})|^2 r^2 d^3r = \int R_{10}^2(r) r^4 dr \int |Y_{00}|^2 d\Omega = \int_0^\infty r^4 \frac{4}{a^3} e^{-2r/a} dr = \int_0^\infty r^4 \frac{4}{a^3} e^{-2r/a} dr = \frac{4}{a^3} \int_0^\infty r^4 e^{-2r/a} dr \\ &= \frac{4}{a^3} \int_0^\infty \xi^4 e^{-\xi} d\xi = \frac{4}{a^3} \int_0^\infty \xi^4 e^{-\xi} d\xi \\ \int_0^\infty \xi^m e^{-\alpha \xi} d\xi &= \left(-\frac{d}{d\alpha}\right)^m \int_0^\infty e^{-\alpha \xi} d\xi = \left(-\frac{d}{d\alpha}\right)^m \alpha^{-1} = 1 \cdot \left(-\frac{d}{d\alpha}\right)^{m-1} \alpha^{-2} = 1 \cdot 2 \cdot \left(-\frac{d}{d\alpha}\right)^{m-2} \alpha^{-3} = m! \alpha^{-(m+1)} \end{aligned}$$

quindi $\langle r^2 \rangle = \frac{4}{a^3} 4! = 3a^2$

Se fossimo interessati a $\langle z^2 \rangle$ si dovrebbe calcolare

$$\langle z^2 \rangle = \int |\psi(r)|^2 z^2 r^2 dr d\Omega = \int_0^\infty R_{10}^2 r^4 dr \int_{-1}^1 \cos^2 \theta \frac{1}{4\pi} d\cos \theta \int_0^{2\pi} d\phi = \frac{4}{a^3} \int_0^\infty r^4 e^{-2r/a} dr \int_{-1}^1 \cos^2 \theta \frac{1}{2} d\cos \theta = \frac{4}{a^3} \int_0^\infty r^4 e^{-2r/a} dr \left[\frac{1}{3} \cos^3 \theta\right]_{-1}^1 = a^2$$

integrale di prima
↓

Più semplicemente, data la simmetria sferica, si sarebbe potuto usare $\langle x^2 \rangle = \langle y^2 \rangle = \langle z^2 \rangle$ e quindi $\langle r^2 \rangle = 3 \langle z^2 \rangle$ da cui $\langle z^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle r^2 \rangle = a^2$

Il calcolo di $\langle r \rangle$ è del tutto analogo: $\langle r \rangle = \int_0^\infty R_{10}^2(r) r^3 dr = \frac{4}{a^3} \int_0^\infty r^3 e^{-2r/a} dr = \frac{4}{a^3} \int_0^\infty \xi^3 e^{-\xi} d\xi = \frac{3}{2} a$

La densità di probabilità di trovare la particella a distanza r dal centro è

$$P(r) = \int |\psi|^2 r^2 d\Omega = R_{10}^2(r) r^2 = \frac{4}{a^3} r^2 e^{-2r/a}$$

e la distanza dal centro a cui è più probabile trovare la particella è la soluzione di $\frac{d}{dr} P(r) = 0$, quindi $2r - 2r^2/a = 0$ quindi $r = a$.

Passiamo ad analizzare gli impulsi e consideriamo inizialmente p_z^2 :

$$\langle p_z^2 \rangle = -\hbar^2 \int R_{10}(r) \left(\frac{d^2}{dz^2} R_{10}(r) \right) r^2 dr d\Omega = -\hbar^2 \frac{1}{\pi a^3} \int e^{-r/a} \left(\frac{d^2}{dz^2} e^{-r/a} \right) r^2 dr d\Omega$$

$$\frac{d}{dz} e^{-r/a} = -\frac{1}{a} e^{-r/a} \frac{z}{r}; \quad \frac{d^2}{dz^2} e^{-r/a} = \frac{1}{a^2} \frac{z^2}{r^2} e^{-r/a} - \frac{1}{a} \frac{e^{-r/a}}{r} + \frac{z^2}{a^2 r^3} e^{-r/a}$$

quindi $\langle p_z^2 \rangle = -\frac{\hbar^2}{\pi a^5} \int z^2 e^{-2z/a} dz d\Omega + \frac{\hbar^2}{\pi a^4} \int z e^{-2z/a} dz d\Omega - \frac{\hbar^2}{\pi a^4} \int z^2 \frac{1}{z} e^{-2z/a} dz d\Omega =$

$$= -\frac{\hbar^2}{\pi a^5} \frac{a^3}{2^3} \int_0^\infty \xi^2 e^{-\xi} d\xi \int_{-1}^1 \cos^2 \Theta d\cos \Theta \cdot 2\pi + \frac{\hbar^2}{\pi a^4} 4\pi \frac{a^2}{2^2} \int_0^\infty \xi e^{-\xi} d\xi - \frac{\hbar^2}{\pi a^4} \frac{a^2}{2^2} \int_0^\infty \xi e^{-\xi} d\xi \int_{-1}^1 \cos^2 \Theta d\cos \Theta \cdot 2\pi =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{\pi a^5} \frac{1}{8} \cdot 2 \cdot \frac{2}{3} \cdot 2\pi + \frac{\hbar^2}{a^2} - \frac{\hbar^2}{\pi a^2} \frac{1}{4} \cdot 1 \cdot \frac{2}{3} \cdot 2\pi = \left(-\frac{1}{3} + 1 - \frac{1}{3}\right) \frac{\hbar^2}{a^2} = \frac{1}{3} \frac{\hbar^2}{a^2}$$

Usando la simmetria sferica del problema abbiamo $\langle p_x^2 \rangle = \langle p_y^2 \rangle = \langle p_z^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle p^2 \rangle$ quindi $\langle p^2 \rangle = \hbar^2/a^2$

Un modo di procedere diverso è calcolare p^2 in coordinate sferiche

$$p^2 = -\hbar^2 \nabla^2 = -\hbar^2 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} L^2 \quad \text{e poiché sul fondamentale } L^2 |\psi\rangle = 0 \text{ si ha}$$

$$\langle p^2 \rangle = -\hbar^2 \frac{4}{a^5} \int_0^\infty e^{-x/a} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} e^{-x/a} \right) r^2 dr = \hbar^2 \frac{4}{a^4} \int_0^\infty e^{-x/a} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 e^{-x/a}) dr \quad \text{integrando per parti}$$

$$= \hbar^2 \frac{4}{a^5} \int_0^\infty r^2 e^{-2x/a} dr = \frac{\hbar^2}{a^2} \quad \text{come trovato in precedenza}$$

$\uparrow \int_0^\infty R_{10}^2(r) r^2 dr = 1$

Abbiamo quindi $\langle z^2 \rangle = a^2$, $\langle p_z^2 \rangle = \frac{1}{3} \frac{\hbar^2}{a^2}$, $\langle z \rangle = \langle p_z \rangle = 0 \Rightarrow \Delta_z^2 \Delta_{p_z}^2 = \frac{\hbar^2}{3} > \frac{\hbar^2}{4}$ ok con indeterminazione.

Calcolo mensurabile: valori medi sul fondamentale di zH_z (Griffiths, Schroeter ex 4.14)

$$[z, [H, z]] = z(Hz - zH) - (Hz - zH)z = 2zHz - z^2 H - Hz^2 \quad \text{quindi } zHz = \frac{1}{2} \{ [z, [H, z]] + z^2 H + Hz^2 \}$$

$$[H, z] = \frac{1}{2m} [p_z^2, z] = \frac{1}{2m} (p_z [p_z, z] + [p_z, z] p_z) = -\frac{i\hbar}{m} p_z$$

$$[z, [H, z]] = -\frac{i\hbar}{m} [z, p_z] = -\frac{i\hbar}{m} i\hbar = \hbar^2/m$$

$$\text{quindi } \langle zHz \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{1}{2} \langle z^2 H \rangle + \frac{1}{2} \langle Hz^2 \rangle \quad \text{Soltanto sul fondamentale } H|\psi_{10}\rangle = E_1 |\psi_{10}\rangle$$

$$\text{con } E_1 = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{a} \quad \text{quindi } \langle z^2 H \rangle = \langle Hz^2 \rangle = E_1 \langle z^2 \rangle = E_1 a^2 = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{a}$$

$\uparrow \langle z^2 \rangle = a^2$ visto prima

$$\text{Quindi } \langle zHz \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{1}{2} \frac{e^2}{a} = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{m} = 0.$$

$$a = \frac{e^2}{mc^2} \left(\frac{\hbar c}{e^2} \right)^2 = \frac{\hbar^2}{m e^2}$$

Riassunto di alcuni aspetti di Teoria

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}$$

$$\psi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\hat{r})$$

Spesso si usa $R_{nl}(r) = \frac{u_{nl}(r)}{r}$, con u_{nl} funzione d'onda ridotta, che è utile perché

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \frac{u}{r} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r u' - u) = \frac{1}{r^2} (r u'' + u' - u') = \frac{u''}{r}$$

e quindi l'equazione di Schrödinger si riduce a una forma 1d-like. Nota che anche

$$\text{i prodotti scalari diventano 1d-like: } \int \psi_1^*(\vec{r}) \psi_2(\vec{r}) d^3r = \int u_1^*(r) u_2(r) dr \int Y_{l_1 m_1}^*(\hat{r}) Y_{l_2 m_2}(\hat{r}) d\Omega$$

La funzione d'onda ridotta deve annullarsi nell'origine affinché la hamiltoniana cinetica

sia simmetrica (per autoaggiunzione servirebbe vedere meglio i domini), infatti

$$\int_0^\infty u_1^*(r) u_2''(r) dr = -u_1^*(0) u_2'(0) - \int_0^\infty u_1^{*'} u_2' dr = u_1^{*'}(0) u_2(0) + \int_0^\infty u_1^{*''} u_2 dr$$

$\uparrow$ $u \rightarrow 0$ per $r \rightarrow \infty$ $\downarrow$ $\hookrightarrow = 0$

Per il caso libero $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, inoltre $\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) R = \frac{1}{r^2} (2r R' + r^2 R'') = R'' + \frac{2}{r} R'$

quindi l'equazione di Schrödinger si scrive

$$-R_{kl}'' - \frac{2}{r} R_{kl}' + \frac{l(l+1)}{r^2} R_{kl} = k^2 R_{kl}$$

Per dedurre la relazione tra R_{kl} e $R_{k, l+1}$ è conveniente usare $R_{kl} = r^l \chi_{kl}$, quindi

$$R_{kl}' = l r^{l-1} \chi_{kl} + r^l \chi_{kl}' ; \quad R_{kl}'' = l(l-1) r^{l-2} \chi_{kl} + 2l r^{l-1} \chi_{kl}' + r^l \chi_{kl}''$$

e l'equazione di Schrödinger diventa

$$\underbrace{-l(l-1) r^{l-2} \chi_{kl}}_{\text{○}} - \underbrace{2l r^{l-1} \chi_{kl}'}_{\text{△}} - \underbrace{r^l \chi_{kl}''}_{\text{○}} - \underbrace{2l r^{l-1} \chi_{kl}'}_{\text{△}} + \underbrace{l(l+1) r^{l-2} \chi_{kl}}_{\text{○}} = k^2 r^l \chi_{kl}$$

$$-l(l-1) - 2l + l(l+1) = l(-l+1+l+1-2) = 0 ; \quad -2l-2 = -2(l+1)$$

e rimane $-\chi_{kl}'' - \frac{2(l+1)}{r} \chi_{kl}' = k^2 \chi_{kl}$ (*) . Derivando troviamo

$$-\chi_{kl}''' - \frac{2(l+1)}{r} \chi_{kl}'' + \frac{2(l+1)}{r^2} \chi_{kl}' = k^2 \chi_{kl}' \quad \text{Se ora definiamo } \chi_{kl}' = \chi_{k, l+1} \text{ allora}$$

abbiamo $\chi_{kl}'' = \chi_{k, l+1}'$ e $\chi_{kl}''' = \chi_{k, l+1}''$ e quindi

$$-\chi_{k, l+1}'' - 2 \chi_{k, l+1}' - 2 \frac{(l+1)}{r} \chi_{k, l+1}' - 2 \frac{(l+1)}{r} \chi_{k, l+1}' + 2 \frac{(l+1)}{r^2} \chi_{k, l+1}' = k^2 \chi_{k, l+1}' \quad \text{che si riduce}$$

$$-\chi_{k, l+1}'' - 2 \frac{(l+2)}{r} \chi_{k, l+1}' = k^2 \chi_{k, l+1}' \quad \text{che è l'equazione (*) con } l \rightarrow l+1, \text{ quindi } \chi_{kl}' = \chi_{k, l+1}$$

(serve controllare che le b.c. nell'origine tornino, vedi dopo)

Abbiamo quindi $R_{kl} = r^l \chi_{kl}$ e $R_{k, l+1} = r^{l+1} \chi_{k, l+1} = r^{l+1} \frac{\chi_{kl}}{r} = r^l \frac{\partial}{\partial r} (r^{-l} R_{kl})$ e

poiché $R_{kl} \sim r^l$ nell'origine si vede che $R_{k, l+1}$ non diverge ed è quindi

$R_{k, l+1} = r^l \frac{\partial}{\partial r} (r^{-l} R_{kl})$ è la corretta relazione di ricorrenza per le soluzioni dell'equazione di Schrödinger libera.

Vediamo per completezza che $R_{nl} \sim r^l$ vicino all'origine: l'equazione di Schrödinger è

$$-R''_{nl} - \frac{2}{r} R'_{nl} + \frac{l(l+1)}{r^2} R_{nl} = (E - V(r)) \frac{2m}{\hbar^2} R_{nl}$$

e cerchiamo soluzioni della forma r^α con $\alpha > 0$

$$-\alpha(\alpha-1)r^{\alpha-2} - 2\alpha r^{\alpha-2} + l(l+1)r^{\alpha-2} = \underbrace{(E - V(r)) \frac{2m}{\hbar^2} r^\alpha}_{\text{trascurabile se } V(r) \text{ è meno singolare di } 1/r^2}$$

$$\alpha(\alpha-1) + 2\alpha = l(l+1)$$

$$\alpha(\alpha+1) = l(l+1) \quad \begin{cases} \alpha = l \\ \alpha = -l-1 \end{cases}$$

$\alpha = -l-1 \leftarrow$ non accettabile.

Stima "variazionale" del numero di stati legati

Se $V_1(x) \geq V_2(x)$, $\lim_{x \rightarrow \infty} V_1(x) = \lim_{x \rightarrow \infty} V_2(x) = 0$ e $V_1(x)$ ha n stati legati allora $V_2(x)$ ha almeno n stati legati.

dim: se $V_2(x)$ non ammette stati legati allora lo spettro di $H_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_2(x)$ è costituito dal solo spettro continuo e $E > 0$ poiché $\lim_{x \rightarrow \infty} V_2(x) = 0$ (sono sottintese alcune ipotesi di regolarità).

Per ogni stato $|\psi\rangle$ abbiamo allora

$$\langle \psi | H_2 | \psi \rangle = \sum_{E, E'} \langle \psi | E \rangle \langle E | H_2 | E' \rangle \langle E' | \psi \rangle = \sum_E E |\langle E | \psi \rangle|^2 > 0$$

Sia ψ lo stato legato di V_1 associato all'energia $E_\psi < 0$ (poiché $\lim_{x \rightarrow \infty} V_1(x) = 0$), allora

$$E_\psi = \langle \psi | H_1 | \psi \rangle = \frac{1}{2m} \langle \psi | \vec{p}^2 | \psi \rangle + \int V_1(x) |\psi(x)|^2 dx \geq \frac{1}{2m} \langle \psi | \vec{p}^2 | \psi \rangle + \int V_2(x) |\psi(x)|^2 dx = \langle \psi | H_2 | \psi \rangle > 0$$

assurdo che conclude. Una facile generalizzazione è che se V_1 ammette n stati legati

allora V_2 ha almeno n stati legati.

Teorema del viriale

Da $|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\psi_0\rangle$ segue che $\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \vec{x} \cdot \vec{p} | \psi(t) \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | [H, \vec{x} \cdot \vec{p}] | \psi(t) \rangle$

$$[\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x}), \vec{x} \cdot \vec{p}] = [\frac{\vec{p}^2}{2m}, \vec{x} \cdot \vec{p}] + [V(\vec{x}), \vec{x} \cdot \vec{p}] = [\frac{\vec{p}^2}{2m}, \vec{x}] \cdot \vec{p} + \vec{x} \cdot [\vec{p}, V(\vec{x})]$$

$$\text{inoltre } [\vec{p}^2, x_i] = p_j [p_j, x_i] + [p_j, x_i] p_j = -2i\hbar \delta_{ij} p_j \quad \text{e} \quad [V(x), p_i] = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x_i}$$

$$\text{quindi } \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \vec{x} \cdot \vec{p} | \psi(t) \rangle = 2 \langle \psi(t) | \frac{\vec{p}^2}{2m} | \psi(t) \rangle - \langle \psi(t) | \vec{x} \cdot \vec{\nabla} V | \psi(t) \rangle$$

Sugli stati stazionari i valori medi sono indipendenti dal tempo, quindi $\partial \langle T \rangle = \langle \vec{x} \cdot \vec{\nabla} V \rangle$.

Teorema di Hellmann - Feynman

Supponiamo che la hamiltoniana dipenda dal parametro λ e sia $|\psi(\lambda)\rangle$ l'autostato di $H(\lambda)$ con autovalore $E(\lambda)$. Allora (sottintendiamo λ dappertutto)

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

Bucca sferica infinita

Consideriamo il potenziale $V(r) = \begin{cases} 0 & \text{se } r < a \\ \infty & \text{altrimenti} \end{cases}$

Caso $l=0$ l'eq. di Schrodinger ridotta si scrive $-\frac{\hbar^2}{2m} u'' = E u$ con $R(r) = u(r)/r$, cioè

$$u'' = -k^2 u \quad \text{con} \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \text{e condiz. al contorno} \quad u(0) = u(a) = 0$$

$$u(0) = 0 \Rightarrow u(r) = A \sin(kr)$$

$$u(a) = 0 \Rightarrow \sin(ka) = 0, \quad ka = n\pi \quad \text{con} \quad n \in \mathbb{N} \setminus \{0\} \quad \text{quindi} \quad k = \frac{n\pi}{a}, \quad E_{n,0} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{a} \right)^2$$

Caso $l=1$

Usando la relazione di ricorrenza per le soluzioni dell'equazione di Schrodinger libera abbiamo

$$\psi_{l,l+1} = r^l \frac{d}{dr} (r^{-l} \psi_l) \quad \text{e usando} \quad \psi_0 = A \frac{\sin(kr)}{r} \quad \text{otteniamo}$$

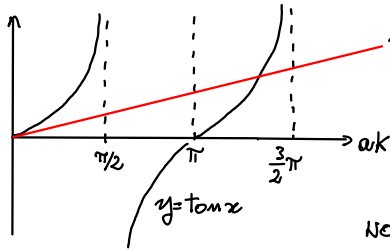
$$\psi_1 = A \frac{d}{dr} \left(\frac{\sin(kr)}{r} \right) = \frac{Ak}{r} \cos(kr) - \frac{A}{r^2} \sin(kr) \quad \text{quindi} \quad u_1(r) = A \left(k \cos(kr) - \frac{1}{r} \sin(kr) \right) \quad (\text{nota che } u_1(0) = 0)$$

$$\text{L'eq. di Schrodinger ridotta è } -\frac{\hbar^2}{2m} u'' + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} u = E u, \quad \text{quindi} \quad u'' + k^2 u - \frac{l(l+1)}{r^2} u = 0 \quad \text{con} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$\nearrow$
 $l(l+1)$ per $l=1$

e si verifica facilmente che $u_1(r)$ soddisfa questa equazione.

$$u(a) = 0 \Rightarrow k \cos(ka) = \frac{1}{a} \sin(ka) \quad \text{quindi} \quad ka = \tan(ka)$$



Anche per $l=1$ ci sono infinite soluzioni $E_{n,1}$ e

la prima sol. è per $ka \approx 4.4934 \dots$ ($\frac{3}{2}\pi \approx 4.712$)

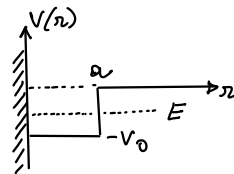
$$\text{e } k_n \rightarrow \frac{(n+3/2)\pi}{a} \quad \text{per } n \rightarrow \infty$$

NOTA: il termine centrifugo diverge per $r \rightarrow 0$, quindi non è mai trascurabile

e i livelli per $l=1$ non tendono ai livelli $l=0$ neppure per $E \rightarrow \infty$.

Bucca sferica finita

Consideriamo il potenziale $V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{se } r < a \\ 0 & \text{se } r > a \end{cases}$

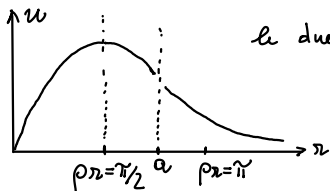


$l=0$

Possiamo supporre che $-V_0 \leq E < 0$. Sull'intervallo $[0, a]$ l'equazione di Schrodinger ridotta è

$$u'' = -\rho^2 u \quad \text{con} \quad \rho^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 + E) \geq 0 \quad \text{e da } u(0) = 0 \quad \text{abbiamo} \quad u(r) = A \sin(\rho r)$$

All'esterno della buca la soluzione è un'esponenziale decrescente e affinché ci sia uno stato



le due soluzioni si devono raccordare in modo C^1 . Condizione necessaria

affinché ciò avvenga è che il seno sia decrescente in $r=a$, quindi $\rho a > \frac{\pi}{2}$

$$\frac{\pi^2}{4a^2} < \rho^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 + E) < \frac{2m}{\hbar^2} V_0 \quad \text{quindi} \quad \boxed{V_0 > \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}}$$

$\uparrow$
 $E < 0$

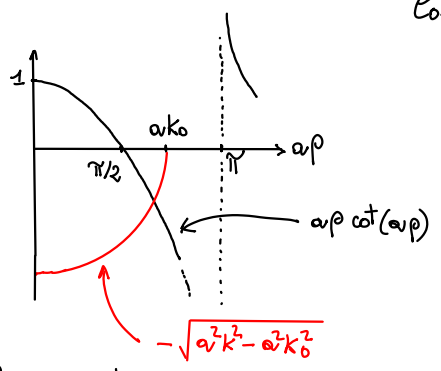
EsPLICITAMENTE la soluzione interna è $u_1 = A \sin(\rho r)$, quella esterna è $u_2(r) = B e^{-kr}$ con $k^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$

quindi le condizioni di raccordo sono

$$\begin{cases} A \sin(\rho a) = B e^{-ka} \\ \rho A \cos(\rho a) = -k B e^{-ka} \end{cases} \Rightarrow \frac{\tan(\rho a)}{\rho a} = -\frac{1}{ka}$$

inoltre $k^2 + \rho^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 + E) = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \equiv k_0^2$ e l'equazione $-ka = \rho a \cot(\rho a)$ si riscrive

$$-\sqrt{a^2 k^2 - a^2 k_0^2} = a \rho \cot(a \rho)$$



Condiz. necessaria e suff. affinché ci sia una soluzione è

$$a k_0 > \pi/2 \Rightarrow \frac{2mV_0}{\hbar^2} > \frac{\pi^2}{4a^2} \Rightarrow V_0 > \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$$

come si era già trovato prima

NOTA: prolungando in modo discreto la soluzione trovata a $x < 0$ troviamo un autostato discreto della buca di lunghezza $2a$ che si estende sull'intervallo $[-a, a]$.

Per una buca 1d ricordiamo che la relazione tra il numero di stati legati N e la lunghezza b è

$$N = \left\lceil \frac{b}{\pi} \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \right\rceil \quad \text{dove } \lceil x \rceil = \text{min. intero maggiore di } x.$$

Se prima autostato è pari, quindi lo stato legato 3° corrisponde a $N=3$ o più grande quindi

$$1 < \frac{b}{\pi} \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \quad \text{e} \quad V_0 > \frac{\pi^2 \hbar^2}{8mb^2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} \quad \text{usando una buca con } b=2a.$$

$l > 0$ Se non esistono stati legati con $l=0$ possono esistere con $l > 0$? No poiché il termine di potenziale centrifugo è definito positivo, quindi $V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} > V(r)$. Usando la stima variazionale del numero di stati legati si vede subito che se ci fossero stati legati con $l > 0$ allora esisterebbero anche stati legati con $l=0$.

Deutone

Stati legati di neutrone e protone ($m_n \approx 939,5 \text{ MeV}/c^2$, $m_p \approx 938,3 \text{ MeV}/c^2$, $m_n - m_p \approx 1.3 \text{ MeV}/c^2$) con energia di legame $B \approx 2.22 \text{ MeV}$ ben descrivibile come buca di profondità $-V_0$ e raggio $a \approx 2 \text{ fm}$ (Bethe Peierls "Quantum theory of the dipole" Proc. Roy. Soc. A, 1935)

$\mu \approx 469 \text{ MeV}/c^2$ e per avere uno stato legato è necessario avere

$$V_0 > \frac{\pi^2 \hbar^2}{8\mu a^2} = \frac{\pi^2 (\hbar c)^2}{8\mu c^2 a^2} \approx \frac{\pi^2}{8} \frac{(197 \text{ MeV fm})^2}{469 \text{ MeV} (2 \text{ fm})^2} \approx 35,5 \text{ MeV} \gg B \quad \text{quindi il deutone è "poco legato"}$$

Usando le equaz. della buca sferica in onda $l=0$ abbiamo $a \rho \cot(a \rho) = -a k$ con $\begin{cases} \rho^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2}(V_0 + E) \\ k^2 = -\frac{2\mu E}{\hbar^2} \end{cases}$

Da $E = -B$ si ha $k \approx 0.232 \text{ fm}^{-1}$ (e^{-kr} diventa piccolo verso $10 \text{ fm} \gg 2 \text{ fm}$, quindi si può effettuare una approx a buca puntiforme $\psi(r) \approx \sqrt{\frac{k}{2\pi}} \frac{e^{-kr}}{r}$ per la funzione d'onda) da cui $a \rho \approx 1.82$ e

$$V_0 = \frac{\hbar^2 \rho^2}{2\mu} - E \approx 36.48 \text{ MeV}. \quad \text{Poiché } a k_0 = \sqrt{\frac{2\mu V_0 a^2}{\hbar^2}} \approx 1.88 < \frac{3}{2} \pi \approx 4.71 \quad \text{c'è un unico stato legato con } l=0.$$

Usando $n \sim 1/k$ e $l=1$ si ha $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \sim \frac{\hbar^2 k^2}{\mu} \approx 2B$ quindi difficile esistano stati legati con $l > 0$.

Consideriamo un potenziale $V(r) = -\frac{\lambda}{r^s}$ con $\lambda > 0$ e una funzione di test $\psi_a(\vec{r}) = N f(\vec{r}/a)$

1) Determinare la dipendenza da "a" di N , $\langle \vec{p}^2 \rangle$ e $\langle V \rangle$

vale per semplicità

$$1 = \int |\psi_a(\vec{r})|^2 d^3r = N^2 \int |f(\vec{r}/a)|^2 d^3r = a^3 N^2 \underbrace{\int |f(\vec{\rho})|^2 d^3\rho}_{\text{indip da } a} \Rightarrow N \propto a^{-3/2}$$

$$\langle \vec{p}^2 \rangle = -\hbar^2 N^2 \int f^*(\vec{r}/a) \nabla^2 f(\vec{r}/a) d^3r = -\hbar^2 N^2 \int f^*(\vec{r}/a) \frac{1}{a^2} \nabla_{\vec{r}/a}^2 f(\vec{r}/a) d^3r = \frac{N^2 a^3}{a^2} \int f^*(\vec{\rho}) \nabla_{\vec{\rho}}^2 f(\vec{\rho}) d^3\rho = \frac{C_1}{a^2} \text{ con } C_1 > 0$$

$$\langle V \rangle = -\lambda N^2 \int f^*(\vec{r}/a) \frac{1}{r^s} f(\vec{r}/a) d^3r = -\lambda N^2 \frac{a^3}{a^s} \int f^*(\vec{\rho}) \frac{1}{\rho^s} f(\vec{\rho}) d^3\rho = -\frac{C_2}{a^s} \text{ con } C_2 > 0.$$

2) Se $s > 2$ la hamiltoniana non è limitata dal basso

$$\langle H \rangle = \frac{C_1}{a^2} - \frac{C_2}{a^s} \text{ con } C_1, C_2 > 0, \text{ quindi } \langle H \rangle \rightarrow -\infty \text{ se } a \rightarrow 0$$

L'energia diminuisce concentrando la funzione d'onda vicino all'origine. Analogia della caduta classica sul centro. In realtà necessitano definire per bene il dominio di H affinché sia autoaggiunta.

3) Se $s = 2$ e esiste uno stato legato con $E < 0$ allora esistono stati legati per ogni $E < 0$.

$$\text{Supponiamo } -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r) - \frac{\lambda}{r^2} \psi(r) = E \psi(r), \text{ allora } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{a^2} \nabla^2 \psi(r) - \frac{\lambda}{(ar)^2} \psi(r) = \frac{E}{a^2} \psi(r)$$

e definendo $ar = \tilde{r}$ abbiamo

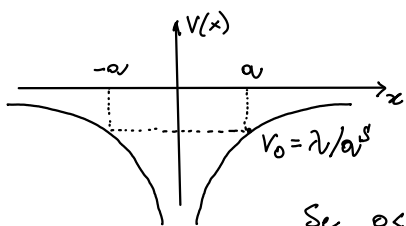
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\tilde{r}}^2 \psi(\tilde{r}/a) - \frac{\lambda}{\tilde{r}^2} \psi(\tilde{r}/a) = \frac{E}{a^2} \psi(\tilde{r}/a)$$

per ogni valore di a , quindi $\psi(\tilde{r}/a)$ è autostato con energia E/a^2 .

4) Se $0 < s < 2$ esistono infiniti stati legati per ogni valore di l

→ $l=0$ problema equivalente a Schrodinger 1d con $V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{se } x < 0 \\ -\lambda/x^s & \text{se } x > 0 \end{cases}$ e i livelli di

questo problema coincidono con i livelli dispari di $-\lambda/x^s$ su $\mathbb{R}$.



Per buca di larghezza $2a$ e profondità V_0 abbiamo

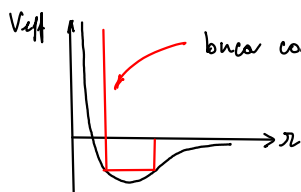
$$\# \text{ stati legati} = \left\lceil \frac{2a}{\pi} \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \right\rceil \text{ dove } [x] = \text{min intero maggiore di } x$$

Se $0 < s < 2$ abbiamo $a^2 V_0 \propto a^{2-s} \rightarrow \infty$ se $a \rightarrow \infty$ quindi il problema

ammette infiniti stati legati e, in particolare, infiniti stati legati dispari.

Di conseguenza esistono infiniti stati legati con $l=0$

→ $l > 0$



bucca con potenziale infinito a sinistra che ha infiniti stati legati

poiché basta nuovamente considerare gli stati dispari della

bucca nasbottata e poiché $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m x^2} \ll |V(x)|$ per x grande

quindi si può usare lo stesso ragionamento del caso con $l=0$ per mostrare che esistono infinite soluzioni

$\langle \frac{1}{r} \rangle$ nell'atomo di idrogeno

1) Il teorema del viriale afferma $2\langle T \rangle = \langle \vec{r} \cdot \vec{\nabla} V \rangle$ sugli autostati: e per $V(r) = -\frac{e^2}{r}$ si ha $\vec{\nabla} V = \frac{e^2}{r^2} \frac{\vec{r}}{r}$ quindi $2\langle T \rangle = -\langle V \rangle$. Abbiamo quindi

$$\langle H \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle = \begin{cases} -\langle T \rangle \\ \frac{1}{2}\langle V \rangle \end{cases} \quad \text{e sull'autostato } n\text{-esimo abbiamo } \langle H \rangle = -\frac{e^2}{2m^2 a} \quad \left(a = \frac{\hbar^2}{m e^2} \right)$$

Quindi $\langle p^2 \rangle = -2m \langle H \rangle = + \frac{m e^2}{m^2} \frac{m e^2}{\hbar^2} = + \frac{\hbar^2}{m^2 a^2}$ (consistente con il valore $\hbar^2/a^2$ trovato per calcolo diretto sul fondamentale)

e $\langle V \rangle = -\frac{e^2}{m^2 a}$ quindi $\langle \frac{1}{r} \rangle = \frac{1}{m^2 a}$

2) dimostrazione alternativa: usiamo il th di Hellmann-Feynman su $H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$ derivando rispetto a " e^2 ": $\frac{\partial H}{\partial e^2} = -\frac{1}{r}$ quindi

$$-\langle \frac{1}{r} \rangle = \langle \frac{\partial H}{\partial e^2} \rangle = \frac{\partial E_n}{\partial e^2} = \frac{\partial}{\partial e^2} \left(-\frac{1}{2m^2} \frac{m e^4}{\hbar^2} \right) = -\frac{1}{m^2} \frac{m e^3}{\hbar^2} = -\frac{1}{m^2 a}$$

3) riotteniamo il viriale da Hellmann-Feynman: deriviamo $H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$ rispetto a m

quindi $\frac{\partial H}{\partial m} = -\frac{\vec{p}^2}{2m^2}$ e quindi $-\frac{1}{m} \langle T \rangle = \langle \frac{\partial H}{\partial m} \rangle = \frac{\partial E_n}{\partial m} = \frac{\partial}{\partial m} \left(-\frac{1}{2m^2} \frac{m e^4}{\hbar^2} \right) = \frac{E_n}{m} = \frac{1}{m} \langle H \rangle$

quindi $\langle H \rangle = -\langle T \rangle$ che è una delle forme del viriale.

4) Usiamo la hamiltoniana del problema radiale $H = \frac{p_r^2}{2m} - \frac{e^2}{r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m r^2}$

se deriviamo rispetto a e^2 troviamo lo stesso risultato del caso (2)

Derivando rispetto a m abbiamo $\frac{\partial H}{\partial m} = -\frac{p_r^2}{2m^2} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m^2 r^2} = -\frac{1}{m} \left(H + \frac{e^2}{r} \right)$ inoltre

$$\frac{\partial E_n}{\partial m} = \frac{E_n}{m} \quad \text{quindi} \quad E_n = -\langle H \rangle - \langle \frac{e^2}{r} \rangle = -E_n + \langle V \rangle \quad \text{quindi} \quad \langle V \rangle = 2E_n = 2\langle H \rangle \text{ viriale.}$$

$\langle \frac{1}{r^2} \rangle$ nell'atomo di idrogeno

Se partiamo da $H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m r^2} - \frac{e^2}{r}$ possiamo calcolare $\langle \frac{1}{r^2} \rangle$ usando la derivata rispetto a l .

NOTA: non basta derivare rispetto a m o $\hbar^2$ perché ci sono anche nel primo termine, risulterebbe il teorema del viriale

NOTA: dal punto di vista dell'equazione radiale non è necessario limitarsi a $l \in \mathbb{N}$ ma si può usare $l \in \mathbb{R}$

Riguardando la dimostrazione della determinazione dei livelli dell'atomo di idrogeno si

vede che definendo $A = \sqrt{\frac{m e^4}{2 \hbar^2 |E|}}$ il punto fondamentale è che affinché la serie converga si deve avere

$$A = m_r + l + 1 \quad \text{dove} \quad m_r \text{ è la massima potenza che entra nel polinomio}$$

dove cui $E = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{a} \frac{1}{(m_r + l + 1)^2}$ dove $a = \frac{\hbar^2}{m e^2}$ e poi si definisce $n \equiv m_r + l + 1$

Abbiamo quindi $\frac{\partial E_m}{\partial l} = \langle \frac{\partial H}{\partial l} \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} (2l+1) \langle \frac{1}{r^2} \rangle$
 $\Rightarrow \frac{e^2}{a} \frac{1}{(m+1)^3} = \frac{e^2}{a} \frac{1}{m^3}$ per l intero, quindi

$$\langle \frac{1}{r^2} \rangle = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^2}{k^2} \frac{1}{(2l+1)} \frac{1}{m^3} = \frac{1}{l+1/2} \frac{1}{m^3 a_B^2}$$

$|\psi(0)|^2$ nell'atomo di idrogeno

Partiamo da $-\frac{\hbar^2}{2m} u'' + V_{eff} u = E u$ con $V_{eff}(r) = V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m r^2}$ e moltiplichiamo per u'

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty \frac{d}{dr} \frac{1}{2} (u')^2 dr + \int_0^\infty V_{eff}(r) \frac{1}{2} \frac{d}{dr} u^2 dr = E \int_0^\infty \frac{d}{dr} \frac{1}{2} u^2 dr = \frac{E}{2} [u^2(\infty) - u^2(0)] = 0$$

Ricordiamo ora che $R(r) \sim r^l$ per $r \rightarrow 0$, quindi $u(r) \sim r^{l+1}$ per $r \rightarrow 0$, quindi $l=0$ è l'unico caso in cui si ha $u'(0) \neq 0$. Per $l=0$ non c'è termine centrifugo e supponiamo $V(r)$ cresce meno di $\frac{1}{r^2}$ nell'origine. Allora si può integrare per parti ottenendo

$$\int_0^\infty V(r) \frac{d}{dr} u^2 dr = - \int_0^\infty u^2 \frac{dV}{dr} dr \text{ e l'equazione trovata in precedenza si riscrive}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} [u'(0)]^2 - \int_0^\infty \frac{dV}{dr} u^2 dr = 0$$

Da $R(r) = \frac{u(r)}{r}$ e $\psi = R Y$ abbiamo $u'(0) = \frac{d}{dr} (r R(r))|_0 = R(0)$, inoltre $Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ quindi

$$|\psi(0)|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R(0) \right|^2 = \frac{1}{4\pi} u'(0)^2 \text{ da cui}$$

$$|\psi(0)|^2 = \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty \frac{dV}{dr} u^2 dr = \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \langle \frac{dV}{dr} \rangle \text{ dove } \langle \rangle = \text{media sullo stato } l=0. \text{ Di conseguenza}$$

nel caso coulombiano $V = -\frac{e^2}{r}$ si ha $|\psi_{n00}(0)|^2 = \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} e^2 \langle n, 0, 0 | \frac{1}{r^2} | n, 0, 0 \rangle = \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} e^2 \frac{2}{n^3 a^2} = \frac{1}{\pi} \frac{1}{n^3 a^3}$
 $a = \hbar^2 / m e^2$

$\langle \frac{1}{r^3} \rangle$ nell'atomo di idrogeno

Da $u_l \sim r^{l+1}$ segue che $\langle \frac{1}{r^3} \rangle$ è finito per $l > 0$. In questo caso integriamo per parti:

$$\int_0^\infty V_{eff} \frac{d}{dr} u^2 dr \text{ non si hanno termini di bordo dovuti al termine centrifugo } (V_{eff} \sim \frac{1}{r^2}, u^2 \sim r^{2l+2}, l > 0)$$

quindi l'equazione generale del punto precedente $\frac{\hbar^2}{2m} [u'(0)]^2 + \int_0^\infty V_{eff} \frac{d}{dr} u^2 dr = 0$

diventa per $l > 0$ $0 = \int_0^\infty \frac{dV_{eff}}{dr} u^2 dr = \int_0^\infty \left(\frac{dV}{dr} - \frac{\hbar^2}{m} \frac{l(l+1)}{r^3} \right) u^2 dr$ quindi nel caso coulombiano

$$\frac{\hbar^2}{m} l(l+1) \langle \frac{1}{r^3} \rangle = e^2 \langle \frac{1}{r^2} \rangle \text{ e dunque infine}$$

$$\langle \frac{1}{r^3} \rangle = \frac{1}{l(l+1)} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{l+1/2} \frac{1}{m^3 a^2} = \frac{1}{l(l+1)(l+1/2)} \frac{1}{m^3 a^3}$$

$\uparrow$
 $1/a$

Dimostrazione pericolosa su Sakurai-Napolitano

Nel libro Sakurai, Napolitano "Meccanica quantistica moderna" è "dimostrata" l'equazione

$$\langle nlm | -\frac{l(l+1)\hbar^2}{m r^3} + \frac{e^2}{r^2} | nlm \rangle = 0 \quad (\text{eq. 5.123 ediz. italiana, eq. 5.3.29 ediz. inglese})$$

che è palesemente falsa per $l=0$.

La "dimostrazione" usa il fatto che $\langle \psi | [H, A] | \psi \rangle = 0$ per qualunque operatore A , se $|\psi\rangle$ è un autostato di H , però questa affermazione è vera solo con alcune ipotesi supplementari sui domini: la pseudodimostrazione è $\langle \psi | (HA - AH) | \psi \rangle = \langle \psi | HA | \psi \rangle - \langle \psi | AH | \psi \rangle = E \langle \psi | A | \psi \rangle - \langle \psi | A | \psi \rangle E = 0$ la dimostra. una è $(\psi, [H, A] \psi) = (\psi, HA \psi) - (\psi, AH \psi) = (\psi, HA \psi) - E(\psi, A \psi)$ e il passaggio finale $(\psi, HA \psi) = (H \psi, A \psi) = E(\psi, A \psi)$ richiede che $A \psi$ sia nel dominio di simmetria dell'operatore H .

Il caso che serve è quello in cui $A = P_r = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r}$ (che si può dimostrare non essere autoaggiunto) le funzioni d'onda ridotte hanno nell'origine l'momento $u_l \sim r^{l+1}$ quindi per $l=0$ si ha $u(0)=0$ ma $u'(0) \neq 0$ mentre per $l>0$ si ha $u(0)=0$ e $u'(0)=0$.

$$\int_0^\infty u_1^* u_2''' dr = u_1^* u_2'' \Big|_0^\infty - \int_0^\infty u_1'^* u_2'' = -u_1'^* u_2' \Big|_0^\infty + \int_0^\infty u_1''^* u_2' dr = u_1'^*(0) u_2'(0) + \int_0^\infty u_1''^* u_2' dr$$

$$\text{quindi} \quad \int_0^\infty u_1^* P_r^3 u_2 = i\hbar^3 u_1'^*(0) u_2'(0) + \int_0^\infty (P_r^2 u_1)^{*} (P_r u_2) dr \quad \text{da cui}$$

$$(u_1, \frac{P_r^2}{2m} P_r u_2) = \frac{i\hbar^3}{2m} u_1'^*(0) u_2'(0) + (\frac{P_r^2}{2m} u_1, P_r u_2)$$

Se termine di energia potenziale non crea problemi e abbiamo quindi per $H = \frac{P_r^2}{2m} + V_{\text{eff}}$

$$(u, H P_r u) = \frac{i\hbar^3}{2m} |u'(0)|^2 + (Hu, P_r u) \neq (Hu, P_r u)$$

Da $u(r) = r R(r)$ abbiamo $u'(0) = R(0)$ e quindi $u'(0) = \sqrt{4\pi} \psi(0)$ da cui

$$\langle \psi | [H, P_r] | \psi \rangle = \frac{i\hbar^3}{2m} 4\pi |\psi(0)|^2 \quad \text{e non} \quad \langle \psi | [H, P_r] | \psi \rangle = 0$$

Usando $[V_{\text{eff}}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial r}] = i\hbar \frac{\partial}{\partial r} V_{\text{eff}}$ otteniamo infine l'equazione corretta

$$\langle \psi | \frac{\partial V_{\text{eff}}}{\partial r} | \psi \rangle = \frac{2\pi\hbar^2}{m} |\psi(0)|^2 \quad \text{che esplicitamente diventa}$$

$$\langle nlm | (-\frac{l(l+1)\hbar^2}{m r^3} + \frac{e^2}{r^2}) | nlm \rangle = \frac{2\pi\hbar^2}{m} |\psi(0)|^2 \quad \text{da cui} \quad l=0 \Rightarrow e^2 \langle \frac{1}{r^2} \rangle = \frac{2\pi\hbar^2}{m} |\psi(0)|^2$$

$$l>0 \Rightarrow \langle (-\frac{l(l+1)\hbar^2}{m r^3} + \frac{e^2}{r^2}) \rangle = 0 \quad \text{che sono i risultati che sono stati ottenuti in precedenza.}$$

Spin 1/2 e applicazioni

Matrici di Pauli e loro proprietà

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{matrici hermitiane e traccia nulla}$$

$\sum_i \sigma_i^{(1/2)} = \frac{1}{2} \sigma_i$ soddisfanno le relazioni di commutazione del momento angolare, quindi $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i \epsilon_{ijk} \sigma_k$

$\sigma_i^2 = \mathbb{1}$ (no somma su i), che insieme a $\text{Tr } \sigma_i = 0$ implica autovalori $+1$ e -1

inoltre $\sum_i \sigma_i^{(1/2)} \cdot \sigma_i^{(1/2)} = \frac{1}{4} \sum_i \sigma_i^2 = \frac{3}{4} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right)$ consistentemente con $j=1/2$

Si verifica facilmente che $\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 0$ se $i \neq j$ quindi la relazione di commutazione fondamentale implica $\sigma_i \sigma_j = i \epsilon_{ijk} \sigma_k$ se $i \neq j$. Poiché $\sigma_i^2 = 1$ il prodotto di due matrici di Pauli soddisfa

$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i \epsilon_{ijk} \sigma_k$ da cui segue che ogni funzione analitica delle matrici σ_j è lineare in σ_j .

Conseguenza immediata: se $\vec{a}, \vec{b} \in \mathbb{R}^3$ si ha (si potrebbe usare anche $\mathbb{C}^3$ ma senza attenzione ai moduli, che sono moduli di vettori ma non dei numeri complessi)

$$(\vec{a} \cdot \vec{\sigma})(\vec{b} \cdot \vec{\sigma}) = a_i b_j \sigma_i \sigma_j = a_i b_j (\delta_{ij} + i \epsilon_{ijk} \sigma_k) = \vec{a} \cdot \vec{b} + i (\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{\sigma}$$

e in particolare $(\vec{a} \cdot \vec{\sigma})^2 = |\vec{a}|^2$, inoltre

$$e^{i \vec{a} \cdot \vec{\sigma}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{i^k}{k!} (\vec{a} \cdot \vec{\sigma})^k = \underbrace{\sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{(2j)!} |\vec{a}|^{2j}}_{k=2j} + i \underbrace{\sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{(2j+1)!} |\vec{a}|^{2j+1}}_{k=2j+1} \frac{\vec{a} \cdot \vec{\sigma}}{|\vec{a}|} = \cos|\vec{a}| + i \frac{\vec{a} \cdot \vec{\sigma}}{|\vec{a}|} \sin|\vec{a}|$$

In particolare la matrice di rotazione di un angolo ϕ attorno a $\hat{n}$ per uno spin $\frac{1}{2}$ è

$$U(R) = e^{-i \phi \hat{n} \cdot \vec{\sigma} / 2} = e^{-\frac{i}{2} \phi \hat{n} \cdot \vec{\sigma}} = \cos(\phi/2) - i (\hat{n} \cdot \vec{\sigma}) \sin(\phi/2)$$

Verifichiamo ora che $\vec{\sigma}$ è un operatore vettoriale: per dimostrazione a tutti gli ordini si usa $e^{\vec{B} A \vec{B}} = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{A^s}{s!}$ con $A^{(0)} = 1$, $A^{(1)} = A$, $A^{(n+1)} = [B, A^{(n)}]$

$$\begin{aligned} U^{-1}(R) \sigma_i U(R) &= e^{i \frac{\phi}{2} \hat{n} \cdot \vec{\sigma}} \sigma_i e^{-i \frac{\phi}{2} \hat{n} \cdot \vec{\sigma}} \simeq \left(1 + i \frac{\phi}{2} \hat{n} \cdot \vec{\sigma} \right) \sigma_i \left(1 - i \frac{\phi}{2} \hat{n} \cdot \vec{\sigma} \right) \simeq \\ &\simeq \sigma_i + i \frac{\phi}{2} n_j \underbrace{(\sigma_j \sigma_i - \sigma_i \sigma_j)}_{2i \epsilon_{jik} \sigma_k} = \sigma_i - i \phi n_j \underbrace{(-i \epsilon_{jik} \sigma_k)}_{(\frac{\phi}{2} \epsilon_{jik})_{ik}} \simeq e^{-i \phi \hat{n} \cdot \vec{\sigma} / 2} \sigma_k = R \sigma_k \end{aligned}$$

Sistemi a due livelli

La più generale matrice hermitiana 2×2 si scrive ($a, b \in \mathbb{R}$, $c \in \mathbb{C}$)

$$\begin{aligned} H &= \begin{pmatrix} a & c^* \\ c & b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{a+b}{2} & 0 \\ 0 & \frac{a-b}{2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{a-b}{2} & 0 \\ 0 & \frac{b-a}{2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \text{Re } c \\ \text{Re } c & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -i \text{Im } c \\ i \text{Im } c & 0 \end{pmatrix} = \\ &= \frac{a+b}{2} + \frac{a-b}{2} \sigma_z + (\text{Re } c) \sigma_x + (\text{Im } c) \sigma_y = \frac{a+b}{2} + \Delta \hat{n} \cdot \vec{\sigma} \end{aligned}$$

dove $\Delta \hat{n} = (\text{Re } c, \text{Im } c, \frac{a-b}{2})$ quindi $\Delta^2 = \frac{(a-b)^2}{4} + |c|^2$

Calcoliamo ora gli autovalori di H : poiché $\text{Tr}(\hat{n} \cdot \vec{\sigma}) = 0$ e $(\hat{n} \cdot \vec{\sigma})^2 = 1$ l'operatore $\hat{n} \cdot \vec{\sigma}$ ha autovalori ± 1 . Sia ora V la matrice che diagonalizza $\hat{n} \cdot \vec{\sigma}$, allora si ha

$$V^+ \hat{m} \cdot \vec{\sigma} V = \begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad e \quad \hat{m} \cdot \vec{\sigma} = V \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} V^+ \quad \text{quindi}$$

$$H = \frac{a+b}{2} + \Delta \hat{m} \cdot \vec{\sigma} = \frac{a+b}{2} + \Delta V \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} V^+ = V \left(\frac{a+b}{2} + \Delta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right) V^+ = V \begin{pmatrix} \frac{a+b}{2} + \Delta & 0 \\ 0 & \frac{a+b}{2} - \Delta \end{pmatrix} V^+$$

e quindi gli autovalori di H sono $\frac{a+b}{2} \pm \Delta = \frac{a+b}{2} \pm \sqrt{\frac{(a-b)^2}{4} + |c|^2}$

Calcoliamo ora gli autovettori di H usando $U^{-1}(R) \vec{\sigma} U(R) = R \vec{\sigma}$

Siano $|\pm 1\rangle$ i due autovettori di σ_z e sia $\hat{M}_z = (0, 0, 1)$, quindi $\hat{M}_z \cdot \vec{\sigma} |\pm 1\rangle = \pm |\pm 1\rangle$ quindi

$$\begin{aligned} U(R) \hat{M}_z \cdot \vec{\sigma} U(R)^{-1} U(R) |\pm 1\rangle &= \pm U(R) |\pm 1\rangle \\ &= \hat{M}_z \cdot U(R) \vec{\sigma} U(R)^{-1} = \hat{M}_z \cdot (R^{-1} \vec{\sigma}) = (R \hat{M}_z) \cdot \vec{\sigma} \end{aligned}$$

quindi definendo $\hat{m} \equiv R \hat{M}_z$ vediamo che $\hat{m} \cdot \vec{\sigma}$ ha autovettori $U(R) |\pm 1\rangle$ con autovalori ± 1 .

Per trovare gli autovettori di $\hat{m} \cdot \vec{\sigma}$ basta quindi trovare la rotazione che manda $\hat{M}_z \rightarrow \hat{m}$.

NOTA: questa rot. non è definita univocamente, ma a meno di una rotazione di asse $\hat{m}$, tuttavia

se $\tilde{R}$ è una rotazione di asse $\hat{m}$ si ha

$$U(\tilde{R}) \hat{m} \cdot \vec{\sigma} U(\tilde{R})^{-1} = \hat{m} \cdot U(\tilde{R}) \vec{\sigma} U(\tilde{R})^{-1} = \hat{m} \cdot (\tilde{R}^{-1} \vec{\sigma}) = (R \hat{m}) \cdot \vec{\sigma} = \hat{m} \cdot \vec{\sigma}$$

quindi se $|\psi\rangle$ è autovettore di $\hat{m} \cdot \vec{\sigma}$ anche $U(R) |\psi\rangle$ è autovettore di $\hat{m} \cdot \vec{\sigma}$ (e differisce da $|\psi\rangle$ solo per una fase)

Sia $\hat{m} = (\cos \alpha \sin \beta, \sin \alpha \sin \beta, \cos \beta)$

allora R si ottiene

1) ruotando attorno a y di angolo β

2) ruotando attorno a z di angolo α

La matrice di rotazione completa è quindi (ricordando $e^{-i\phi \hat{m} \cdot \vec{\sigma}} = \cos(\phi/2) - i(\hat{m} \cdot \vec{\sigma}) \sin(\phi/2)$)

$$\begin{aligned} [\cos(\alpha/2) - i\sigma_z \sin(\alpha/2)] [\cos(\beta/2) - i\sigma_y \sin(\beta/2)] &= \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \beta/2 & -\sin \beta/2 \\ \sin \beta/2 & \cos \beta/2 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} \cos \beta/2 & -e^{-i\alpha/2} \sin \beta/2 \\ e^{i\alpha/2} \sin \beta/2 & e^{i\alpha/2} \cos \beta/2 \end{pmatrix} \equiv U(R) \end{aligned}$$

e gli autovettori sono

$$|+1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad |+\rangle = U(R) |+1\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} \cos \beta/2 \\ e^{i\alpha/2} \sin \beta/2 \end{pmatrix}; \quad |-1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad |-\rangle = U(R) |-1\rangle = \begin{pmatrix} -e^{-i\alpha/2} \sin \beta/2 \\ e^{i\alpha/2} \cos \beta/2 \end{pmatrix}$$

Effettuiamo una verifica diretta per $|\pm\rangle$ usando $\hat{m} \cdot \vec{\sigma} = \cos \alpha \sin \beta \sigma_x + \sin \alpha \sin \beta \sigma_y + \cos \beta \sigma_z =$

$$= \begin{pmatrix} \cos \beta & \cos \alpha \sin \beta - i \sin \alpha \sin \beta \\ \cos \alpha \sin \beta + i \sin \alpha \sin \beta & -\cos \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \beta & \sin \beta e^{-i\alpha} \\ \sin \beta e^{i\alpha} & -\cos \beta \end{pmatrix}$$

$$(\hat{n} \cdot \vec{\sigma}) |+\rangle = \begin{pmatrix} \cos \beta \cos \beta/2 e^{-i\alpha/2} + \sin \beta \sin \beta/2 e^{-i\alpha/2} \\ \sin \beta \cos \beta/2 e^{i\alpha/2} - \cos \beta \sin \beta/2 e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \beta/2 e^{-i\alpha/2} \\ \sin \beta/2 e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} = |+\rangle$$

dove si sono usate le formule

$$\cos(\beta/2) = \cos(\beta - \beta/2) = \cos \beta \cos \beta/2 + \sin \beta \sin \beta/2$$

$$\sin(\beta/2) = \sin(\beta - \beta/2) = \sin \beta \cos \beta/2 - \cos \beta \sin \beta/2$$

Analogamente si verifica che $\hat{n} \cdot \vec{\sigma} |-\rangle = -|-\rangle$

Consideriamo infine l'evoluzione temporale indotta da $H = \frac{a+b}{2} + \Delta \hat{n} \cdot \vec{\sigma}$ dove ricordiamo che

$$\Delta \hat{n} = (\text{Re } \epsilon, \text{Im } \epsilon, \frac{a-b}{2}) \quad \text{quindi} \quad \Delta^2 = \frac{(a-b)^2}{4} + |\epsilon|^2 \quad \text{e se definiamo } \hat{m} = (\cos \alpha \sin \beta, \sin \alpha \sin \beta, \cos \beta)$$

$$\text{si ha } \cos \beta = \frac{a-b}{2\Delta}$$

$$e^{-iHt/\hbar} = e^{-i\frac{a+b}{2\hbar}t} e^{-i\frac{t\Delta}{\hbar} \hat{m} \cdot \vec{\sigma}} = e^{-i\frac{a+b}{2\hbar}t} \left(\cos\left(\frac{t\Delta}{\hbar}\right) - i \hat{m} \cdot \vec{\sigma} \sin\left(\frac{t\Delta}{\hbar}\right) \right)$$

Supponiamo quindi ad esempio di partire dallo stato $|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ autostato di σ_z con autovalore 1;

la probabilità che una misura di σ_z al tempo t ottenga risultato 1 è

$$|\langle + | e^{-iHt/\hbar} | + \rangle|^2 = |\langle + | \left(\cos\left(\frac{t\Delta}{\hbar}\right) - i \hat{m} \cdot \vec{\sigma} \sin\left(\frac{t\Delta}{\hbar}\right) \right) | + \rangle|^2 = \quad \left(\text{solo } \sigma_z \text{ contribuisce} \right)$$

$e m_z = \cos \beta$

$$= \left| \cos\left(\frac{t\Delta}{\hbar}\right) - i \cos \beta \sin\left(\frac{t\Delta}{\hbar}\right) \right|^2 = \cos^2\left(\frac{t\Delta}{\hbar}\right) + \cos^2 \beta \sin^2\left(\frac{t\Delta}{\hbar}\right) = \quad \sin^2(\cdot) = 1 - \cos^2(\cdot)$$

$$= \cos^2 \beta + \cos^2\left(\frac{t\Delta}{\hbar}\right) (1 - \cos^2 \beta) = \cos^2 \beta + \sin^2 \beta \cos^2\left(\frac{t\Delta}{\hbar}\right)$$

$$\text{Ricordiamo che } E_{\pm} = \frac{a+b}{2} \pm \Delta \quad \text{quindi} \quad \Delta = \frac{E_+ - E_-}{2} \quad \text{e} \quad \frac{t\Delta}{\hbar} = \frac{(E_+ - E_-)t}{2\hbar}$$

Metodo di calcolo alternativo (senza matrici di Pauli)

$$e^{-iHt/\hbar} |+\rangle = e^{-iHt/\hbar} \left[|+\rangle \underbrace{\langle + | + \rangle}_{a_+} + |-\rangle \underbrace{\langle - | + \rangle}_{a_-} \right] = e^{-iE_+t/\hbar} a_+ |+\rangle + e^{-iE_-t/\hbar} a_- |-\rangle$$

$$A = \langle + | e^{-iHt/\hbar} | + \rangle = e^{-iE_+t/\hbar} a_+ \underbrace{\langle + | + \rangle}_{a_+^*} + e^{-iE_-t/\hbar} a_- \underbrace{\langle + | - \rangle}_{a_-^*} = |a_+|^2 e^{-iE_+t/\hbar} + |a_-|^2 e^{-iE_-t/\hbar}$$

$$|A|^2 = |a_+|^4 + |a_-|^4 + 2|a_+|^2 |a_-|^2 \underbrace{\text{Re} \left[e^{i(E_+ - E_-)t/\hbar} \right]}_{= \cos\left(\frac{2t\Delta}{\hbar}\right) = \cos^2\left(\frac{t\Delta}{\hbar}\right) - \sin^2\left(\frac{t\Delta}{\hbar}\right) = 2\cos^2\left(\frac{t\Delta}{\hbar}\right) - 1}$$

$$= (|a_+|^2 - |a_-|^2)^2 + 4|a_+|^2 |a_-|^2 \cos^2\left(\frac{t\Delta}{\hbar}\right)$$

Usando le forme di $|+\rangle$ e $|-\rangle$ calcolate prima si ha

$$a_+^* = \langle + | + \rangle = \cos \beta/2 e^{-i\alpha/2} \quad ; \quad a_-^* = \langle + | - \rangle = -\sin \beta/2 e^{-i\alpha/2}$$

$$\text{quindi} \quad |a_+|^2 = \cos^2 \beta/2 \quad \text{e} \quad |a_-|^2 = \sin^2 \beta/2 \quad \text{e infine}$$

$$|a_+|^2 - |a_-|^2 = \cos^2 \beta/2 - \sin^2 \beta/2 = \cos \beta$$

$$4|a_+|^2 |a_-|^2 = 4 \cos^2 \beta/2 \sin^2 \beta/2 = \sin^2 \beta \quad \text{quindi si riottiene l'espressione trovata prima}$$

Densità di probabilità/corrente con spin

La funzione d'onda di una particella con spin i della forma $\psi_a(x)$, con $a \in \{-s, \dots, +s\}$ e consideriamo per semplicità il caso 1-dim. In generale l'eq. di Schrödinger è

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_a = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi_a'' + \sum_b V_{ab}(x) \psi_b(x) \quad \text{con } V_{ab} = V_{ba}^*$$

$$\text{quindi per il c.c. si ha } -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_a^* = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi_a^{*''} + \sum_b V_{ba} \psi_b^*.$$

Sia $\rho_a = |\psi_a|^2 = \psi_a^* \psi_a$ (no somma su a), allora si ha

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_a &= \dot{\psi}_a^* \psi_a + \psi_a^* \dot{\psi}_a = \frac{1}{\hbar} \left(-i \frac{\hbar^2}{2m} \psi_a^{*''} \psi_a + i \sum_b \psi_b^* V_{ba} \psi_a + i \frac{\hbar^2}{2m} \psi_a^* \psi_a'' - i \sum_b \psi_a^* V_{ab} \psi_b \right) = \\ &= -i \frac{\hbar}{2m} (\psi_a^{*''} \psi_a - \psi_a^* \psi_a'') + \frac{i}{\hbar} \sum_b (\psi_b^* V_{ba} \psi_a - \psi_a^* V_{ab} \psi_b) = \\ &= -i \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} (\psi_a^{*'} \psi_a - \psi_a^* \psi_a') + \frac{i}{\hbar} \sum_b (\psi_b^* V_{ba} \psi_a - \psi_a^* V_{ab} \psi_b) = \\ &= -\frac{1}{2m} \frac{\partial}{\partial x} ((p\psi_a)^* \psi_a + \psi_a^* p\psi_a) + \frac{i}{\hbar} \sum_b (\psi_b^* V_{ba} \psi_a - \psi_a^* V_{ab} \psi_b) = \\ &= -\frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x} \text{Re}(\psi_a^* p\psi_a) + \frac{i}{\hbar} \sum_b (\psi_b^* V_{ba} \psi_a - \psi_a^* V_{ab} \psi_b) \end{aligned}$$

Definendo $j_a = \frac{1}{m} \text{Re}(\psi_a^* p\psi_a)$ (no somma su a) si ha allora

$$\sum_a \dot{\rho}_a + \sum_a \frac{\partial}{\partial x} j_a = \frac{i}{\hbar} \sum_{a,b} (\psi_b^* V_{ba} \psi_a - \psi_a^* V_{ab} \psi_b) = 0$$

$\rho_a(x)$ = densità di probabilità di osservare in x una particella con valore a di S_z

$j_a(x)$ = densità di corrente di prob. in x per particella con valore a di S_z

$\rho(x) = \sum_a \rho_a(x)$ = densità di probabilità di osservare in x una particella (indip. dal valore di S_z)

$j(x) = \sum_a j_a(x)$ = densità di corrente di prob. in x (indip. dal valore di S_z)

Scattering di neutroni su campo magnetico

Interazione neutrone campo magnetico: $\mu \vec{\sigma} \cdot \vec{B}$ con $\mu \simeq 1.9 \mu_N$, $\mu_N = \frac{e\hbar}{2mpc} = \text{magnetone nucleare}$

Un fascio di neutroni si muove lungo l'asse $\hat{x}$ con velocità v e supponiamo tutte le

particelle abbiano spin polarizzato lungo l'asse $\hat{x}$ (cioè sono autostati di G_x con autovalore $+1$).

Se fascio incide su una regione di lunghezza L in cui è presente un campo magnetico $\vec{B}$ diretto lungo l'asse $\hat{z}$.

- 1) Trascurando in prima approssimazione qualunque influenza del campo magnetico sul moto dei neutroni, determinare il valore medio $\langle \vec{\sigma} \rangle$ all'uscita dal campo e la probabilità di rilevare un neutrone polarizzato in avanti.

$t = \frac{L}{v}$ = tempo per cui agisce il campo magnetico. Nella base standard di autostati di G_z lo stato di spin iniziale è $|\psi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, inoltre l'operatore di evoluzione temporale è

$$e^{-iHt/\hbar} = e^{-i\frac{\mu_B}{\hbar}\sigma_z t} = e^{-i\Omega t\sigma_z} = \cos(\Omega t) - i\sigma_z \sin(\Omega t) = \begin{pmatrix} e^{-i\Omega t} & 0 \\ 0 & e^{i\Omega t} \end{pmatrix}$$

$\Omega \equiv \frac{\mu_B}{\hbar}$

risultato cui si poteva giungere anche usando il fatto che $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ sono autostati di H .

Abbiamo quindi per lo stato finale

$$|\psi\rangle = U(t)|\psi_+\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\Omega t} & 0 \\ 0 & e^{i\Omega t} \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\Omega t} \\ e^{i\Omega t} \end{pmatrix} \quad \text{e i valori medi sono}$$

$$\langle\psi|\sigma_x|\psi\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{i\Omega t} & e^{-i\Omega t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\Omega t} \\ e^{i\Omega t} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (e^{2i\Omega t} + e^{-2i\Omega t}) = \cos(2\Omega t)$$

$$\langle\psi|\sigma_y|\psi\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{i\Omega t} & e^{-i\Omega t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\Omega t} \\ e^{i\Omega t} \end{pmatrix} = \frac{1}{2i} (e^{2i\Omega t} - e^{-2i\Omega t}) = \sin(2\Omega t)$$

$$\langle\psi|\sigma_z|\psi\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{i\Omega t} & e^{-i\Omega t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\Omega t} \\ e^{i\Omega t} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0$$

quindi la polarizzazione ruota in senso antiorario con velocità angolare 2Ω . La probabilità di trovare il neutrone con la polarizzazione iniziale è $P = |A|^2$ con

$$A = \langle\psi_+|\psi\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\Omega t} \\ e^{i\Omega t} \end{pmatrix} = \cos(\Omega t)$$

- 2) Nel caso generale si calcoli $\langle\vec{\sigma}\rangle$ nello stato finale, la probabilità di attraversamento e la probabilità di trovare il neutrone polarizzato in avanti. Discutere in particolare i due casi di neutroni veloci/lenti.

La funzione d'onda del fascio incidente è $\psi_{in} = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{ikx} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, mentre la hamiltoniana del sistema si scrive $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \frac{d^2}{dx^2} + \begin{pmatrix} \mu_B & 0 \\ 0 & -\mu_B \end{pmatrix}$. L'equazione di Schrödinger è quindi una coppia di equaz. disaccoppiate

$$\psi = \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} \quad \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} f'' + \mu_B f = E f \\ -\frac{\hbar^2}{2m} g'' - \mu_B g = E g \end{cases}$$

Poiché le due equazioni sono disaccoppiate, in pratica si ha una barriera per f e una buca per g . Indichiamo con A_+ e A_- le ampiezze di transizione nei due casi, allora la

funzione d'onda uscente dopo il campo magnetico è $\psi_T = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{ikx} \begin{pmatrix} A_+ \\ A_- \end{pmatrix} \equiv e^{ikx} |\psi_T^{(s)}\rangle$

NOTA: in generale $|\psi_T^{(s)}\rangle$ non è normalizzata, in quanto c'è anche la componente di onda riflessa, che non stiamo usando.

La corrente di probabilità sommata sullo spin è $\vec{j} = \frac{1}{m} \sum_a \text{Re}(\psi_a^* \vec{p} \psi_a)$ e poiché $\langle\psi_+|\psi_+\rangle = 1$

abbiamo per l'onda incidente $j_{im} = \frac{\hbar k}{m}$, mentre per l'onda trasmessa abbiamo

$j_T = \frac{\hbar k}{m} \frac{|A_+|^2 + |A_-|^2}{2}$ e la conservazione della corrente $j_{im} = j_T + j_R$ impone $j_T \leq j_{im}$, quindi la probabilità di attraversamento è $P = \frac{j_T}{j_{im}} = \frac{|A_+|^2 + |A_-|^2}{2} \leq 1$.

La normalizzazione della parte spinoriale di $|\psi_T^{(s)}\rangle$ è $\langle \psi_T^{(s)} | \psi_T^{(s)} \rangle = \frac{|A_+|^2 + |A_-|^2}{2}$ e per la polarizzazione dei neutroni trasmessi si ottiene

$$\langle \sigma_x \rangle = \frac{\langle \psi_T^{(s)} | \sigma_x | \psi_T^{(s)} \rangle}{\langle \psi_T^{(s)} | \psi_T^{(s)} \rangle} = \frac{A_+^* A_- + A_-^* A_+}{|A_+|^2 + |A_-|^2} \quad \text{e analogamente}$$

$$\langle \sigma_y \rangle = -i \frac{A_+^* A_- - A_-^* A_+}{|A_+|^2 + |A_-|^2} \quad ; \quad \langle \sigma_z \rangle = \frac{|A_+|^2 - |A_-|^2}{|A_+|^2 + |A_-|^2}$$

La probabilità che una particella che ha attraversato il campo magnetico abbia spin polarizzato lungo $\hat{x}$ è (ricordiamo $\langle \psi_+ | \psi_+ \rangle = 1$)

$$P_{+rel} = \frac{1}{\langle \psi_T^{(s)} | \psi_T^{(s)} \rangle} |\langle \psi_+ | \psi_T^{(s)} \rangle|^2 = \frac{2}{|A_+|^2 + |A_-|^2} \frac{|A_+ + A_-|^2}{4}$$

mentre la probabilità che un neutrone ha di attraversare il campo magnetico e essere alla fine polarizzato lungo $\hat{x}$ è

$$P_+ = P P_{+rel} = \frac{1}{4} |A_+ + A_-|^2$$

$$\text{NOTA: } P_{+rel} = \frac{|A_+|^2 + |A_-|^2 + 2 \operatorname{Re}(A_+^* A_-)}{2(|A_+|^2 + |A_-|^2)} \leq \frac{(|A_+| + |A_-|)^2}{2(|A_+|^2 + |A_-|^2)} = \frac{(1+\xi)^2}{2(1+\xi^2)} \leq 1 \quad \text{con } \xi = \frac{|A_-|}{|A_+|}$$

$$f(\xi) = \frac{(1+\xi)^2}{2(1+\xi^2)}, \quad f(0) = \lim_{\xi \rightarrow 0} f(\xi) = \frac{1}{2}, \quad f'(\xi) = \frac{1+\xi}{2(1+\xi^2)} - \xi \frac{(1+\xi)^2}{(1+\xi^2)^2} = \frac{1+\xi}{2(1+\xi^2)} \left(1 - \frac{2\xi}{1+\xi^2}\right) = \frac{(1+\xi)(\xi-1)^2}{2(1+\xi^2)^2}$$

quindi $\xi=1$ è l'unico massimo di $f(\xi)$ e $f(1)=1$.

Per una barriera attrattiva di lunghezza L e profondità $V_0 > 0$ si ha

$$A_- = \frac{4kq e^{iL(q-k)}}{(k+q)^2 - (q-k)^2 e^{2iLq}} \quad \text{dove } q = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\hbar^2 k^2 + 2mV_0} = k \sqrt{1 + \frac{V_0}{E}}$$

Consideriamo $V_0 = \mu B$ e $E \gg V_0$ (limite di neutroni veloci), allora

$$q \simeq k \left(1 + \frac{1}{2} \frac{V_0}{E}\right) = k + \frac{1}{2} k \frac{\mu B}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}} = k + \frac{m \Omega}{\hbar k} = k + \frac{\Omega}{v} \quad \Omega = \frac{\mu B}{\hbar}$$

quindi $A_- \simeq \frac{4k^2 e^{iL\Omega/v}}{4k^2} = e^{i\Omega t}$. Nel limite $E \gg V_0$ per calcolare A_+ basta sostituire

$V_0 \rightarrow -V_0$ quindi si trova $A_+ \simeq e^{-i\Omega t}$ e quindi

$$\psi_T \simeq \frac{1}{\sqrt{2}} e^{ikx} \begin{pmatrix} e^{-i\Omega t} \\ e^{i\Omega t} \end{pmatrix} \quad \text{consistentemente con quanto visto nel punto (1).}$$

Nel caso $E \ll V_0$ (limite di neutroni lenti) A_+ decade esponenzialmente con L , mentre

A_- è dato dalla formula generale di prima con $q \simeq \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mV_0}$, quindi si ha

$$\psi_+ \simeq e^{ikx} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ A_- \end{pmatrix} \quad \text{e il fascio uscente è completamente polarizzato lungo } -\hat{z}, \text{ poiché}$$

le componenti polarizzate lungo $+\hat{z}$ sono state riflesse

Consideriamo un sistema con due spin 1/2, la cui dinamica sia governata dalla hamiltoniana $H = \alpha \vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} = \frac{\alpha}{4} \vec{\sigma}^{(1)} \cdot \vec{\sigma}^{(2)}$, dove l'apice (1), (2) serve per indicare su quale particella agisce l'operatore. Determinare autovalori e autovettori del sistema.

Una base per lo spazio degli stati della particella 1 è $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ che sono tradizionalmente indicati con la notazione $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$. La stessa base può essere usata anche per lo spazio di Hilbert della seconda particella.

Una base possibile per lo spazio di Hilbert completo del sistema è $|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$ dove la prima freccia si riferisce alla prima particella, la seconda alla seconda (in pratica $|\uparrow\uparrow\rangle$ è una notazione sintetica per $|\uparrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2$)

Scriviamo ora la hamiltoniana in questa base, ricordando che $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$:

in generale $\langle ij | H | kl \rangle = \frac{\alpha}{4} \sigma_{ik}^{a(1)} \sigma_{jl}^{a(2)}$ (nota $\langle i | H | j \rangle = H_{ij}$ $i = \text{indice di riga}$ $j = \text{indice di colonna}$)

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma_{\uparrow\uparrow}^x \sigma_{\uparrow\uparrow}^x = 1 \cdot 1 \quad (\text{contribuisce solo } \sigma_z) \\ \sigma_{\uparrow\uparrow}^x \sigma_{\downarrow\uparrow}^x = 0 \\ \sigma_{\downarrow\uparrow}^x \sigma_{\uparrow\uparrow}^x = 0 \\ \sigma_{\downarrow\uparrow}^x \sigma_{\downarrow\uparrow}^x = 1 \cdot 1 + i \cdot i = 0 \quad (\text{contribuisce } \sigma_x, \sigma_y) \end{array} \right.$$

$$H = \frac{\alpha}{4} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{matrix} |\uparrow\uparrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\rangle \\ |\downarrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{matrix}$$

questi determinano la prima colonna

$$\sigma_{\uparrow\uparrow}^y \sigma_{\downarrow\downarrow}^y = -1 \quad (\text{contribuisce solo } \sigma_z)$$

$$\sigma_{\downarrow\downarrow}^y \sigma_{\downarrow\downarrow}^y = 1 \quad (\text{contribuisce solo } \sigma_z)$$

$$\sigma_{\downarrow\uparrow}^y \sigma_{\uparrow\downarrow}^y = 1 \cdot 1 + i(-i) = 2 \quad (\text{contribuisce } \sigma_x, \sigma_y)$$

H ha due autovalori $\frac{\alpha}{4}$ associati a $|\uparrow\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\downarrow\rangle$, per trovare gli altri diagonalizz.

$$H = \begin{pmatrix} -1 & 2 \\ 2 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{tr} H = -2 \quad \det H = 3, \quad \text{quindi autovalori } -3 \text{ e } +1$$

$$\lambda = +1: \quad H \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}; \quad -a + 2b = a, \quad b = a \quad |+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$$\lambda = -3: \quad H \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = -3 \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}; \quad -a + 2b = -3a, \quad b = -a \quad |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

quindi lo spettro di H è

$$\frac{\alpha}{4} \text{ deg}=3, \quad |\uparrow\uparrow\rangle, \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}, |\downarrow\downarrow\rangle \quad (S_{\text{TOT}} = 1)$$

$$-\frac{3}{4}\alpha \text{ deg}=1, \quad \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \quad (S_{\text{TOT}} = 0)$$

$$H = \alpha \vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} = \frac{\alpha}{2} \left(\vec{S}_{\text{TOT}}^2 - \vec{S}^{(1)2} - \vec{S}^{(2)2} \right) = \begin{matrix} \xrightarrow{S_{\text{TOT}}=1} \frac{\alpha}{2} \left(2 - \frac{3}{2} \right) = \frac{\alpha}{4} \\ \xrightarrow{S_{\text{TOT}}=0} \frac{\alpha}{2} \left(-\frac{3}{2} \right) = -\frac{3}{4}\alpha \end{matrix}$$

Generalità

Descrizione dello stato di un sistema tramite raggio nello spazio di Hilbert è quella più completa ma deve essere abbandonata in due casi "tipici"

- 1) un sistema è preparato usando un protocollo in cui intervengono probabilità classiche: ad es. in un sistema di spin $1/2$ si può avere uno stato preparato con prob. $1/2$ in $|↑\rangle$ e con prob. $1/2$ in $|↓\rangle$ NOTA: questo è una prob. di preparazione classica, non quantistica.
- 2) si osserva un sottoinsieme di un sistema composto: ad esempio in un sistema di due spin si osserva solo uno spin.

NOTA: in fisica statistica si rientra sia nel caso 1 che nel caso 2 a seconda dei punti di vista: 1) gli stati hanno il peso statistico di Gibbs 2) il sistema è collegato ad un termostato e quando si conosce solo il sistema emerge la distribuzione di Gibbs.

Caso "standard"

Sia $|\psi\rangle$ il raggio che rappresenta lo stato di un sistema e O un osservabile, allora si può scrivere

$$\langle\psi|O|\psi\rangle = \sum_k \langle\psi|k\rangle\langle k|O|\psi\rangle = \sum_k \langle k|O|\psi\rangle\langle\psi|k\rangle = \text{Tr}(O\rho) \quad \text{dove } \rho = |\psi\rangle\langle\psi| \text{ è la matrice densità (o operatore densità o operatore statistico)}$$

$$\text{Si ha ovviamente } \rho^\dagger = \rho, \quad \text{Tr}(\rho) = \sum_k \langle k|\psi\rangle\langle\psi|k\rangle = \langle\psi|\sum_k |k\rangle\langle k|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle = 1$$

$$\text{e se } |\varphi\rangle \text{ è un altro vettore } \langle\varphi|\rho|\varphi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle\langle\psi|\varphi\rangle = |\langle\varphi|\psi\rangle|^2 \geq 0 \quad (\text{spesso si scrive } \rho \geq 0)$$

$$\text{infine } \rho^2 = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = \rho \quad \text{NOTA: } \rho \text{ è indipendente dalla fase di } |\psi\rangle$$

Caso 1) "prob. classica"

Sia $|m\rangle$ una base ortonormale e supponiamo di selezionare con prob. P_m lo stato $|m\rangle$. Il valore medio dell'operatore O sull'ensemble così costituito è

$$\langle O \rangle = \sum_m P_m \langle m|O|m\rangle = \sum_{m,k} P_m \langle m|k\rangle\langle k|O|m\rangle = \sum_k \langle k|O\left(\sum_m P_m |m\rangle\langle m|\right)|k\rangle = \text{Tr}(O\rho) \quad \text{con } \rho = \sum_m P_m |m\rangle\langle m|$$

$$\text{Si vede subito che } \rho^\dagger = \rho, \text{ inoltre } \text{Tr}(\rho) = \sum_{k,m} P_m |\langle k|m\rangle|^2 = \sum_m P_m = 1 \quad \text{per la condiz. di normalizz. di } P_m.$$

$$\text{Si ha anche } \langle\varphi|\rho|\varphi\rangle = \sum_m P_m \langle\varphi|m\rangle\langle m|\varphi\rangle = \sum_m P_m |\langle\varphi|m\rangle|^2 \geq 0. \text{ Rispetto al caso "standard" si ha però}$$

$$\rho^2 = \sum_m P_m |m\rangle\langle m| \sum_k P_k |k\rangle\langle k| = \sum_m P_m^2 |m\rangle\langle m| \neq \rho \quad \text{a meno che non sia } P_m = 0, 1 \text{ per ogni } m,$$

$$\text{che insieme a } \sum_m P_m = 1 \text{ implica che esiste un j.t.c. } P_m = \delta_{mj} \text{ e quindi } \rho = |j\rangle\langle j|.$$

Si definisce op. densità in generale un ρ t.c. $\rho^\dagger = \rho$, $\text{Tr}\rho = 1$ e $\rho \geq 0$ e i valori medi si

calcolano usando $\langle O \rangle = \text{Tr}(O\rho)$. Se esiste un vettore $|\psi\rangle$ t.c. $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ allora si dice

che ρ descrive uno stato puro, altrimenti uno stato misto.

ρ descrive uno stato puro $\Leftrightarrow \rho^2 = \rho$

$\Rightarrow$ ovvio, vedi sopra

$\Leftarrow$ Poiché $\rho^\dagger = \rho$ esiste una base che diagonalizza ρ , sia essa $\{|m\rangle\}$. Poiché $\rho \geq 0$, gli elementi diagonali sono ≥ 0 e li indichiamo con P_m . Poiché $\text{tr}(\rho) = 1$ si ha $\sum_m P_m = 1$ (quindi in particolare $0 \leq P_m \leq 1$). Poiché $\rho^2 = \rho$ si ha $P_m^2 = P_m$, quindi $P_m = 0, 1$ e da $\sum_m P_m = 1$ segue che un solo P_m è uguale a 1, mentre tutti gli altri sono nulli, quindi $P_m = \delta_{jm}$ e $\rho = |j\rangle\langle j|$ è puro. In modo analogo si vede che ρ descrive uno stato puro $\Leftrightarrow \text{tr}(\rho^2) = 1$.

Case 2) "sottoinsieme"

Consideriamo un sistema composto e siano $|a_i\rangle$ e $|b_j\rangle$ due basi per gli spazi di Hilbert dei due sottosistemi. Sia $|\psi\rangle = \sum_{ij} \psi_{ij} |a_i\rangle |b_j\rangle$ un generico stato (ovviamente $\sum_{ij} |\psi_{ij}|^2 = 1$) e consideriamo un operatore O_a che agisce solo sul sottosistema "a" (più correttamente si dovrebbe scrivere $O_a \otimes \mathbb{1}_b$). Si ha

$$\begin{aligned} \langle \psi | O_a | \psi \rangle &= \sum_{ijmn} \psi_{ij}^* \langle a_i | \langle b_j | O_a | a_m \rangle | b_n \rangle \psi_{mn} = \sum_{ijmn} \psi_{ij}^* \psi_{mn} \langle a_i | O_a | a_m \rangle \delta_{jn} = \\ &= \sum_{ijm} \psi_{ij}^* \psi_{mj} \langle a_i | O_a | a_m \rangle = \sum_{im} \langle a_i | O_a | a_m \rangle \underbrace{\sum_j \psi_{mj} \psi_{ij}^*}_{\equiv \rho_{mi}} = \\ &= \text{Tr}(O_a \rho) \quad \text{con } \rho = \sum_{im} \rho_{mi} |m\rangle\langle i| \end{aligned}$$

Da $\rho_{mi} = \sum_j \psi_{mj} \psi_{ij}^*$ segue ovviamente $\rho_{im}^* = \sum_j \psi_{ij}^* \psi_{mj} = \rho_{mi}$ quindi $\rho^\dagger = \rho$, inoltre

$$\sum_{mi} \psi_{mi}^* \rho_{mi} \psi_i = \sum_{mij} \psi_{mi}^* \psi_{mj} \psi_i \psi_{ij}^* = \sum_j \left(\sum_m \psi_{mj} \psi_{mj}^* \right) \left(\sum_i \psi_i \psi_{ij}^* \right) = \sum_j \psi_j^* \psi_j \geq 0$$

$$\text{tr}(\rho) = \sum_{ij} \psi_{ij} \psi_{ij}^* = \sum_{ij} |\psi_{ij}|^2 = \langle \psi | \psi \rangle = 1$$

quindi siamo arrivati di nuovo a trovare una matrice densità.

Se lo stato di partenza del sistema composto è descritto dalla matrice densità ρ si possono ripetere i passaggi precedenti, passando dalla matrice densità alla matrice densità ridotta ρ_a

$$\begin{aligned} \langle O_a \rangle &= \text{Tr}(O_a \rho) = \sum_{ij} \langle a_i | b_j | O_a \rho | a_i b_j \rangle = \sum_{ijmn} \underbrace{\langle a_i b_j | O_a | a_m b_n \rangle}_{\equiv \langle a_i | O_a | a_m \rangle \langle b_j | b_n \rangle} \langle a_m b_n | \rho | a_i b_j \rangle = \\ &= \sum_{im} \langle a_i | O_a | a_m \rangle \underbrace{\sum_j \langle a_m b_j | \rho | a_i b_j \rangle}_{\equiv \langle a_m | \rho_a | a_i \rangle} \\ &= \text{Tr}(O_a \rho_a) \end{aligned}$$

matrice densità ridotta di "a" ottenuta tramite traccia parziale sugli stati di "b"

Verifichiamo che la matrice densità ridotta soddisfa tutti i requisiti di una matrice densità

Da $\rho_{mi}^{(a)} = \sum_j \langle a_m b_j | \rho | a_i b_j \rangle$ segue $\rho_{im}^{(a)*} = \sum_j \langle a_i b_j | \rho | a_m b_j \rangle^* = \sum_j \langle a_m b_j | \rho | a_i b_j \rangle = \rho_{mi}^{(a)}$
quindi $[\rho^{(a)}]^\dagger = \rho^{(a)}$

$\rho^{(a)\dagger} = \rho^{(a)}$

$$\text{Tr}(\rho^{(A)}) = \sum_i \rho_{ii}^{(A)} = \sum_{ij} \langle a_i b_j | \rho | a_i b_j \rangle = \text{Tr}(\rho) = 1$$

↑
traccia sul sistema completo

$$\begin{aligned} \sum_{mi} v_m^* \rho_{mi}^{(A)} v_i &= \sum_{mij} v_m^* \langle a_m b_j | \rho | a_i b_j \rangle v_i = \sum_j \left(\sum_m v_m^* \langle a_m b_j | \right) \rho \left(\sum_i v_i | a_i b_j \rangle \right) = \\ &= \sum_j \langle \psi_j | \rho | \psi_j \rangle \geq 0 \quad \text{dove } |\psi_j\rangle = \sum_i v_i | a_i b_j \rangle \text{ è uno stato del sistema} \\ &\quad \text{completo e si è usato } \rho \geq 0 \end{aligned}$$

Se uno stato è fattorizzabile $|\psi\rangle = |a_1\rangle |b_1\rangle$ allora la matrice densità ottenuta riducendosi al sottosistema $|a\rangle$ descrive uno stato puro. Nei passaggi precedenti basta usare $\mathcal{U}_{ij} = \delta_{i1} \delta_{j1}$ per arrivare a $\rho = |a_1\rangle \langle a_1|$ che è ovviamente puro. Questo non è però vero per stati generici.

Consideriamo ad esempio lo stato $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle)$, allora si ha

$$\rho = |\psi\rangle \langle \psi| = \frac{1}{2} (|\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle) (\langle\uparrow\uparrow| - \langle\uparrow\downarrow|) = \frac{1}{2} (|\uparrow\uparrow\rangle \langle\uparrow\uparrow| + |\uparrow\downarrow\rangle \langle\uparrow\downarrow| - |\uparrow\uparrow\rangle \langle\uparrow\downarrow| - |\uparrow\downarrow\rangle \langle\uparrow\uparrow|)$$

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} |\uparrow\uparrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\rangle \\ |\downarrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{matrix}$$

$|\uparrow\uparrow\rangle \quad |\uparrow\downarrow\rangle \quad |\downarrow\uparrow\rangle \quad |\downarrow\downarrow\rangle$

$$\text{Poiché } \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

ρ soddisfa tutte le proprietà trovate prima.

Consideriamo la matrice densità ridotta del sistema costituito dal primo spin:

$$\rho_{mi}^{(A)} = \sum_j \langle a_m b_j | \rho | a_i b_j \rangle \quad \text{quindi}$$

$$\rho_{\uparrow\uparrow}^{(A)} = \langle\uparrow\uparrow|\rho|\uparrow\uparrow\rangle + \langle\uparrow\downarrow|\rho|\uparrow\uparrow\rangle = \frac{1}{2}; \quad \rho_{\uparrow\downarrow}^{(A)} = \langle\uparrow\uparrow|\rho|\downarrow\uparrow\rangle + \langle\uparrow\downarrow|\rho|\downarrow\uparrow\rangle = 0$$

$$\rho_{\downarrow\uparrow}^{(A)} = \langle\downarrow\uparrow|\rho|\uparrow\uparrow\rangle + \langle\downarrow\downarrow|\rho|\uparrow\uparrow\rangle = 0; \quad \rho_{\downarrow\downarrow}^{(A)} = \langle\downarrow\uparrow|\rho|\downarrow\uparrow\rangle + \langle\downarrow\downarrow|\rho|\downarrow\downarrow\rangle = \frac{1}{2}$$

$$\text{quindi } \rho^{(A)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{matrix} |\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \end{matrix} \quad [\rho^{(A)}]^2 = \frac{1}{2} \rho^{(A)} \quad \text{quindi } \rho^{(A)} \text{ non descrive uno stato puro}$$

Purificazione ha caratterizzazione degli stati misti come stati in cui è stata persa informazione osservando solo un sottosistema è "generale": data una qualunque ρ su H si può costruire uno stato puro $|\psi\rangle$ su $H \otimes H$ tale che la riduzione al primo sottosistema di $|\psi\rangle \langle \psi|$ è ρ :

possiamo supporre senza perdita di generalità ρ diagonale, $\rho = \sum p_m |m\rangle \langle m|$, sia ora

$|\psi_m\rangle$ una qualunque altra base ortonormale e consideriamo in $H \otimes H$ lo stato $(\theta_m \in \mathbb{R})$

$$|\psi\rangle = \sum_m \sqrt{p_m} e^{i\theta_m} |m\rangle |\psi_m\rangle, \quad \text{quindi } \mathcal{U}_{ij} = \sqrt{p_j} e^{i\theta_j} \delta_{ij} \quad \text{con le notazioni precedenti.}$$

Si ha dunque

$$\rho_{mi} = \sum_j \mathcal{U}_{mj} \mathcal{U}_{ij}^* = \sum_j \sqrt{p_j} e^{i\theta_j} \delta_{mj} \sqrt{p_j} e^{-i\theta_j} \delta_{ij} = p_m \delta_{mi}$$

da cui si vede che $|\psi\rangle$ è una purificazione di ρ .

Sistema a 2 livelli

Per un sistema a due livelli è facile parametrizzare la forma generale della matrice densità:

da $\rho^\dagger = \rho$ segue che $\rho = a\mathbb{1} + \vec{b} \cdot \vec{\sigma}$ con $a, b_i \in \mathbb{R}$. Da $\text{tr} \rho = 1$ segue $a = \frac{1}{2}$, quindi ridefinendo le costanti: $\rho = \frac{1}{2}(1 + \vec{b} \cdot \vec{\sigma})$

Affinché ρ sia una matrice non negativa entrambi i suoi autovalori devono essere non negativi

inoltre $\text{autoval}(\vec{b} \cdot \vec{\sigma}) = 1 + \text{autoval}(\vec{b} \cdot \vec{\sigma})$ e da $(\vec{b} \cdot \vec{\sigma})^2 = \vec{b}^2$ e $\text{tr}(\vec{b} \cdot \vec{\sigma}) = 0$

segue che $\text{autoval}(\vec{b} \cdot \vec{\sigma}) = \pm |\vec{b}|$ quindi si deve avere $|\vec{b}| \leq 1$

Affinché ρ descriva uno stato puro si deve avere $\rho^2 = \rho$ e si ha

$$\rho^2 = \frac{1}{4}(1 + \vec{b} \cdot \vec{\sigma})^2 = \frac{1}{4}(1 + 2\vec{b} \cdot \vec{\sigma} + b_i b_j \sigma_i \sigma_j) = \frac{1}{4}(1 + |\vec{b}|^2 + 2\vec{b} \cdot \vec{\sigma}) = \frac{1}{2}\left(\frac{1+|\vec{b}|^2}{2} + \vec{b} \cdot \vec{\sigma}\right)$$

quindi si ha uno stato puro se $|\vec{b}| = 1$. $\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i \epsilon_{ijk} \sigma_k$

Il significato del vettore $\vec{b}$ è quello di una polarizzazione media

$$\langle \sigma_k \rangle = \text{tr}(\sigma_k \rho) = \frac{1}{2} b_i \text{tr}(\sigma_k \sigma_i) = \frac{1}{2} b_i 2\delta_{ik} = b_k$$

e gli stati puri corrispondono agli stati completamente polarizzati lungo una direzione.

Evoluzione temporale

Per lo stato puro $|\psi\rangle$ l'evoluzione temporale è governata da $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = H |\psi\rangle$

e prendendo l'hermitiana coniugata si ha $-i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi| = \langle \psi| H$

quindi per la matrice densità che descrive uno stato puro $\rho = |\psi\rangle \langle \psi|$ si ha

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho = \left(i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle\right) \langle \psi| + |\psi\rangle \left(i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi|\right) = H |\psi\rangle \langle \psi| - |\psi\rangle \langle \psi| H = H\rho - \rho H$$

quindi $i\hbar \frac{d}{dt} \rho = [H, \rho]$

NOTA: questa equazione ricorda quella che governa l'evoluzione degli operatori in rappresentazione

di Heisenberg ma c'è un segno di differenza $O_H(t) = e^{i\frac{Ht}{\hbar}} O e^{-i\frac{Ht}{\hbar}}$ quindi $i\hbar \frac{d}{dt} O_H = -[H, O_H]$.

Per stati misti, vista l'interpretazione di misture con probabilità classica di stati puri, si assume valga la stessa equazione di evoluzione.

Se la Hamiltoniana di un sistema composto è fattorizzata ($H = H_a + H_b$ con $[H_a, H_b] = 0$) allora

$$\text{l'evoluzione dello stato } |\psi\rangle = \sum_{ij} \psi_{ij} |a_i\rangle |b_j\rangle \quad \text{è} \quad |\psi(t)\rangle = \sum_{ij} \psi_{ij} e^{-iE_a^i t/\hbar} e^{-iE_b^j t/\hbar} |a_i\rangle |b_j\rangle$$

e la matrice densità $\rho^{(a)}$ diventa

$$\rho_{mi}^{(a)}(t) = \sum_k \psi_{mk}(t) \psi_{ik}^*(t) = \sum_k \psi_{mk} \psi_{ik}^* e^{i(E_i^a - E_m^a)t/\hbar} \quad \text{e quindi si ha}$$

$$\rho^{(a)}(t) = \sum_{im} \rho_{mi}^{(a)}(t) |a_m\rangle \langle a_i| = \sum_{imk} \psi_{mk} \psi_{ik}^* e^{i(E_i^a - E_m^a)t/\hbar} |a_m\rangle \langle a_i| =$$

$$= e^{-iH_0 t/\hbar} \left(\sum_{i,m,k} \psi_{mk} \psi_{ik}^* |a_m\rangle \langle a_i| \right) e^{iH_0 t/\hbar} = e^{-iH_0 t/\hbar} \rho^{(a)}(t=0) e^{iH_0 t/\hbar}$$

e quindi $i\hbar \frac{d}{dt} \rho^{(a)} = [H_0, \rho^{(a)}]$

Questo non è vero se $H = H_a + H_b + H_{ab}$ e $[H_a, H_b] \neq 0$. In queste cose servono tecniche sviluppate per descrivere l'evoluzione di sistemi aperti.

Evoluzione temporale della matrice densità per sistemi a due livelli: $\rho = \frac{1}{2} (1 + \vec{I} \cdot \vec{\sigma})$ e

$$H = A + \vec{C} \cdot \vec{\sigma}, \text{ quindi } i\hbar \dot{\rho} = \frac{i\hbar}{2} \vec{I} \cdot \vec{\sigma}, \text{ inoltre}$$

$$[H, \rho] = [A + C_j \sigma_j, \frac{1}{2} + \frac{1}{2} P_i \sigma_i] = \frac{1}{2} C_j P_i [\sigma_j, \sigma_i] = C_j P_i i \epsilon_{jik} \sigma_k$$

$$\text{quindi } \frac{\hbar}{2} \dot{P}_k \sigma_k = \epsilon_{jik} C_j P_i \sigma_k, \text{ da cui } \dot{\vec{P}} = \frac{2}{\hbar} \vec{C} \times \vec{P} = \vec{\Omega} \times \vec{P} \quad \text{con } \vec{\Omega} = \frac{2}{\hbar} \vec{C}$$

Matrice densità termica

L'ensemble canonico a temperatura T è descritto dalla matrice densità

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Z(\beta)} \quad \text{con } \beta = \frac{1}{k_B T} \quad \text{e} \quad Z(\beta) = \text{Tr}(e^{-\beta H}).$$

Poiché $\beta \in \mathbb{R}$ e H è hermitiana si ha $\rho^\dagger = \rho$, inoltre poiché $e^x > 0$ se $x \in \mathbb{R}$ si ha anche $\rho \geq 0$ (si vede particolarmente bene nella base in cui H è diagonale) e si ha per costruzione anche $\text{Tr}(\rho) = 1$. Ovviamente $\rho^2 \neq \rho$ a meno che H non sia banale.

$$\text{Ad esempio per un oscillatore armonico 1d si ha } \rho = \frac{\sum_{m=0}^{\infty} e^{-\beta \hbar \omega (m + \frac{1}{2})} |m\rangle \langle m|}{\sum_{k=0}^{\infty} e^{-\beta \hbar \omega (k + \frac{1}{2})}}$$

e per uno spin $\frac{1}{2}$ in campo magnetico esterno diretto lungo $\hat{z}$ si ha $H = -\mu \sigma_z B$ quindi:

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{1}{e^{-\mu \beta B} + e^{\mu \beta B}} (e^{\mu \beta B} |\uparrow\rangle \langle \uparrow| + e^{-\mu \beta B} |\downarrow\rangle \langle \downarrow|) = \frac{1}{2 \cosh(\mu \beta B)} \begin{pmatrix} e^{\mu \beta B} & 0 \\ 0 & e^{-\mu \beta B} \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{2 \cosh(\mu \beta B)} \left(\cosh(\mu \beta B) + \sigma_z \sinh(\mu \beta B) \right) = \frac{1}{2} (1 + \sigma_z \tanh(\mu \beta B)) \end{aligned}$$

che ha la forma che si era trovata in precedenza per la matrice densità di un sistema a due livelli. Poiché $|\tanh(\mu \beta B)| < 1$ si ha uno stato misto, che diventa puro solo nel limite $T \rightarrow 0$, inoltre $\langle \vec{\sigma} \rangle = \tanh(\mu \beta B) \hat{z}$.

Per campo magnetico in direzione generica $H = -\mu \vec{\sigma} \cdot \vec{B}$, quindi:

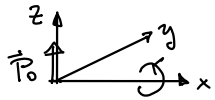
$$\begin{aligned} e^{-\beta H} &= \exp(\beta \mu \vec{\sigma} \cdot \vec{B}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\beta \mu \vec{\sigma} \cdot \vec{B})^n = \underbrace{\sum_{\substack{n=0 \\ \text{pari}}}^{\infty} \frac{1}{n!} (\beta \mu |\vec{B}|)^n}_{\cosh(\beta \mu |\vec{B}|)} + \underbrace{\frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{B}}{|\vec{B}|} \sum_{\substack{n=0 \\ \text{dispari}}}^{\infty} \frac{1}{n!} (\beta \mu |\vec{B}|)^n}_{\sinh(\beta \mu |\vec{B}|)} \\ &= \cosh(\beta \mu |\vec{B}|) + \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{B}}{|\vec{B}|} \sinh(\beta \mu |\vec{B}|) \end{aligned}$$

$$\tilde{\rho} = \text{Tr}(e^{-\beta H}) = 2 \cosh(\beta \mu |\vec{B}|) \quad \text{quindi} \quad \rho = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{\vec{B} \cdot \vec{\sigma}}{|\vec{B}|} \tanh(\beta \mu |\vec{B}|) \right\}$$

Consideriamo uno spin $\frac{1}{2}$ accoppiato ad un bagno termico in presenza di un campo magnetico $B_z \hat{z}$, quindi descritto dalla matrice densità $\rho = \frac{1}{2} \{ 1 + \sigma_z \tanh(\beta \mu B_z) \}$ (supponiamo $B_z > 0$ per semplicità)

Scollegiamo il sistema dal bagno termico, spegniamo il campo B_z e accendiamo un campo magnetico $B_x \hat{x}$. Come evolve ρ ?

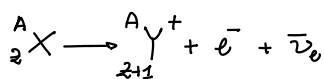
$$\rho = \frac{1}{2} (1 + \vec{P} \cdot \vec{\sigma}) \quad , \quad \vec{P}(0) = \hat{z} \tanh(\beta \mu B_z) \quad , \quad \dot{\vec{P}} = \vec{\Omega} \times \vec{P} \quad \text{con} \quad \vec{\Omega} = -\frac{g}{\hbar} \mu B_x \hat{x}$$



$\Omega = -\frac{g}{\hbar} \mu B_x$ velocità angolare attorno a asse $\hat{x}$

$$P_x = 0 \quad P_y = \tanh(\beta \mu B_z) \sin\left(\frac{g}{\hbar} \mu B_x t\right) \quad ; \quad P_z = \tanh(\beta \mu B_z) \cos\left(\frac{g}{\hbar} \mu B_x t\right)$$

Decadimenti β e violazione della parità



Esistono due grandi categorie di decadimenti β , quelli alla Fermi e quelli alla Gamow-Teller. Quello che diremo nel seguito vale per questi ultimi.

Esempio celebre di decadimento G-T: ${}^{60}_{26} \text{Co} (5^+) \rightarrow {}^{60}_{27} \text{Ni}^{xx} (4^+) + e^- + \bar{\nu}_e$

$$\longrightarrow {}^{60}_{27} \text{Ni}^{xx} (2^+) + \gamma$$

$$\longrightarrow {}^{60}_{27} \text{Ni} (0^+) + \gamma$$

Nei decadimenti di tipo G-T il momento angolare della coppia elettrone-antineutrino è ± 1 e la configurazione dominante è quella in cui $S_e = S_{\bar{\nu}} = \frac{1}{2}$. Vogliamo determinare in questo caso la distribuzione angolare degli elettroni emessi.

Per avere $S = \frac{1}{2}$ sono possibili due valori del momento angolare orbitale: $l=0$ e $l=1$

$$l=0: |j=\frac{1}{2}, j_z=\frac{1}{2}\rangle = |l=0, l_z=0\rangle |s=\frac{1}{2}, s_z=\frac{1}{2}\rangle = Y_{00} |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$$

per $l=1$ si ha invece

$$|j=\frac{1}{2}, j_z=\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |l=1, l_z=1\rangle |s=\frac{1}{2}, s_z=-\frac{1}{2}\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} |l=1, l_z=0\rangle |s=\frac{1}{2}, s_z=\frac{1}{2}\rangle$$

$$= \sqrt{\frac{2}{3}} Y_{11} |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} Y_{10} |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$$

Unendo lo stato generale con $j=\frac{1}{2}$ e $j_z=\frac{1}{2}$ si scrive

come combinazione lineare di questi due stati:

$$|\psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}\rangle = c_s Y_{00} |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + c_p \left(\sqrt{\frac{2}{3}} Y_{11} |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} Y_{10} |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \right)$$

con $|c_s|^2 + |c_p|^2 = 1$ poiché sia gli stati di spin che le armoniche sferiche sono ortonormali,

quindi si ha $\int \langle \psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} | \psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \rangle (\theta, \varphi) d\Omega = |c_s|^2 + |c_p|^2$

Se vogliamo calcolare la distribuzione angolare dobbiamo effettuare il prodotto scalare sugli spinori ma non integrare sugli angoli

$$\langle \psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} | \psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \rangle = |c_s Y_{00} - \frac{1}{\sqrt{3}} Y_{10} c_p|^2 + |c_p \sqrt{\frac{2}{3}} Y_{11}|^2 =$$

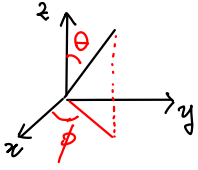
$$= |c_s Y_{00}|^2 + |c_p|^2 \left(\frac{1}{3} |Y_{10}|^2 + \frac{2}{3} |Y_{11}|^2 \right) - \frac{2}{\sqrt{3}} \text{Re}(c_s^* Y_{00}^* c_p Y_{10})$$

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} ; Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta ; Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi}$$

$$\rightarrow = |c_s|^2 \frac{1}{4\pi} + |c_p|^2 \left(\frac{1}{3} \frac{3}{4\pi} \cos^2 \theta + \frac{2}{3} \frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta \right) - \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{\sqrt{3}}{4\pi} \cos \theta \text{Re}(c_s^* c_p)$$

$$= \frac{1 - \alpha \cos \theta}{4\pi} \quad \text{con} \quad \alpha = 2 \text{Re}(c_s^* c_p)$$

Lo stato $\psi_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}$ potrebbe essere calcolato in modo analogo, tuttavia si può anche ottenere il risultato tramite una rotazione di π attorno all'asse y .



Per una tale rotazione si ha $\theta \rightarrow \pi - \theta$ e $\phi \rightarrow \pi - \phi$ quindi

$$Y_{00} \rightarrow Y_{00}, \quad Y_{10} \rightarrow \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos(\pi - \theta) = -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta = -Y_{10}$$

$$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin(\pi - \theta) e^{i(\pi - \phi)} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\phi} = -Y_{11}^* = Y_{1,-1} \quad \text{poiché } Y_{\ell-m} = (-1)^m Y_{\ell m}^*$$

inoltre $e^{-i\pi\sigma_y/2} = \cos \pi/2 - i\sigma_y \sin \pi/2 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ quindi si ha $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \rightarrow |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$

$$|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \rightarrow -|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$$

di conseguenza

$$|\psi_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}\rangle = c_s Y_{00} |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + c_p \left(-\sqrt{\frac{2}{3}} Y_{1,-1} |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} Y_{10} |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \right)$$

che si ottiene da $\psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}$ con la sostituzione $c_p \rightarrow -c_p$, quindi la distribuzione angolare è in questo caso $\frac{1 + \alpha \cos \theta}{2}$.

Se non si misura la polarizzazione dell'elettrone la distribuzione angolare è quindi

$$P(\theta) = \frac{1 - A \cos \theta}{2} \quad \text{con} \quad A = \alpha(P_{\frac{1}{2}} - P_{-\frac{1}{2}})$$

↙ probabilità di $j_z = \frac{1}{2}$ o $-\frac{1}{2}$ (uguali nei dec. di Fermi $\Rightarrow A=0$)

Se sperimentalmente si trova $A \neq 0$ allora $\alpha \neq 0 \Rightarrow c_s^* c_p \neq 0 \Rightarrow c_s \neq 0$ e $c_p \neq 0$

Sotto una trasformazione di parità gli spin non cambiano (sono momenti angolari: pseudovettori)

mentre $Y_{\ell m}(\hat{n}) \rightarrow Y_{\ell m}(-\hat{n}) = (-1)^{\ell} Y_{\ell m}(\hat{n})$, quindi $|\psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}\rangle$ non può essere autostato della parità se $c_s \neq 0$ e $c_p \neq 0$.

Di conseguenza (a meno di strane degenerazioni) la parità non è conservata dalle interazioni deboli responsabili dei decadimenti β poiché se non c'è degenerazione da $[H, P] = 0$ segue che tutti gli autostati di H sono anche autostati di P .

Singoletti con 3 spin 1

Consideriamo un sistema di 3 particelle di spin 1

1) in quanti modi è possibile costruire un singoletto di spin?

$$1 \times 1 \times 1 = (0+1+2) \times 1$$

$0 \times 1 = 1$ ← unico singoletto, che si ottiene componendo due tripletti per formare un tripletto e componendo poi questo con l'ultimo spin

$1 \times 1 = 0+1+2$

$2 \times 1 = 1+2+3$ per formare un singoletto.

Per rotazioni antiorarie di angolo Θ : $R\vec{x} \simeq \vec{x} + \vec{\Theta} \times \vec{x}$, $U(R) = e^{-i\vec{\Theta} \cdot \vec{S}}$

Operatori scalari: gli elementi di matrice non cambiano se ruota il sistema

$$\langle \psi_1 | A | \psi_2 \rangle = \langle R\psi_1 | A | R\psi_2 \rangle \quad \text{con } |R\psi_2\rangle = U(R)|\psi_2\rangle \quad \text{e} \quad \langle R\psi_1| = \langle \psi_1 | U^\dagger(R) \quad \text{quindi}$$

$$\langle \psi_1 | U^\dagger(R) A U(R) | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | A | \psi_2 \rangle \quad \text{quindi: } U^\dagger(R) A U(R) = A \quad \text{e sviluppando } [\vec{S}, A] = 0$$

Studiamo ora le regole di selezione per gli elementi di matrice di A tra stati della forma

$|j, m, \alpha\rangle$ con " α " = numeri quantici indipendenti dalle rotazioni

Poiché $[\vec{S}_z, A] = 0$ si ha in particolare

$$0 = \langle j_1, m_1, \alpha | [\vec{S}_z, A] | j_2, m_2, \beta \rangle = \langle j_1, m_1, \alpha | (\vec{S}_z A - A \vec{S}_z) | j_2, m_2, \beta \rangle = (m_1 - m_2) \langle j_1, m_1, \alpha | A | j_2, m_2, \beta \rangle$$

$$\text{quindi: } \langle j_1, m_1, \alpha | A | j_2, m_2, \beta \rangle = 0 \quad \text{se } m_1 \neq m_2 \quad \text{e} \quad \langle j_1, m_1, \alpha | A | j_2, m_2, \beta \rangle \propto \delta_{m_1, m_2}$$

Poiché $[\vec{S}^2, A] = S_i [S_i, A] + [S_i, A] S_i = 0$ si ha in modo identico anche $\langle j_1, m_1, \alpha | A | j_2, m_2, \beta \rangle \propto \delta_{j_1, j_2}$

Siano ora $S_\pm = S_x \pm i S_y$, si ha allora

$$S_+ |j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} |j, m+1\rangle \quad S_- |j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} |j, m-1\rangle$$

e si vede subito che $S_+ A S_- = A S_+ S_-$ quindi

$$\langle j, m, \alpha | S_+ A S_- | j, m, \beta \rangle = (j(j+1) - m(m-1)) \langle j, m-1, \alpha | A | j, m-1, \beta \rangle$$

$$" \langle j, m, \alpha | A S_+ S_- | j, m, \beta \rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \langle j, m, \alpha | A S_+ | j, m-1, \beta \rangle = (j(j+1) - m(m-1)) \langle j, m, \alpha | A | j, m, \beta \rangle$$

$$\text{quindi se } m > -j \text{ si ha } \langle j, m-1, \alpha | A | j, m-1, \beta \rangle = \langle j, m, \alpha | A | j, m, \beta \rangle$$

Mettendo tutte insieme abbiamo infine

$$\langle j_1, m_1, \alpha | A | j_2, m_2, \beta \rangle = \delta_{m_1, m_2} \delta_{j_1, j_2} f(j_1, \alpha, \beta) \quad (\text{caso molto particolare di Wigner-Eckart})$$

Operatori vettoriali Gli elementi di matrice ruotano come vettori ruotando il sistema

$$\langle R\psi_1 | V_i | R\psi_2 \rangle = R_{ij} \langle \psi_1 | V_j | \psi_2 \rangle \Rightarrow U^\dagger(R) V_i U(R) = R_{ij} V_j \quad \text{e sviluppando per angoli piccoli}$$

si ottiene $[S_i, V_j] = i \epsilon_{ijk} V_k$ (nota: $\vec{x}, \vec{p}, \vec{L}, \vec{S}, \vec{J}$ sono operatori vettoriali)

Si ha in particolare $[S_z, V_z] = 0$ quindi procedendo come nel caso scalare si vede che

$$\langle j_1, m_1, \alpha | V_z | j_2, m_2, \beta \rangle \propto \delta_{m_1, m_2}$$

Introducendo $V_\pm = V_x \pm i V_y$ si potrebbe mostrare che $[S_z, V_\pm] = \pm V_\pm$ da cui segue

$$\langle j_1, m_1, \alpha | [S_z, V_\pm] | j_2, m_2, \beta \rangle = (m_1 - m_2) \langle j_1, m_1, \alpha | V_\pm | j_2, m_2, \beta \rangle$$

$$" \pm \langle j_1, m_1, \alpha | V_\pm | j_2, m_2, \beta \rangle \quad \text{quindi: } (m_1 - m_2 \mp 1) \langle j_1, m_1, \alpha | V_\pm | j_2, m_2, \beta \rangle = 0$$

$$\text{e dunque } \langle j_1, m_1, \alpha | V_\pm | j_2, m_2, \beta \rangle \propto \delta_{m_1, m_2 \pm 1}$$

Per ottenere la regola di selezione su J_1, J_2 dimostreremo prima di tutto

$$[\vec{S}^2, [\vec{S}^2, V_i]] = 2(\vec{S}^2 V_i + V_i \vec{S}^2) - 4 \vec{S} \cdot \vec{V} S_i$$

$$[\vec{S}^2, V_i] = S_j [S_j, V_i] + [S_j, V_i] S_j = S_j i \epsilon_{jik} V_k + i \epsilon_{jik} V_k S_j = i \epsilon_{jik} (S_j V_k + V_k S_j)$$

poiché $[\vec{S}^2, S_i] = 0$ abbiamo

$$\begin{aligned} [\vec{S}^2, [\vec{S}^2, V_i]] &= i \epsilon_{jik} (S_j [\vec{S}^2, V_k] + [\vec{S}^2, V_k] S_j) = \\ &= i \epsilon_{jik} (S_j i \epsilon_{kml} (S_l V_m + V_m S_l) + i \epsilon_{kml} (S_l V_m + V_m S_l) S_j) = \\ &= \epsilon_{kji} \epsilon_{kml} \{ S_j (S_l V_m + V_m S_l) + (S_l V_m + V_m S_l) S_j \} = \\ &= (\delta_{jl} \delta_{im} - \delta_{jm} \delta_{il}) \{ S_j (S_l V_m + V_m S_l) + (S_l V_m + V_m S_l) S_j \} = \\ &= \underbrace{S^2 V_i}_{(1)} + \underbrace{S_j V_i S_j}_{(2)} + \underbrace{V_i S^2}_{(3)} - \underbrace{S_j S_i V_j}_{(4)} - \vec{S} \cdot \vec{V} S_i - S_i \vec{V} \cdot \vec{S} - V_j S_i S_j \end{aligned}$$

$$1) S_j V_i S_j = S_j [V_i, S_j] + S^2 V_i = i \epsilon_{ijk} S_j V_k + S^2 V_i$$

$$2) S_j V_i S_j = [S_j, V_i] S_j + V_i S^2 = i \epsilon_{jik} V_k S_j + V_i S^2$$

$$3) -S_j S_i V_j = -S_j [S_i, V_j] - \vec{S} \cdot \vec{V} S_i = -i \epsilon_{ijk} S_j V_k - \vec{S} \cdot \vec{V} S_i$$

$$4) -V_j S_i S_j = -[V_j, S_i] S_j - \vec{V} \cdot \vec{S} S_i = -i \epsilon_{jik} V_k S_j - \vec{V} \cdot \vec{S} S_i$$

inoltre $\vec{V} \cdot \vec{S} = \vec{S} \cdot \vec{V}$ e $[\vec{S}, \vec{S} \cdot \vec{V}] = 0$ poiché $\vec{S} \cdot \vec{V}$ è un operatore scalare, quindi simmetrico
insieme i pezzi si trova l'identità che si voleva dimostrare

Consideriamo ora l'elemento di matrice tra $\langle J_1 m_1 |$ e $| J_2 m_2 \rangle$ partendo dall'ultimo termine

$$\langle J_1 m_1 | (\vec{V} \cdot \vec{S}) S_i | J_2 m_2 \rangle = \langle J_1 m_1 | \vec{V} \cdot \vec{S} | \sum_{j m} | j m \rangle \langle j m | S_i | J_2 m_2 \rangle = \langle J_1 m_1 | \vec{V} \cdot \vec{S} | J_1 m_1 \rangle \langle J_1 m_1 | S_i | J_1 m_1 \rangle$$

poiché $\vec{V} \cdot \vec{S}$ è un operatore scalare. Inoltre da $[\vec{S}^2, S_i] = 0$ segue subito che

$$\langle J_1 m_1 | S_i | J_2 m_2 \rangle \propto \delta_{J_1 J_2}, \text{ quindi } \langle J_1 m_1 | \vec{V} \cdot \vec{S} S_i | J_2 m_2 \rangle \propto \delta_{J_1 J_2}$$

Se $J_1 \neq J_2$ abbiamo allora

$$\langle J_1 m_1 | [\vec{S}^2, [\vec{S}^2, V_i]] | J_2 m_2 \rangle = (J_1(J_1+1) - J_2(J_2+1))^2 \langle J_1 m_1 | V_i | J_2 m_2 \rangle$$

$$\Leftrightarrow 2 \langle J_1 m_1 | (\vec{S}^2 V_i + V_i \vec{S}^2) | J_2 m_2 \rangle = 2 (J_1(J_1+1) + J_2(J_2+1)) \langle J_1 m_1 | V_i | J_2 m_2 \rangle$$

quindi affinché l'elemento di matrice sia non nullo si deve avere

$$(J_1(J_1+1) - J_2(J_2+1))^2 = 2 (J_1(J_1+1) + J_2(J_2+1))$$

che si può semplificare in $(J_1 - J_2 - 1)(J_1 - J_2 + 1)(J_1 + J_2)(J_1 + J_2 + 2) = 0 \Rightarrow J_1 = J_2 \pm 1$

($J_1 = J_2 = 0$ non ammissibile perché si è supposto $J_1 \neq J_2$)

Se $j_1 = j_2$ si ottiene dall'elemento di matrice $\langle j m_1 | \dots | j m_2 \rangle$

$$0 = 4 j(j+1) \langle j m_1 | V_i | j m_2 \rangle - 4 \underbrace{\langle j m_1 | \vec{S} \cdot \vec{V} | j m_1 \rangle}_{\text{indip. da } m_1 \text{ poiché } \vec{S} \cdot \vec{V} \text{ è scalare}} \langle j m_1 | S_i | j m_2 \rangle$$

da cui

$$\langle j m_1 | V_i | j m_2 \rangle = \frac{\langle j | \vec{S} \cdot \vec{V} | j \rangle}{j(j+1)} \langle j m_1 | S_i | j m_2 \rangle$$

che è il teorema della proiezione. Si vede quindi che gli unici casi in cui

$$\langle j_1 m_1 | V_i | j_2 m_2 \rangle \text{ può essere non nullo sono } j_1 = j_2 \pm 1 \text{ e } j_1 = j_2 \text{ (se } j_1 \neq 0 \text{ altrimenti } \langle j_1 m | S_i | j_1 m \rangle = 0)$$

Operatori tensoriali cartesiani

Operatori i cui valori medi trasformano come tensori cartesiani, quindi

$$U^\dagger(R) T_{i_1 j_1 k_1 \dots} U(R) = R_{i_1 i_2} R_{j_1 j_2} \dots T_{i_2 j_2 k_2 \dots}$$

$$\text{Forma infinitesimale } [S_i, T_{\alpha_1 \beta_1 \dots}] = i \epsilon_{i \alpha_1 \alpha_2} T_{\alpha_2 \beta_1 \dots} + i \epsilon_{i \beta_1 \beta_2} T_{\alpha_1 \beta_2 \dots} + \dots$$

in pratica ogni indice trasforma vettorialmente.

Mostriamo ora che per un operatore tensoriale cartesiano a due indici e simmetrico S_{ij} si ha

$$\sum_m \langle j m \alpha | S_{ab} | j m \alpha \rangle \propto \delta_{\alpha\beta}$$

Abbiamo $U^\dagger(R) S_{ab} U(R) = R_{ac} R_{bd} S_{cd}$ e sia $X_{ab} = \sum_m \langle j m \alpha | S_{ab} | j m \alpha \rangle$, allora

$$R_{ac} R_{bd} X_{cd} = \sum_m \langle j m \alpha | U^\dagger(R) S_{ab} U(R) | j m \alpha \rangle, \text{ inoltre } U(R) | j m \alpha \rangle = \sum_{m'} | j m' \alpha \rangle D_{m' m}^{(j)}(R) \text{ e}$$

è hermitico coniugato è

$$\langle j m \alpha | U^\dagger(R) = \sum_{m'} \langle j m' \alpha | D_{m' m}^{(j)*}(R) = \sum_{m'} \langle j m' \alpha | D_{m m'}^{(j)}(R^{-1})$$

$\uparrow$
 $D^\dagger(R) = D^{-1}(R) = D(R^{-1})$

$$\text{quindi } \sum_m \langle j m \alpha | U^\dagger(R) S_{ab} U(R) | j m \alpha \rangle = \sum_{m m'} D_{m m'}^{(j)}(R^{-1}) D_{m' m}^{(j)}(R) \langle j m' \alpha | S_{ab} | j m' \alpha \rangle$$

$$\text{inoltre } \sum_m D_{m m''}^{(j)}(R^{-1}) D_{m' m}^{(j)}(R) = [D^{(j)}(R) D^{(j)}(R^{-1})]_{m' m''} = \delta_{m' m''}$$

$$= \sum_{m'} \langle j m' \alpha | S_{ab} | j m' \alpha \rangle = X_{ab}$$

Quindi X_{ab} è una matrice reale (è hermitica) simmetrica t.c. $R_{is} R_{jl} X_{sl} = X_{ij}$ cioè

t.c. $R X R^T = X$ per ogni rot. R . Poiché X può essere diagonalizzata con una rotazione, è

facile vedere che dall'invarianza per rot. segue che tutti gli elementi sulla diagonale sono uguali

e quindi $X \propto \mathbb{1}$

Conclusione: per ogni operatore tensoriale simmetrico si ha

$$\sum_m \langle j m \alpha | S_{ab} | j m \alpha \rangle = \frac{1}{3} \delta_{ab} \sum_m \langle j m \alpha | \text{Tr} S | j m \alpha \rangle$$

Questa relazione collega la traccia su J e indici fissati alla traccia $\text{Tr} S$ sugli indici

Operatori Tensoriali sferici: Riconosciamo che $Y_{lm}(\hat{n}) = \langle \hat{n} | l m \rangle$ e da $|\hat{R}^{-1} \hat{n}\rangle = U(\hat{R}^{-1})|\hat{n}\rangle = U^\dagger(\hat{R})|\hat{n}\rangle$

$$\text{segue } Y_{lm}(\hat{R}^{-1} \hat{n}) = \langle \hat{R}^{-1} \hat{n} | l m \rangle = \langle \hat{n} | U(\hat{R}) | l m \rangle = \langle \hat{n} | \left(\sum_{m'} | l m' \rangle \langle l m' | \right) D_{m'm}^{(l)}(\hat{R}) = \sum_{m'} Y_{lm'}(\hat{n}) D_{m'm}^{(l)}(\hat{R})$$

Un tensore sferico è definito dalla relazione

$$U(\hat{R}) T_m^{(l)} U^\dagger(\hat{R}) = T_m^{(l)} D_{m'm}^{(l)}(\hat{R})$$

per fare in modo che i suoi elementi di matrice trasformino sotto rotazioni come Y_{lm} . La versione

infinitesimale della definizione è

$$\begin{cases} [S_z, T_m^{(l)}] = m T_m^{(l)} \\ [S_\pm, T_m^{(l)}] = \sqrt{l(l+1) - m(m\pm 1)} T_{m\pm 1}^{(l)} \end{cases}$$

e si ottiene dalla forma

esplicita degli elementi di

matrice di $S_z, S_\pm$ nella rappresentazione di spin l .

Dal commutatore con S_z segue facilmente $\langle j_1 m_1 \alpha | T_m^{(l)} | j_2 m_2 \beta \rangle \propto \delta_{m_1, m_2 + m}$

A partire da un operatore vettoriale $\vec{V}$ esiste un modo standard di costruire operatori tensoriali sferici

(supponiamo per semplicità che le componenti di $\vec{V}$ commutino tra loro, altrimenti sono necessarie un po' di simmetrizzazioni esplicite)

$T_m^{(l)} \propto |\vec{V}|^l Y_{lm}(\hat{V})$ infatti $\vec{V}$ trasforma sotto rotazione degli stati come il vettore $\hat{n}$

quindi da $U(\hat{R}) \vec{V} U^\dagger(\hat{R}) = \hat{R} \vec{V}$ segue $U(\hat{R}) T_m^{(l)} U^\dagger(\hat{R}) = \sum_{m'} T_{m'}^{(l)} D_{m'm}^{(l)}(\hat{R})$

Scritte in modo esplicito il polinomio armonico ha la forma

$$r^l Y_{lm}(\hat{n}) = \sum a_{i_1 \dots i_l}^{(lm)} x_{i_1} \dots x_{i_l}$$

↑ simmetrico e $\nabla^2 (r^l Y_{lm}) = 0$ implica $\sum_i a_{i i i_1 \dots i_{l-2}} = 0$ cioè traccia nulla.

tensori simmetrici a l indici: modi indipendenti di mettere l indici in 3 scatole

$$\frac{(l+2)!}{2! l!} = \frac{1}{2} (l+1)(l+2)$$

contrazioni indipendenti che si possono fare per le coppie di indici di un tensore simmetrico =

$$= \# \text{ tensori simmetrici a } l-2 \text{ indici} : \frac{1}{2} (l-1)l$$

componenti di un tensore simmetrico a l indici

$$\frac{1}{2} (l+1)(l+2) - \frac{1}{2} (l-1)l = \frac{1}{2} (l^2 + 3l + 2 - l^2 + l) = 2l + 1$$

Tensore coesione simmetrico a traccia nulla $\equiv$ tensore coesione irriducibile

Ad ogni tensore coesione irriducibile a l indici si associa un tensore sferico tramite

$$T_m^{(l)} = \sum a_{i_1 \dots i_l}^{(lm)} T_{i_1 \dots i_l} \quad (\text{nota: solo la componente irriducibile contribuisce per } T \text{ genuino})$$

$T_{i_1 \dots i_l}$ trasforma come $x_{i_1} \dots x_{i_l}$ quindi $T_m^{(l)}$ è un tensore sferico.

Teorema di Wigner-Eckart

Se $T_q^{(k)}$ è un operatore tensoriale sferico allora (nota: esistono diverse convenzioni)

$$\langle j m \alpha | T_q^{(k)} | j' m' \beta \rangle = \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \langle j \alpha || T^{(k)} || j' \beta \rangle \underbrace{\langle j m | k q; j' m' \rangle}_{\text{coeff di Clebsch-Gordan per } k \otimes j'}$$

Ad esempio nel caso di un operatore scalare ($k=0$), poiché $0 \otimes j' = j'$, affinché il C-G sia diverso da zero si deve avere $j=j'$ e $m'=m$, inoltre $\langle j m | j m; 0 0 \rangle = 1$, quindi

$$\langle j m \alpha | T^{(0)} | j' m' \beta \rangle = \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \langle j \alpha || T^{(0)} || j' \beta \rangle \delta_{jj'} \delta_{mm'} = \delta_{jj'} \delta_{mm'} f(\alpha, \beta, j)$$

come si era ottenuto in precedenza usando direttamente i commutatori.

Usando Y_{lm} per associare tensori cartesiani irriducibili si ha ad esempio (o meno di fattori numerici comuni irrilevanti)

$$V_{+1}^{(1)} = -\frac{1}{\sqrt{2}} (V_1 + i V_2) ; \quad V_0^{(1)} = V_3 ; \quad V_{-1}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (V_1 - i V_2)$$

$$T_{+2}^{(2)} = \frac{\sqrt{3}}{2} (S_{11} - S_{22} + 2i S_{12}) ; \quad T_1^{(2)} = -\sqrt{3} (S_{13} + i S_{23}) ; \quad T_0^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (2S_{33} - S_{11} - S_{22})$$

e gli altri valori si trovano usando $Y_{l-m}(\hat{n}) = (-1)^m Y_{lm}^*(\hat{n})$.

Per i vettori si ha quindi

$$V_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (V_{-1}^{(1)} - V_{+1}^{(1)}) ; \quad V_y = \frac{1}{\sqrt{2}} i (V_{-1}^{(1)} + V_{+1}^{(1)}) ; \quad V_z = V_0^{(1)}$$

Elementi di matrice di vettori

$$\rightarrow \langle 0 0 \alpha | V_i | 0 0 \beta \rangle = ?$$

Un vettore è una combinas. lineare delle componenti del tensore sferico $V^{(1)}$ e $1 \otimes 0 = 1 \neq 0$ quindi tutti i C-G in Wigner-Eckart si annullano.

$$\rightarrow \langle 1 m \alpha | V_x | 0 0 \beta \rangle = ?$$

$$\begin{aligned} \langle 1 m \alpha | V_x | 0 0 \beta \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle 1 m \alpha | V_{-1}^{(1)} | 0 0 \beta \rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} \langle 1 m \alpha | V_{+1}^{(1)} | 0 0 \beta \rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}} \langle 1 \alpha || V^{(1)} || 0 \beta \rangle \left(\underbrace{\langle 1 m | 1 -1; 0 0 \rangle}_{\delta_{m,-1}} - \underbrace{\langle 1 m | 1 +1; 0 0 \rangle}_{\delta_{m,+1}} \right) \end{aligned}$$

(nota $\langle j m | j_1 m_1; j_2 m_2 \rangle = (-1)^{j-j_1-j_2} \langle j m | j_2 m_2; j_1 m_1 \rangle$ quindi $1 \otimes 0$ non è diverso da $0 \otimes 1$)

$$\text{quindi } \langle 1 m \alpha | V_x | 0 0 \beta \rangle = f(\alpha, \beta) (\delta_{m,-1} - \delta_{m,+1})$$

$$\rightarrow \langle 1 m_2 \alpha | V_x | 1 m_1 \beta \rangle$$

$$\langle 1 m_2 \alpha | V_x | 1 m_1 \beta \rangle = f(\alpha, \beta) \left(\underbrace{\langle 1 m_2 | 1 -1; 1 m_1 \rangle}_{\substack{\uparrow \\ \text{non nullo se} \\ m_2 = m_1 - 1}} - \underbrace{\langle 1 m_2 | 1 +1; 1 m_1 \rangle}_{\substack{\uparrow \\ \text{non nullo se} \\ m_2 = m_1 + 1}} \right)$$

Effetto Zeeman (campo debole)

$$H = \underbrace{\text{parte centrale}}_{H_0} + \underbrace{(\vec{L} \cdot \vec{S})}_{V} - \underbrace{\vec{\mu} \cdot \vec{B}}_V ; \quad \vec{\mu} = -\mu_B (\vec{L} + g_s \vec{S}) ; \quad g_s \approx 2 ; \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c}$$

Supponiamo che B sia abbastanza piccolo da indurre una separazione dei livelli molto più piccola di quella indotta dalla interazione fine (nel limite opposto si usa $\vec{L} \cdot \vec{S}$ come perturbazione e si parte dalla sol. esatta di $H = -\frac{L^2}{2I} - \vec{\mu} \cdot \vec{B}$, ottenendo l'effetto Paschen-Back).

$$[H_0, \vec{L}] \neq 0 ; [H_0, \vec{S}] \neq 0 ; [H_0, \vec{J}] = 0 \quad ([L^2, \vec{J}] = [S^2, \vec{J}] = 0)$$

Usiamo la base $|j, j_z, l, s\rangle$ in cui l'interac. fine è diagonale per calcolare l'effetto della perturbazione: si ha degeneraz. in j_z , tuttavia $[H_0, \vec{J}] = 0$ quindi possiamo scegliere senza perdita di generalità $\vec{B} \parallel \hat{z}$, quindi $[H, S_z] = 0$ e quindi tutto funziona come se non ci fosse degenerazione (la matrice della perturbazione è diagonale nella base $|j, j_z, l, s\rangle$)

$$\vec{\mu} = -\mu_B \vec{J} - \mu_B (g_s - 1) \vec{S} \Rightarrow \langle j j_z l s | \mu_z | j j_z l s \rangle = -\mu_B j_z - \mu_B (g_s - 1) \langle j j_z l s | S_z | j j_z l s \rangle$$

inoltre $\vec{S}$ è un operatore vettoriale, quindi possiamo usare il teorema della proiezione

$$\langle j j_z l s | \vec{V} | j j_z l s \rangle = \frac{\langle j l s | \vec{V} \cdot \vec{S} | j l s \rangle}{j(j+1)} \langle j j_z l s | \vec{S} | j j_z l s \rangle$$

$$\vec{S} = \vec{L} + \vec{S} \quad , \quad (\vec{S} - \vec{S})^2 = L^2 \quad , \quad \vec{S} \cdot \vec{S} = \frac{S^2 + S^2 - L^2}{2} \quad , \quad \langle j l s | \vec{S} \cdot \vec{S} | j l s \rangle = \frac{1}{2} (j(j+1) + s(s+1) - l(l+1))$$

quindi:

$$\langle j j_z l s | \mu_z | j j_z l s \rangle = -\mu_B \left\{ 1 + (g_s - 1) \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \right\} j_z \equiv -\mu_B g_L j_z$$

↑ fattore di Landé

$$E^{(1)} = \mu_B g_L B j_z \quad \text{effetto Zeeman (effetto Zeeman anomalo per motivi storici)}$$

NOTA: per l'atomo di idrogeno il calcolo si sarebbe potuto effettuare usando la forma esplicita dei coeff. di C-G. per $l \otimes \frac{1}{2}$, ma il metodo usato è esportabile anche all'effetto Zeeman di atomi complessi, la classificazione in stati $|j j_z l s\rangle$ essendo basata solo su argomenti generali di simmetria.

Teoria delle perturbazioni basic

Spin 1/2

Consideriamo una particella di spin 1/2 e momento magnetico $\vec{\mu} = \mu \vec{\sigma}$. La sua hamiltoniana di interazione con un campo magnetico $\vec{B}$ è $H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu \vec{\sigma} \cdot \vec{B}$. Usiamo B_z come componente "grande" del campo e vediamo l'effetto di una perturbazione B_x con $|B_x| < B_z$.

$$H_0 = -\mu B_z \sigma_z = -\mu B_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad V = -\mu B_x \sigma_x = -\mu B_x \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Ricordiamo che per livelli non degeneri (come in questo caso) si hanno le espressioni

$$\Delta E_i^{(1)} = \langle i | V | i \rangle ; \quad \Delta E_i^{(2)} = \sum_{j \neq i} \frac{|\langle i | V | j \rangle|^2}{E_i - E_j}$$

Poiché V ha solo elementi fuori diagonale nella base in cui H_0 è diagonale, si ha $\Delta E_i^{(1)} = 0$

inoltre gli stati/energie imperturbati sono

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} ; \quad E_1 = -\mu B_z ; \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} ; \quad E_2 = +\mu B_z ; \quad |\langle 1 | V | 2 \rangle|^2 = (\mu B_x)^2 \quad \text{quindi}$$

$$\Delta E_1^{(2)} = \frac{(\mu B_x)^2}{-\mu B_z - \mu B_z} = -\frac{1}{2} \mu \frac{B_x^2}{B_z} = -\frac{1}{2} \mu B_z \left(\frac{B_x}{B_z} \right)^2$$

$$\Delta E_2^{(2)} = \frac{(\mu B_x)^2}{\mu B_z + \mu B_z} = \frac{1}{2} \mu B_z \left(\frac{B_x}{B_z} \right)^2$$

$$\text{Autovalori esatti} \quad \pm \sqrt{\mu^2 (B_z^2 + B_x^2)} = \pm \mu B_z \sqrt{1 + B_x^2/B_z^2} \simeq \pm \mu B_z \left(1 + \frac{1}{2} \frac{B_x^2}{B_z^2} \right)$$

Oscillatore armonico con perturbazione lineare

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad V = -\alpha x \quad \Delta E_0^{(1)} = 0 \quad \text{per parità}$$

$$\Delta E_0^{(2)} = \sum_{i \neq 0} \frac{|\langle i | V | 0 \rangle|^2}{E_0 - E_i} = \frac{\alpha^2 \ell^2}{2} \frac{|\langle 1 | a^\dagger | 0 \rangle|^2}{\frac{1}{2} \hbar \omega - \frac{3}{2} \hbar \omega} = -\frac{\ell^2 \alpha^2}{2 \hbar \omega} = -\frac{\alpha^2}{2 m \omega^2}$$

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

Al primo ordine lo stato del livello zero si scrive

$$|1\rangle = |0\rangle + \sum_{n \neq 0} |n\rangle \frac{1}{E_0 - E_n} \langle n | V | 0 \rangle = |0\rangle + |1\rangle \frac{1}{\frac{1}{2} \hbar \omega - \frac{3}{2} \hbar \omega} \left(-\alpha \frac{\ell}{\sqrt{2}} \langle 1 | a^\dagger | 0 \rangle \right) = |0\rangle + \frac{\alpha \ell}{\hbar \omega \sqrt{2}} |1\rangle$$

Il sistema si può risolvere esattamente: $H = H_0 + V = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \left(x - \frac{\alpha}{m \omega^2} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{\alpha^2}{m \omega^2}$ quindi i

livelli sono $E_n = \hbar \omega (n + \frac{1}{2}) - \frac{1}{2} \frac{\alpha^2}{m \omega^2}$, quindi il secondo ordine di teoria delle perturb. è

esatto. Per l'oscillatore armonico si hanno le funzioni d'onda

$$\langle x | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{\ell}} \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-x^2/2\ell^2} \quad \langle x | 1 \rangle = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\ell}} \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{x}{\ell} e^{-x^2/2\ell^2}$$

La funzione d'onda esatta del sistema perturbato è

$$\psi_0 \left(x - \frac{\alpha}{m \omega^2} \right) = \frac{1}{\sqrt{\ell}} \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-(x - \alpha/m\omega^2)^2/2\ell^2} \simeq \frac{1}{\sqrt{\ell}} \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-x^2/2\ell^2} e^{+\alpha x / \ell^2 m \omega^2} \simeq \frac{1}{\sqrt{\ell}} \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-x^2/2\ell^2} \left(1 + \frac{\alpha}{\hbar \omega} x \right)$$

$\frac{\hbar}{m \omega} m \omega^2 = \hbar \omega$

$$\langle x | 0 \rangle + \frac{\alpha \ell}{\hbar \omega \sqrt{2}} \langle x | 1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{\ell}} \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-x^2/2\ell^2} \left(1 + \frac{\alpha \ell}{\hbar \omega \sqrt{2}} \frac{\sqrt{2}}{\ell} x \right) = \frac{1}{\sqrt{\ell}} \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-x^2/2\ell^2} \left(1 + \frac{\alpha}{\hbar \omega} x \right)$$

e il secondo ordine non è esatto per la funzione d'onda.

$$\Delta E_0^{(1)} = \frac{g}{\sqrt{\pi} \ell} \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 e^{-x^2/\ell^2} f(x/b) dx \rightarrow \frac{g}{\sqrt{\pi} \ell} \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 e^{-x^2/\ell^2} dx = \Delta E_0^{(1)}(b \rightarrow \infty) \quad \text{per } b \rightarrow \infty$$

poiché $|f(x/b)| < 1$, $\lim_{b \rightarrow \infty} f(x/b) = 1$ e $x^4 e^{-x^2/\ell^2}$ è integrabile.

Diamo ora una stima della rapidità della convergenza:

$$|\Delta E_0^{(1)}(b \rightarrow \infty) - \Delta E_0^{(1)}| = \left| \frac{2g}{\sqrt{\pi} \ell} \int_b^{\infty} e^{-x^2/\ell^2} x^4 (1 - (b/x)^4) dx \right| = \frac{2|g|}{\sqrt{\pi} \ell} \int_b^{\infty} e^{-x^2/\ell^2} (x^4 - b^4) dx \leq$$

$$\leq \frac{2|g|}{\sqrt{\pi} \ell} \int_b^{\infty} e^{-x^2/\ell^2} (x^4 - b^4) \frac{2x}{2b} dx \stackrel{y=x^2}{=} \frac{|g|}{\sqrt{\pi} \ell b} \int_{b^2}^{\infty} e^{-y/\ell^2} (y^2 - b^4) dy =$$

$$= \frac{|g|}{\sqrt{\pi} \ell b} \ell^2 (\ell^2 + b^2) \underbrace{e^{-b^2/\ell^2}}$$

Termine dominante: convergenza esponenziale per $b \gg \ell$.

Oscillatore armonico 3d con perturbazione xy

$$H = \underbrace{\frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \vec{x}^2}_{H_0} + \underbrace{\alpha m \omega^2 xy}_V$$

indichiamo gli autostati imperturbati con $|m_1, m_2, m_3\rangle$ $\deg = \frac{1}{2}(m_1+m_2+m_3)$
 e $H_0|m_1, m_2, m_3\rangle = \hbar\omega(m_1+m_2+m_3 + \frac{3}{2})|m_1, m_2, m_3\rangle$

Il fondamentale $|0,0,0\rangle$ è non degenere e $\langle 0,0,0|xy|0,0,0\rangle = \langle 0|x|0\rangle\langle 0|y|0\rangle\langle 0|0\rangle = 0$ per parità
 (in alternativa $x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a)$, $y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}(b^\dagger + b)$ e $\langle 0|a|0\rangle = \langle 0|b|0\rangle = 0$)

Il primo eccitato è degenere 3 volte: $|1,0,0\rangle, |0,1,0\rangle, |0,0,1\rangle$ e la matrice di V ristretta a questo sottospazio è

$$\begin{matrix} \langle 1,0,0| \\ \langle 0,1,0| \\ \langle 0,0,1| \end{matrix} \begin{pmatrix} 0 & A & 0 \\ A & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} |1,0,0\rangle \\ |0,1,0\rangle \\ |0,0,1\rangle \end{matrix}$$

con $A = \alpha m \omega^2 \langle 1|x|0\rangle\langle 0|y|1\rangle = \alpha m \omega^2 \frac{\hbar}{2} = \frac{1}{2}\alpha\hbar\omega$ $\ell^2 = \hbar/m\omega$

quindi gli stati perturbati dell'ordine zero e le loro energie sono

$$|1,0,0\rangle + |0,1,0\rangle \quad E = (2 + \frac{3}{2})\hbar\omega + \frac{1}{2}\alpha\hbar\omega$$

$$|1,0,0\rangle - |0,1,0\rangle \quad E = (2 + \frac{3}{2})\hbar\omega - \frac{1}{2}\alpha\hbar\omega$$

$$|0,0,1\rangle \quad E = (2 + \frac{3}{2})\hbar\omega$$

ricordiamo $\begin{cases} a^\dagger|m\rangle = \sqrt{m+1}|m+1\rangle \\ a|m\rangle = \sqrt{m}|m-1\rangle \end{cases}$

Il secondo eccitato è degenere 6 volte e la matrice di V su questo sottospazio si scrive

$$\begin{matrix} \langle 0,0,2| \\ \langle 1,0,1| \\ \langle 0,1,1| \\ \langle 2,0,0| \\ \langle 1,1,0| \\ \langle 0,2,0| \end{matrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & B & 0 \\ 0 & 0 & 0 & B & 0 & B \\ 0 & 0 & 0 & 0 & B & 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} |0,0,2\rangle \\ |1,0,1\rangle \\ |0,1,1\rangle \\ |2,0,0\rangle \\ |1,1,0\rangle \\ |0,2,0\rangle \end{matrix}$$

poiché $V|0,0,2\rangle$ può avere elementi di

matrice non nulla solo con $|m_1, m_2, 2\rangle$

$$\text{ma } \langle 0,0,2|V|0,0,2\rangle \propto \langle 0|x|0\rangle\langle 0|y|0\rangle = 0$$

Analogamente $V|0,0,1\rangle$ può avere elementi

di matrice non nulli solo con $|m_1, m_2, 1\rangle$ e si ottengono gli stessi elementi di matrice del primo ecc.

Sinfine $\langle 2,0,0|xy|1,1,0\rangle = \alpha m \omega^2 \frac{\hbar^2}{2} \langle 2|a^\dagger|1\rangle\langle 0|a|1\rangle = \sqrt{2}A$

con $A = \frac{1}{2}\alpha\hbar\omega$

$$\langle 0,2,0|xy|1,1,0\rangle = \alpha m \omega^2 \frac{\hbar^2}{2} \langle 0|a|1\rangle\langle 2|a^\dagger|1\rangle = \sqrt{2}A$$

$$\det \begin{pmatrix} -\lambda & x & 0 \\ x & -\lambda & x \\ 0 & x & -\lambda \end{pmatrix} = -\lambda^3 + 2\lambda x^2 \quad \text{quindi } \lambda=0, \lambda=\pm\sqrt{2}x$$

$$\lambda=0 \quad \vec{v} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$\lambda=\sqrt{2}x \quad \vec{v} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}; \quad \lambda=-\sqrt{2}x \quad \vec{v} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$$

Al primo ordine lo spettro del secondo eccitato diventa

$$\frac{1}{2}(|2,0,0\rangle + \sqrt{2}|1,1,0\rangle + |0,2,0\rangle) \quad E = \hbar\omega(3 + \frac{3}{2}) + \alpha\hbar\omega$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|1,0,1\rangle + |0,1,1\rangle) \quad E = \hbar\omega(3 + \frac{3}{2}) + \frac{1}{2}\alpha\hbar\omega$$

$$|0,0,2\rangle \quad E = \hbar\omega(3 + \frac{3}{2}) \quad \left. \begin{matrix} E = \hbar\omega(3 + \frac{3}{2}) \\ E = \hbar\omega(3 + \frac{3}{2}) \end{matrix} \right\} \text{rimane una degenerazione}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|2,0,0\rangle - |0,2,0\rangle) \quad E = \hbar\omega(3 + \frac{3}{2})$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|1,0,1\rangle - |0,1,1\rangle) \quad E = \hbar\omega(3 + \frac{3}{2}) - \frac{1}{2}\alpha\hbar\omega$$

$$\frac{1}{2}(|2,0,0\rangle - \sqrt{2}|1,1,0\rangle + |0,2,0\rangle) \quad E = \hbar\omega(3 + \frac{3}{2}) - \alpha\hbar\omega$$

Il problema può essere risolto esattamente, infatti:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2 + z^2) + \alpha m \omega^2 xy$$

e si ha $x^2 + y^2 + 2\alpha xy = (1+\alpha) \left(\frac{x+y}{\sqrt{2}}\right)^2 + (1-\alpha) \left(\frac{x-y}{\sqrt{2}}\right)^2$. Definendo quindi $X = \frac{x+y}{\sqrt{2}}$ e $Y = \frac{x-y}{\sqrt{2}}$

abbiamo $\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial X}{\partial x} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial Y}{\partial x} \frac{\partial}{\partial Y} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\partial_X + \partial_Y)$ e $\frac{\partial}{\partial y} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\partial_X - \partial_Y)$

quindi $\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2}$ e $\nabla^2 \rightarrow \nabla'^2$ con questo cambio di variabile

La hamiltoniana si risolve quindi nella forma $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \{ (1+\alpha) X^2 + (1-\alpha) Y^2 + z^2 \}$

che è la hamiltoniana di un oscillatore anisotropo, con autovalori

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \hbar \omega \left(\sqrt{1+\alpha} n_1 + \sqrt{1-\alpha} n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right) \underset{\alpha \ll 1}{\approx} \hbar \omega \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \alpha (n_1 - n_2) \right)$$

Nota: al primo ordine gli stati con $n_1 = n_2$ sono degeneri e hanno la stessa energia del caso imperturbato, ma questa degenerazione è rimossa al secondo ordine.

Teoria delle pert. degenerate al secondo ordine

caso in cui la deg. è rimossa al primo ordine

$$H_0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A \end{pmatrix} \quad V = \begin{pmatrix} 0 & g & g \\ g & 0 & g \\ g & g & 0 \end{pmatrix} \quad \text{con } A, g > 0 \text{ per semplicità}$$

livelli esatti $\begin{matrix} & -g \\ & \swarrow \quad \searrow \\ \frac{1}{2} (A+g \pm \sqrt{A^2 - 2Ag + 9g^2}) & \end{matrix} \begin{matrix} A + 2g^2/A \\ g - 2g^2/A \end{matrix}$

.) correzione al primo ordine dei livelli energetici

V sul sottospazio deg è $\begin{pmatrix} 0 & g \\ g & 0 \end{pmatrix}$ quindi gli autostati all'ordine zero sono

$$|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad |\beta\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}; \quad |\gamma\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

e $\Delta E_\alpha^{(1)} = g$, $\Delta E_\beta^{(1)} = -g$, $\Delta E_\gamma^{(1)} = 0$, quindi la degenerazione è rimossa al primo ordine

.) correzione al secondo ordine dei livelli energetici vedi London 3, § 39, problema 2

Si può usare la formula simil non deg $\Delta E_i^{(2)} = \sum_{m \notin \text{deg}\{i\}} \frac{|\langle i|V|m\rangle|^2}{E_{\text{deg}}^{(0)} - E_m^{(0)}}$ dove $|i\rangle$ è lo stato all'ordine zero.

$$\Delta E_\alpha^{(2)} = \sum_{m \text{ non deg}} \frac{|\langle \alpha|V|m\rangle|^2}{E_{\text{deg}}^{(0)} - E_m^{(0)}} = \frac{|\langle \alpha|V|\gamma\rangle|^2}{0 - A} = \frac{|\sqrt{2}g|^2}{-A} = -\frac{2g^2}{A} \quad \text{quindi } E_\alpha \approx g - \frac{2g^2}{A}$$

$$\Delta E_\beta^{(2)} = \sum_{m \text{ non deg}} \frac{|\langle \beta|V|m\rangle|^2}{E_{\text{deg}}^{(0)} - E_m^{(0)}} = 0 \quad \text{poiché } \langle \beta|V|\gamma\rangle = 0 \quad \text{quindi } E_\beta \approx -g$$

$$\Delta E_\gamma^{(2)} = \sum_{m \neq \gamma} \frac{|\langle \gamma|V|m\rangle|^2}{E_\gamma^{(0)} - E_m^{(0)}} = \frac{|\langle \gamma|V|\alpha\rangle|^2}{A - 0} = \frac{2g^2}{A} \quad \text{quindi } E_\gamma \approx A + \frac{2g^2}{A}$$

caso in cui la deg non è rimossa al primo ordine

$$H_0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A \end{pmatrix}; \quad V = \begin{pmatrix} 0 & 0 & g \\ 0 & 0 & g \\ g & g & 0 \end{pmatrix} \quad \text{livelli esatti} \begin{cases} 0 \\ \frac{1}{2}(A \pm \sqrt{A^2 + 8g^2}) \end{cases} < \begin{cases} A + 2g^2/A \\ -2g^2/A \end{cases}$$

$$|\gamma\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ non degenera, } E_\gamma^{(0)} = A \text{ e } \Delta E_\gamma^{(1)} = \langle \gamma | V | \gamma \rangle = 0$$

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ e } |\beta\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ sono degeneri al primo ordine } E_\alpha^{(0)} = E_\beta^{(0)} = 0 \text{ e la degenerazione non è risolta al primo ordine: } \Delta E_\alpha^{(1)} = \Delta E_\beta^{(1)} = 0.$$

$$\text{Al secondo ordine per } \gamma \text{ è } \Delta E_\gamma^{(2)} = \sum_{m \neq \gamma} \frac{|\langle m | V | \gamma \rangle|^2}{E_\gamma^{(0)} - E_m^{(0)}} = 2 \frac{g^2}{A}$$

Per i livelli degeneri serve costruire la matrice (vedi Randou 3, § 39)

$$W_{ij} = \langle i | V | j \rangle + \sum_{m \text{ non deg}} \langle i | V | m \rangle \frac{1}{E_{\text{deg}}^{(0)} - E_m^{(0)}} \langle m | V | j \rangle \quad \text{con } i, j \in \text{sottospazio degeneri}$$

e usare W nell'equazione secolare.

Nel caso in esame si vede subito che si ha $W = -\frac{1}{A} \begin{pmatrix} g^2 & g^2 \\ g^2 & g^2 \end{pmatrix}$, che ha autovalori 0 e $-\frac{2g^2}{A}$ (la matrice ha rango 1, quindi ha sicuramente un autovalore nullo, l'altro è $-2g^2/A$).

Dimensioni finite del nucleo

Per nuclei di isotopi non puntiforme la hamiltoniana è

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - e\phi(\vec{r}) = \underbrace{\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}}_{H_0} + \underbrace{\frac{e^2}{r} - e\phi(\vec{r})}_{V(\vec{r})}$$

con $V(\vec{r})$ significativamente diversa da zero solo se $|\vec{r}| < R$.

Serve teoria pert. degenera perché in dato livello $n=1,2,\dots$ ci sono $l=0,\dots,n-1$ e per ogni valore di l ci sono $m=-l,\dots,+l$.

Se $V(\vec{r})$ è a simmetria sferica (quindi nucleo sferico) allora la matrice di V sul sottospazio degenera è diagonale, in quanto $\langle l_1 m_1 | V(\vec{r}) | l_2 m_2 \rangle \propto \delta_{l_1 l_2} \delta_{m_1 m_2}$ per W-E. quindi tutta l'azione "come se" il sistema fosse non degenera.

Vediamo ora cosa succede per $V(\vec{r})$ generica (cioè nucleo non sferico: esempio deutone 96% $l=0$, 4% $l=2$)

$$\langle r | m l m \rangle \sim C_l Y_{lm}(\hat{r}) r^l e^{-r/na} (1 + \dots) \rightarrow \text{polinomio in } \frac{r}{na} \text{ influente per la analisi che seguirà}$$

$$1 = \langle m l m | m l m \rangle \sim C_l^2 \int_0^\infty r^{2l} e^{-2r/na} (1 + \dots)^2 r^2 dr \sim C_l^2 a^{3l+3} \Rightarrow C_l \sim \frac{1}{a^l} \frac{1}{a^{3/2}}$$

analisi dimensionale

Effettuiamo ora una stima dell'elemento di matrice di V , usando per le analisi dimensionali

$$V \sim e^2/r \text{ e restringendo gli integrali radiali su } (0, R)$$

$$\langle m_1 l_1 m_1 | V | m_2 l_2 m_2 \rangle \sim C_{l_1} C_{l_2} \int_0^R Y_{l_1 m_1}^* Y_{l_2 m_2} r^{l_1+l_2} e^{-r/m_1 a - r/m_2 a} \frac{e^2}{r} (1+...) (1+...) r^2 dr \sim$$

$$\sim a^{-l_1-l_2-3} e^2 R^{l_1+l_2+2} = \frac{e^2}{a} \left(\frac{R}{a}\right)^{l_1+l_2+2} \ll \frac{e^2}{a}$$

subdominante non si annulla per W.E.

Se ora si scrive la matrice della perturbazione su ogni sottospazio degenere il termine dominante è $l_1=l_2=0$, poi ci sono $(1,0)$ e $(0,1)$ (che si annullano nel caso di simmetria sferica) e poi $(1,1), (2,0), (0,2)$ (ultimi due si annullano nel caso con simmetria sferica).

Visto che l'effetto dominante si ha sugli stati $S(l=0)$ consideriamo direttamente questi, come se il problema fosse non degenere.

$$\Delta E_{ms}^{(1)} = \int \psi_{ms}^*(r) V(r) \psi_{ms}(r) d^3r \simeq |\psi_{ms}(0)|^2 \int V(r) d^3r = -e |\psi_{ms}(0)|^2 \int \left(\phi(r) - \frac{e}{r}\right) d^3r$$

a meno di potenze ulteriori in R/a

Usiamo $\nabla^2 r^2 = 6$: $\Delta E_{ms}^{(1)} \simeq -\frac{e}{6} |\psi_{ms}(0)|^2 \int (\nabla^2 r^2) \left(\phi(r) - \frac{e}{r}\right) d^3r \stackrel{\text{integr. per parti}}{=}$

$$= -\frac{e}{6} |\psi_{ms}(0)|^2 \int r^2 \nabla^2 \left(\phi(r) - \frac{e}{r}\right) d^3r = \frac{e}{6} |\psi_{ms}(0)|^2 4\pi \int r^2 \left(\rho(r) - e \delta(r)\right) d^3r =$$

$\nabla^2 \phi = -4\pi \rho$

$$= \frac{8}{3} \pi e^2 |\psi_{ms}(0)|^2 \langle r^2 \rangle \quad \text{dove} \quad \langle r^2 \rangle = \frac{1}{e} \int r^2 \rho(r) d^3r$$

Per sfera uniformemente carica di raggio R : $\rho(r) = \begin{cases} \frac{e}{\frac{4}{3}\pi R^3} & \text{se } r < R \\ 0 & \text{se } r > R \end{cases} \Rightarrow \langle r^2 \rangle = \frac{e}{\frac{4}{3}\pi R^3} 4\pi \int_0^R r^4 dr = \frac{3}{5} R^2$

Per l'atomo di idrogeno si ha $|\psi_{ms}(0)|^2 = \frac{1}{\pi} \frac{1}{m^3 a^3}$ quindi $\Delta E_{ms}^{(1)} \simeq \frac{8}{3} \frac{e^2}{a} \frac{1}{m^3} \underbrace{\frac{\langle r^2 \rangle}{a^2}}_{\simeq 10^{-10}}$

Effetto Stark per $n=2$ dell'idrogeno

.) Caso non relativistico

Il livello n -esimo dell'atomo di idrogeno non-rel. ha degenerazione n^2 : al livello $n=2$ contribuiscono $l=0$ e $l=1$, quindi gli stati sono $|0,0\rangle$, $|1,0\rangle$ e $|1,\pm 1\rangle$.

Per campo elettrico lungo $\hat{z}$ la perturbazione è $V = -e z E$ e si hanno le regole di selezione

.) V dispone sotto parità $\Rightarrow$ unici elementi non nulli connettono $l=0$ e $l=1$

.) $[V, L_z] = 0 \Rightarrow$ unici elementi non nulli connettono stati con m uguale

Di conseguenza l'unico elemento da calcolare è $\langle 0,0|V|1,0\rangle$ (tutti $n=2$)

$$\psi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-r/2a} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) \frac{1}{a^{3/2}} \frac{1}{\sqrt{4\pi}}; \quad \psi_{10} = \frac{1}{2\sqrt{6}} \frac{r}{a} e^{-r/2a} \frac{1}{a^{3/2}} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$$

e usiamo per semplicità $a=1$ nel calcolo, ripristinando alla fine

$$\begin{aligned} \langle 0,0|V|1,0\rangle &= -e E \frac{1}{16\pi} \int d\Omega r^2 dr e^{-r} r^2 \cos^2\theta \left(1 - \frac{r}{2}\right) = \frac{1}{16\pi} \int_{-1}^1 \cos^2\theta d\cos\theta \int_0^\infty r^4 \left(1 - \frac{r}{2}\right) e^{-r} dr \\ &\quad \left[\begin{array}{l} \uparrow \\ V = -e E r \cos\theta \end{array} \right] \quad \left[\int_{-1}^1 \cos^2\theta d\cos\theta = \int_{-1}^1 x^2 dx = \frac{2}{3} \right] \\ &= -e E \frac{1}{16\pi} \cdot \frac{2}{3} \cdot 2\pi \int_0^\infty r^4 \left(1 - \frac{r}{2}\right) e^{-r} dr = \int_0^\infty r^k e^{-r} dr = k! \\ &= -e E \frac{1}{12} \left(4! - \frac{1}{2} 5!\right) = -e E \frac{1}{12} (24 - 60) = +3eE = +3eEa \end{aligned}$$

$\nwarrow$ ripristinando le dimensioni

L'unico blocco non banale di V è quindi (nel sottospazio $|0,0\rangle, |1,0\rangle$) $\begin{pmatrix} 0 & 3eEa \\ 3eEa & 0 \end{pmatrix}$

che ha autovettori e autovalori

$$|sym\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0,0\rangle + |1,0\rangle) \quad \lambda = 3eEa \Rightarrow E = -\frac{e^2}{2 \cdot 2^2 \cdot a} + 3eEa$$

$$|anti\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0,0\rangle - |1,0\rangle) \quad \lambda = -3eEa \Rightarrow E = -\frac{e^2}{2 \cdot 2^2 \cdot a} - 3eEa$$

NOTA : $|sym\rangle$ e $|anti\rangle$ non sono autostati dell'operatore parità e quindi possono generare un effetto Stark lineare ($P|sym\rangle = |anti\rangle$ e $P|anti\rangle = |sym\rangle$)

La componente $\hat{z}$ del momento di dipolo elettrico dello stato $|sym\rangle$ è

$$\langle sym|ez|sym\rangle = \langle 0,0|ez|1,0\rangle = -\langle 0,0|\frac{V}{E}|1,0\rangle = -3ea$$

mentre $\langle anti|ez|anti\rangle = 3ea$

.) Caso relativistico

$n=2$ con spin $\Rightarrow$ totale di $4 \times 2 = 8$ stati ma non tutti degeneri a causa dell'interazione fine e Lamb-shift.

spettro "vero" di $n=2$

$\uparrow E$	$2p_{3/2}$	$\updownarrow \approx 4 \times 10^{-5} \text{ eV}$ interazione fine $\updownarrow \approx 5 \times 10^{-6} \text{ eV}$ Lamb-shift
$ $	$2s_{1/2}$	
$\downarrow$	$2p_{1/2}$	

Utilizziamo la base $|j_1 j_2\rangle$ in cui è diagonale l'interazione fine e vediamo come si scrive la matrice delle perturbazioni (int. fine + Lamb-shift + Stark).

Le regole di selezione per gli elementi di matrice di $-eEz$ sono

1) parità: elementi di matrice non nulli solo tra $l=1$ e $l=0$

2) $[V, L_z]=0, [V, S_z]=0$: elementi di matrice non nulli tra stati con stessi l_z e j_z

C'è inoltre invarianza sotto la riflessione $x \rightarrow -x$ ($y \rightarrow -y$) che inverte le componenti $\hat{L}$ dei momenti, quindi ci si può limitare ai sottospazi con $j_z \geq 0$

Notiamo che lo stato $|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, l=1\rangle$ non è toccato dalla perturbazione: elemento diagonale nullo per parità, elementi fuori diagonale nulli per regola di sel. su j_z .

Considerando $j_z \geq 0$ abbiamo 3 stati da considerare: $|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}, l=1\rangle; |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, l=1\rangle; |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, l=0\rangle$ e l'elemento di matrice calcolato nel caso non rel. era $\langle l=1, l_z=0 | z | l=0, l_z=0 \rangle = -3a$.

Usando i coeff. di C-G. di $1 \otimes \frac{1}{2}$ abbiamo

$$|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}, l=1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |l=1, l_z=1\rangle |s=\frac{1}{2}, s_z=-\frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |l=1, l_z=0\rangle |s=\frac{1}{2}, s_z=\frac{1}{2}\rangle$$

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, l=1\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |l=1, l_z=1\rangle |s=\frac{1}{2}, s_z=-\frac{1}{2}\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} |l=1, l_z=0\rangle |s=\frac{1}{2}, s_z=\frac{1}{2}\rangle$$

quindi

$$\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, l=0 | z | \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, l=1 \rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} \langle l=0, l_z=0 | z | l=1, l_z=0 \rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} (-3a) = -\sqrt{6} a$$

$$\langle l=0, l_z=0 | s=\frac{1}{2}, s_z=\frac{1}{2} |$$

$$\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, l=0 | z | \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, l=1 \rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle l=0, l_z=0 | z | l=1, l_z=0 \rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}} (-3a) = \sqrt{3} a$$

$$V_{\text{fine}} + V_{\text{Lamb}} + V_{\text{Stark}} = \begin{pmatrix} E_{2p_{3/2}} & 0 & 0 \\ 0 & E_{2p_{1/2}} & 0 \\ 0 & 0 & E_{2s_{1/2}} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sqrt{6} e E a \\ 0 & 0 & -\sqrt{3} e E a \\ \sqrt{6} e E a & -\sqrt{3} e E a & 0 \end{pmatrix} =$$

sui tre livelli considerati:

$$= E_{2p_{1/2}} + \begin{pmatrix} \Delta_F & 0 & -\sqrt{2} x \\ 0 & 0 & x \\ -\sqrt{2} x & x & \Delta_L \end{pmatrix} \quad \begin{array}{l} \Delta_F = \text{split fine} \\ \Delta_L = \text{Lamb-shift} \\ x = -\sqrt{3} e E a \end{array}$$

Se $|x| \gg \Delta_F > \Delta_L$ allora si può appross. $\Delta_F \sim \Delta_L \sim 0$ e usare teoria delle pert. degenerate

diagonalizzo $\begin{pmatrix} 0 & 0 & -\sqrt{2} x \\ 0 & 0 & x \\ -\sqrt{2} x & x & 0 \end{pmatrix}$ $\lambda = \begin{cases} 0 \\ \pm \sqrt{3} x \end{cases}$ Effetto Stark lineare su livelli degeneri nel limite di campo forte (= limite non-rel)

Se $|x| \ll \Delta_L < \Delta_F$ possiamo usare teoria delle pert. non degenerate (deg in j_z compatibile con la simmetria di V) e i termini dominanti del 2° ordine sono (+altri termini dovuti a "n" diversi)

$$E_1 \simeq \Delta_F + \frac{2x^2}{\Delta_F - \Delta_L} + \dots; \quad E_2 = 0 + \frac{x^2}{0 - \Delta_L} + \dots; \quad E_3 = \Delta_L + \frac{2x^2}{\Delta_L - \Delta_F} + \frac{x^2}{\Delta_L - 0} + \dots$$

Se avesse senso $\Delta_L \ll |x| \ll \Delta_F$ (in realtà $\Delta_L \simeq \frac{1}{10} \Delta_F$) ci sarebbe effetto Stark quadratico sul livello non deg. Δ_F e due Stark lineari sui livelli degeneri.

Effetto Stark per $m=1$ dell'idrogeno

Usando $V = -eEz$ si ha ovviamente $\langle 1s|V|1s\rangle = 0$ a causa sia dell'invarianza per parità che del teorema di W-E. Al secondo ordine

$$E^{(2)} = \sum_{k \neq 1s} \frac{|\langle k|V|1s\rangle|^2}{E_{1s} - E_k} = e^2 E^2 \sum_{k \neq 1s} \frac{|\langle k|z|1s\rangle|^2}{E_{1s} - E_k}$$

poiché $z \sim Y_{10}$ per W-E. solo gli stati k con $l=1, m=0$ possono contribuire alla somma e questo è anche consistente con le regole di selezione sulla parità. Nota: contribuiscono tutti gli $n \geq 2$ e potenzialmente anche gli stati del continuo, che devono essere considerati nella somma.

Lo stato stazionario al primo ordine è $|\psi\rangle = |1s\rangle - eE \sum_k |k\rangle \frac{\langle k|z|1s\rangle}{E_{1s} - E_k}$

quindi al primo ordine nel campo esterno il momento di dipolo è

$$\langle \psi | e\vec{x} | \psi \rangle = -e^2 E \sum_{k \neq 1s} \frac{1}{E_{1s} - E_k} \left\{ \langle 1s | \vec{x} | k \rangle \langle k | z | 1s \rangle + \langle 1s | z | k \rangle \langle k | \vec{x} | 1s \rangle \right\} + \dots$$

poiché x e y si scrivono come combinazioni di $Y_{1\pm 1}$ e si è visto prima che gli unici stati con $\langle k|z|1s\rangle \neq 0$ sono quelli con $l=1, m=0$ si ha $\langle 1s|x|k\rangle = \langle 1s|y|k\rangle = 0$ nella somma e

$$d_z = -2e^2 E \sum_{k \neq 1s} \frac{|\langle k|z|1s\rangle|^2}{E_{1s} - E_k} \quad \text{inoltre per def di polarizzabilità} \quad \vec{d} = \alpha \vec{E}, \text{ quindi}$$

$$\alpha = -2e^2 \sum_{k \neq 1s} \frac{|\langle k|z|1s\rangle|^2}{E_{1s} - E_k} > 0 \quad \text{e quindi} \quad E_0^{(2)} = -\frac{1}{2} \alpha E^2 \quad \left(\text{consistente con } \vec{d} = -\frac{\partial E}{\partial \vec{E}} \right)$$

$$\text{dimensioni: } [\alpha] = \frac{e \cdot L}{E} = \frac{e}{L^2} \frac{L^3}{E} = L^3$$

1) upper bound: in $\alpha = 2e^2 \sum_{k \neq 1s} \frac{|\langle k|z|1s\rangle|^2}{E_k - E_{1s}}$ si ha per tutti i denominatori $E_k - E_{1s} \geq E_{2p} - E_{1s}$

$$\text{quindi} \quad \alpha \leq \frac{2e^2}{E_{2p} - E_{1s}} \sum_{k \neq 1s} |\langle k|z|1s\rangle|^2 = \frac{2e^2}{E_{2p} - E_{1s}} \langle 1s|z| \sum_{k \neq 1s} |k\rangle \langle k|z|1s\rangle = \frac{2e^2}{E_{2p} - E_{1s}} \langle 1s|z^2|1s\rangle$$

dove nell'ultima uguaglianza si è usata la relazione di completezza in quanto $\langle 1s|z|1s\rangle = 0$, quindi

$$\sum_{k \neq 1s} |k\rangle \langle k|z|1s\rangle = \sum_k |k\rangle \langle k|z|1s\rangle = z|1s\rangle \quad \text{Abbiamo } E_{2p} - E_{1s} = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{a} + \frac{1}{2} \frac{e^2}{a} = \frac{3}{8} \frac{e^2}{a}$$

$$\text{inoltre } \langle 1s|z^2|1s\rangle = \frac{1}{3} \langle 1s|x^2|1s\rangle \text{ e usando } R_{1s} = \frac{2}{a^{3/2}} e^{-r/a} \text{ abbiamo}$$

$$\langle 1s|x^2|1s\rangle = \frac{4}{a^3} \int_0^\infty e^{-2r/a} r^2 x^2 dx = \frac{4}{a^3} \frac{a^5}{2^5} \int_0^\infty x^4 e^{-x} dx = \frac{a^2}{2^3} \cdot 4! = 3a^2$$

$x = \frac{a}{2} x$

$$\text{e di conseguenza } \alpha \leq 2e^2 \cdot \frac{8}{3} \frac{a}{e^2} \cdot a^2 = \frac{16}{3} a^3 \approx 5.33 a^3.$$

2) lower bound: poiché ogni termine della serie $\alpha = 2e^2 \sum_{k \neq 1s} \frac{|\langle k|z|1s\rangle|^2}{E_k - E_{1s}}$ è positivo, in particolare

$$\alpha \geq \frac{2e^2}{E_{2p} - E_{1s}} |\langle 2,1,0|z|1s\rangle|^2$$

$\uparrow \langle m, l, m |$

Si era visto prima che $E_{2p} - E_{1s} = \frac{3}{8} \frac{e^2}{a}$ inoltre $R_{2p} = \frac{1}{2\sqrt{6}} \frac{1}{a^{3/2}} \frac{x}{a} e^{-x/2a}$, $Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$

$$\begin{aligned} \text{quindi } \langle 2,1,0 | 2,1,1 \rangle &= \frac{1}{2\sqrt{6}} \frac{1}{a^{3/2}} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{2}{a^{3/2}} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \int_0^\infty \frac{x^4}{a} e^{-\frac{3}{2}x/a} dx \underbrace{\int_{-1}^1 \cos^2\theta d\cos\theta}_{2/3} 2\pi = \\ &= \frac{1}{3\sqrt{2}} \frac{1}{a^4} \int_0^\infty x^4 e^{-\frac{3}{2}x/a} dx \stackrel{x=\frac{2}{3}ay}{=} \\ &= \frac{1}{3\sqrt{2}} \frac{2^5}{3^5} a \int_0^\infty y^4 e^{-y} dy = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{2^5}{3^6} a \cdot 4 \cdot 3 \cdot 2 = \frac{2^8}{\sqrt{2} 3^5} a \end{aligned}$$

Di conseguenza $\alpha \geq 2e^2 \frac{2^3}{3} \frac{a}{e^2} \frac{1}{2} \frac{2^{16}}{3^{10}} a^2 = \frac{2^{19}}{3^{11}} a^3 \simeq 2.96 a^3$ quindi $2.96 a^3 \leq \alpha \leq 5.33 a^3$

Passiamo ora al calcolo esatto di α usando il metodo di Dolgorny-Lewis: ricordiamo che

lo stato perturbato al primo ordine si scrive $|\psi^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq 0} |\psi_m\rangle \frac{1}{E_0 - E_m} \langle \psi_m | V | \psi_0 \rangle$

e che quindi la perturbazione al secondo ordine dell'energia si scrive come

$$\underline{E_0^{(2)} = \sum_{m \neq 0} \frac{|\langle \psi_m | V | \psi_0 \rangle|^2}{E_0 - E_m} = \langle \psi_0 | V | \psi^{(1)} \rangle}$$

L'equaz. di Schrodinger $\hat{H}_0 + V(|\psi_0\rangle + |\psi^{(1)}\rangle + \dots) = (E_0 + E_0^{(1)} + \dots)(|\psi_0\rangle + |\psi^{(1)}\rangle + \dots)$

inoltre sappiamo che $E_0^{(1)} = 0$ per l'effetto Stark su $m=1$ quindi al primo ordine si ha

$$\hat{H}_0 |\psi^{(1)}\rangle + V |\psi_0\rangle = E_0 |\psi^{(1)}\rangle$$

che è una equazione alle derivate parziali non omogenea, da risolvere con il vincolo che $\langle x | \psi^{(1)} \rangle$

sia una funzione a quadrato sommabile e che $\langle \psi^{(1)} | \psi_0 \rangle = 0$.

Nel caso specifico abbiamo $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{x}$, $V = -e\mathcal{E} \cos\theta$, $\langle x | \psi_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{a^{3/2}} e^{-x/a}$.

Visto che il termine "forzante" è proporzionale a $\cos\theta$ proviamo l'ansatz

$$\langle x | \psi^{(1)} \rangle = R(x) \cos\theta \quad (\text{che soddisfa automaticamente } \langle \psi^{(1)} | \psi_0 \rangle = 0)$$

Ricordando che $\nabla^2 = \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} (x^2 \frac{\partial}{\partial x}) - \frac{L^2}{\hbar^2 x^2}$, notiamo che $\cos(\theta) \propto Y_{10}$, quindi abbiamo

$L^2 |\psi^{(1)}\rangle = \hbar^2 \pm(\pm 1) |\psi^{(1)}\rangle = 2\hbar^2 |\psi^{(1)}\rangle$ quindi in rappresent. delle coordinate abbiamo

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} (x^2 \frac{\partial}{\partial x}) R}_{H_0 |\psi_1\rangle} + \underbrace{\frac{\hbar^2}{m x^2} R}_{V |\psi\rangle} - \underbrace{\frac{e^2}{x} R}_{-E_0 |\psi^{(1)}\rangle} - e\mathcal{E} \psi_0(x) + \frac{1}{2} \frac{e^2}{a} R = 0 \quad \text{dove si è usato } E_0 = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{a}$$

Procediamo con la sostituzione $R(x) = \psi_0(x) f(x)$: abbiamo

$$\begin{aligned} \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} (x^2 \frac{\partial}{\partial x} [e^{-x/a} f]) &= \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} [x^2 (-\frac{1}{a} e^{-x/a} f + e^{-x/a} f')] = \\ &= \frac{1}{x^2} (-\frac{2x}{a} e^{-x/a} f + \frac{1}{a^2} x^2 e^{-x/a} f - \frac{2x}{a} e^{-x/a} f' + 2x e^{-x/a} f' - \frac{1}{a} x^2 e^{-x/a} f + x^2 e^{-x/a} f'') = \\ &= e^{-x/a} f'' + 2e^{-x/a} (\frac{1}{x} - \frac{1}{a}) f' + e^{-x/a} (\frac{1}{a^2} - \frac{2}{ax}) f \quad \text{quindi l'equazione si scrive} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \{ f'' + 2(\frac{1}{x} - \frac{1}{a}) f' + (\frac{1}{a^2} - \frac{2}{ax}) f \} + \frac{\hbar^2}{m x^2} f - \frac{e^2}{x} f - e\mathcal{E} x + \frac{1}{2} \frac{e^2}{a} f &= 0 \end{aligned}$$

e il coeff. che moltiplica f è in realtà $\frac{\hbar^2}{m x^2}$ infatti si ha

$$-\frac{\hbar^2}{2ma^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{2}{a^2} + \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{x^2} - \frac{e^2}{x} + \frac{1}{2} \frac{e^2}{a} = \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{x^2}$$

infatti usiamo $a = \left(\frac{\hbar c}{e^2}\right)^2 \frac{e^2}{mc^2} = \frac{\hbar^2}{me^2}$ si ha $\frac{\hbar^2}{2ma} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{me^2}{\hbar^2} = \frac{e^2}{2}$; $\frac{\hbar^2}{ma} = \frac{\hbar^2}{m} \frac{me^2}{\hbar^2} = e^2$

Siamo quindi arrivati all'equazione $-\frac{\hbar^2}{2m} f'' - \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{1}{x} - \frac{1}{a}\right) f' + \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{x^2} f - eEx = 0$

Cerchiamo soluzioni con ansatz $b x^d$ per x piccolo obliando (tenendo i termini dominanti)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} b d(d-1) x^{d-2} - \frac{\hbar^2}{m} b d x^{d-2} + \frac{\hbar^2}{m} b x^{d-2} - eEx = 0 \quad \text{da cui}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} b (\alpha(\alpha-1) + 2\alpha - 2) x^{\alpha-2} - eEx = 0 \quad ; \quad 0 = \alpha^2 + \alpha - 2 = (\alpha+2)(\alpha-1) \quad \begin{matrix} \alpha = -2 \\ \alpha = 1 \end{matrix} \quad \text{in entrambi i casi}$$

il termine non omogeneo $-eEx$ non contribuisce, $\alpha=1$ corrisponde a una sol. normalizzata, $\alpha=-2$ no.

$$f(x) = \frac{E}{e} (ax + \frac{1}{2}x^2) \quad (\text{nota: per come \(\epsilon\) stata definita \(f\) deve essere adimensionale e infatti})$$

$$f' = \frac{E}{e} (a+x); \quad f'' = \frac{E}{e} \quad \text{si ha} \quad \left[\frac{Eax}{e} \right] = [eEx] \left[\frac{x}{e^2} \right] = E \cdot \frac{1}{E} = 1$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{a} - \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{1}{x} - \frac{1}{a}\right) \frac{1}{e} (a+x) + \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{x^2} \frac{1}{e} (ax + \frac{1}{2}x^2) - eEx =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{e} - \frac{\hbar^2}{m} \frac{a}{e} - \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{e} + \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{e} + \frac{\hbar^2}{m} \frac{x}{ae} + \frac{\hbar^2}{m} \frac{a}{e} + \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{e} - eEx = 0 \quad \left(a = \frac{\hbar^2}{me^2}\right)$$

Quindi $\psi^{(1)}(x) = \frac{E}{e} (ax + \frac{1}{2}x^2) \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{a^{3/2}} e^{-x/a} \cos\theta$ e usiamo ora $E_0^{(2)} = \langle \psi_0 | V | \psi^{(1)} \rangle$:

$$E_0^{(2)} = \frac{1}{\pi a^3} \frac{E}{e} (-eE) \int_0^\infty x (ax + \frac{1}{2}x^2) e^{-2x/a} x^2 dx \int_{-1}^1 \cos^2\theta d\cos\theta \int_0^{2\pi} d\phi =$$

$$= -\frac{4}{3} \frac{E^2}{a^3} \int_0^\infty x (ax + \frac{1}{2}x^2) e^{-2x/a} x^2 dx \stackrel{x = \frac{a}{2}x}{=} \frac{4\pi}{3}$$

$$= -\frac{4}{3} \frac{E^2}{a^3} a^6 \frac{1}{2^4} \int_0^\infty \left(\frac{1}{2}x^4 + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{4}x^5\right) e^{-x} dx = -\frac{1}{12} E^2 a^3 \left(\frac{1}{2}4! + \frac{1}{8}5!\right) \stackrel{12+15=27}{=} -\frac{9}{4} E^2 a^3$$

Ricordando che $E_0^{(2)} = -\frac{1}{2}\alpha E^2$ si ha quindi $\alpha = \frac{9}{2}a^3 = 4,5a^3$ consistentemente con i limiti trovati in precedenza.

Interazione di dipolo mag. tra spin 1/2 e Zeeman

Due spin 1/2 situati in posizioni fisse interagiscono con hamiltoniana

$$H = - \frac{3\mu_1\mu_2}{r^3} \left[(\vec{S}^{(1)} \cdot \hat{n})(\vec{S}^{(2)} \cdot \hat{n}) - \frac{1}{3} \vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} \right] \quad \text{con } \hat{n} = \frac{\vec{r}}{r}$$

1) Risolviamo H in termini di $\vec{S} = \vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)}$ e verificare se H commuta con $\vec{S}$ e/o $\vec{S}^2$

$$\vec{S}^{(i)} = \frac{1}{2} \vec{\sigma}^{(i)} \quad \text{e ricordiamo che } (\vec{a} \cdot \vec{\sigma})^2 = |\vec{a}|^2 \quad \text{quindi } (\hat{n} \cdot \vec{S}^{(i)})^2 = \frac{1}{4}, \text{ mentre si ha}$$

$$(\vec{S} \cdot \hat{n})^2 = [(\vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)}) \cdot \hat{n}]^2 = (\vec{S}^{(1)} \cdot \hat{n})^2 + (\vec{S}^{(2)} \cdot \hat{n})^2 + 2(\vec{S}^{(1)} \cdot \hat{n})(\vec{S}^{(2)} \cdot \hat{n}) = \frac{1}{2} + 2(\vec{S}^{(1)} \cdot \hat{n})(\vec{S}^{(2)} \cdot \hat{n})$$

$\uparrow$ $[\vec{S}^{(1)}, \vec{S}^{(2)}] = 0$

$$\text{quindi } (\vec{S}^{(1)} \cdot \hat{n})(\vec{S}^{(2)} \cdot \hat{n}) = \frac{1}{2} (\vec{S} \cdot \hat{n})^2 - \frac{1}{4}$$

$$\text{Soltanto } \vec{S}^2 = (\vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)})^2 = (\vec{S}^{(1)})^2 + (\vec{S}^{(2)})^2 + 2\vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} = 2\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1) + 2\vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} = \frac{3}{2} + 2\vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} \quad \text{quindi}$$

$$H = -3 \frac{\mu_1\mu_2}{r^3} \left[\frac{1}{2} (\vec{S} \cdot \hat{n})^2 - \frac{1}{4} - \frac{1}{3} \left(\frac{1}{2} \vec{S}^2 - \frac{3}{4} \right) \right] = - \frac{3\mu_1\mu_2}{r^3} \left[\frac{1}{2} (\vec{S} \cdot \hat{n})^2 - \frac{1}{6} \vec{S}^2 \right]$$

A causa del primo termine $[H, \vec{S}] \neq 0$ (H è invariante per rotazioni simultanee di spin e spaziali, non solo sotto rotazioni di spin), tuttavia $[H, \vec{S}^2] = 0$ poiché $[\vec{S}, \vec{S}^2] = 0$

Altro modo di vedere $[H, \vec{S}^2] = 0$: H è simmetrica per scambio degli spin, lo stato di tripletto è simmetrico sotto scambio degli spin mentre il singoletto è antisimmetrico, quindi $\langle \text{sing} | H | \text{triplet} \rangle = 0$

$$H = \left(\begin{array}{c|ccc} \text{sing} & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & & & \\ 0 & & & \\ 0 & & & \end{array} \right) \quad \vec{S}^2 = \left(\begin{array}{c|ccc} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & & & \\ 0 & & & \\ 0 & & & \end{array} \right) \quad \text{quindi } [H, \vec{S}^2] = 0$$

NOTA: tutte queste manipolazioni hanno usato in modo fondamentale il fatto di avere a che fare con spin 1/2 e sono false per spin più elevato.

2) Determinare i livelli energetici di H e le loro degenerazioni

H è invariante sotto rotazioni di spin e spaziali, quindi possiamo assumere senza perdita di generalità che $\hat{n}$ sia diretto lungo $\hat{z}$: in questo modo

$$H = - \frac{3\mu_1\mu_2}{2r^3} \left(S_z^2 - \frac{1}{3} \vec{S}^2 \right) = \begin{cases} s=0 & 0 \\ s=1 & - \frac{3}{2} \frac{\mu_1\mu_2}{r^3} \left(S_z^2 - \frac{2}{3} \right) \end{cases} \quad \text{quindi otteniamo gli autostati / autovalori}$$

$$|0,0\rangle \quad E_s = 0 \quad \text{deg} = 1$$

$$|1,0\rangle \quad E_0 = \frac{\mu_1\mu_2}{r^3} \quad \text{deg} = 1$$

$$|1, \pm 1\rangle \quad E_{\pm 1} = - \frac{1}{2} \frac{\mu_1\mu_2}{r^3} \quad \text{deg} = 2$$

legata a simmetria per $x \rightarrow -x$ o $y \rightarrow -y$, che inverte i segni di S_z o alternativamente a rotaz. di π attorno a x o y : $e^{i\pi S_y} = e^{i\pi \frac{\sigma_y}{2}} = i\sigma_y$; $e^{-i\pi S_y} = -i\sigma_y$
 $e^{i\pi S_y} S_x e^{-i\pi S_y} = \sigma_y \frac{1}{2} \sigma_x \sigma_y = -\frac{1}{2} \sigma_x = -S_x$
 $e^{i\pi S_y} S_y e^{-i\pi S_y} = S_y$, $e^{i\pi S_y} S_z e^{-i\pi S_y} = -S_z$

3) Effetto di un campo magnetico debole lungo $\hat{n}$ ($\mu_1 B \ll \mu_1\mu_2/r^3$)

$$H_B = -B (\mu_1 S_z^{(1)} + \mu_2 S_z^{(2)}) \quad \mu_1 \vec{S}^{(1)} + \mu_2 \vec{S}^{(2)} \text{ è un operatore vettoriale, } \mu_1 S_z^{(1)} + \mu_2 S_z^{(2)} \sim T_0^{(1)}$$

$$[H_B, S_z] = 0 \quad \text{quindi non serve usare teoria della perturbazioni degenera}$$

$\langle 0,0 | H_B | 0,0 \rangle \sim \langle 0,0 | T_0^{(1)} | 0,0 \rangle = 0$ poiché $0 \otimes 1 = 1 \neq 0$ quindi elemento di matrice si annulla per W-E.

Usiamo ora il teorema della proiezione per calcolare gli altri elementi di matrice

Reminder "stringato" $\vec{S}^{(1)} = c_1 \vec{S}$ sugli stati a S costante, $\vec{S} \cdot \vec{S}^{(1)} = c_1 \vec{S}^2 \Rightarrow c_1 = \frac{\vec{S} \cdot \vec{S}^{(1)}}{\vec{S}^2}$

inoltre $\vec{S} \cdot \vec{S}^{(1)} = \vec{S}^{(2)}$ quindi $\vec{S}^2 + (\vec{S}^{(1)})^2 - 2\vec{S} \cdot \vec{S}^{(1)} = (\vec{S}^{(2)})^2$ e $\vec{S} \cdot \vec{S}^{(1)} = \frac{1}{2} (\vec{S}^2 + (\vec{S}^{(1)})^2 - (\vec{S}^{(2)})^2)$.

Usando spin $\frac{1}{2}$ per $\vec{S}^{(1)}$ e $\vec{S}^{(2)}$ si ha $\vec{S} \cdot \vec{S}^{(1)} = \frac{1}{2} \vec{S}^2$ e $c_1 = \frac{1}{2}$, quindi $\vec{S}^{(1)} = \frac{1}{2} \vec{S}$

(occorre che sono tutte identità su elementi di matrice, non identità operatoriali)

Abbiamo quindi

$$\langle 1,0 | H_B | 1,0 \rangle = -B \frac{1}{2} (\mu_1 + \mu_2) \langle 1,0 | S_z | 1,0 \rangle = 0$$

$$\langle 1,1 | H_B | 1,1 \rangle = -B \frac{1}{2} (\mu_1 + \mu_2) \langle 1,1 | S_z | 1,1 \rangle = -B \frac{1}{2} (\mu_1 + \mu_2), \quad \langle 1,-1 | H_B | 1,-1 \rangle = B \frac{1}{2} (\mu_1 + \mu_2)$$

che si sarebbero potute ottenere anche usando la scrittura esplicita di triplette e singolette.

4) Consideriamo ora $\mu_1 B$ confrontabile con $\mu_1 \mu_2 / \pi^3$

Scriviamo la forma esplicita di H_B nella base $|S, S_z\rangle$ di autovettori di H . Poiché $[H_B, S_z] = 0$

c'è una regola di selezione su S_z e $|1, \pm 1\rangle$ rimangono autovettori, come si può anche verificare facilmente

$$(\mu_1 S_z^{(1)} + \mu_2 S_z^{(2)}) |1,1\rangle = (\mu_1 S_z^{(1)} + \mu_2 S_z^{(2)}) |\uparrow\uparrow\rangle = \frac{1}{2} (\mu_1 + \mu_2) |\uparrow\uparrow\rangle = \frac{1}{2} (\mu_1 + \mu_2) |1,1\rangle$$

quindi l'energia esatta dei livelli $|1, \pm 1\rangle$ è $-\frac{1}{2} \frac{\mu_1 \mu_2}{\pi^3} \mp \frac{1}{2} (\mu_1 + \mu_2) B$

$$\begin{aligned} (\mu_1 S_z^{(1)} + \mu_2 S_z^{(2)}) |0,0\rangle &= (\mu_1 S_z^{(1)} + \mu_2 S_z^{(2)}) \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{1}{2\sqrt{2}} (\mu_1 |\uparrow\downarrow\rangle + \mu_1 |\downarrow\uparrow\rangle - \mu_2 |\uparrow\downarrow\rangle - \mu_2 |\downarrow\uparrow\rangle) = \\ &= \frac{\mu_1}{2} |1,0\rangle - \frac{\mu_2}{2} |1,0\rangle = \frac{1}{2} (\mu_1 - \mu_2) |1,0\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (\mu_1 S_z^{(1)} + \mu_2 S_z^{(2)}) |1,0\rangle &= (\mu_1 S_z^{(1)} + \mu_2 S_z^{(2)}) \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{1}{2\sqrt{2}} (\mu_1 |\uparrow\downarrow\rangle - \mu_1 |\downarrow\uparrow\rangle - \mu_2 |\uparrow\downarrow\rangle + \mu_2 |\downarrow\uparrow\rangle) = \\ &= \frac{1}{2} \mu_1 \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} - \frac{1}{2} \mu_2 \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{1}{2} (\mu_1 - \mu_2) |0,0\rangle \end{aligned}$$

quindi la matrice $H + H_B$ nel sottospazio $|0,0\rangle, |1,0\rangle$ è $\begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2} B (\mu_1 - \mu_2) \\ -\frac{1}{2} B (\mu_1 - \mu_2) & \frac{\mu_1 \mu_2}{\pi^3} \end{pmatrix}$

i cui autovettori sono $\lambda_{1,2} = \frac{\mu_1 \mu_2}{2\pi^3} \pm \sqrt{\left(\frac{\mu_1 \mu_2}{2\pi^3}\right)^2 + \frac{B^2}{4} (\mu_1 - \mu_2)^2}$

Nel limite di campo debole $\lambda_{1,2} < \begin{cases} 0 + O(B^2) \\ \frac{\mu_1 \mu_2}{\pi^3} + O(B^2) \end{cases}$ come visto prima (no accoppiamento lineare su $|0,0\rangle$ e $|1,0\rangle$)

Nel limite di campo forte $\lambda_{1,2} = \pm \frac{B}{2} |\mu_1 - \mu_2|$ che corrisponde agli stati $|\uparrow\uparrow\rangle$ e $|\uparrow\downarrow\rangle$ che sono autostati di H_B e diventano autostati di H per $B \rightarrow \infty$

Effetto Zeeman in campo cristallino

Consideriamo un modello semplificato di effetto Zeeman su un orbitale p di un atomo in un cristallo, cristallo che genera il potenziale elettrostatico $\varphi = Cx^2 + Dy^2 - (C+D)z^2$ nella zona vicina alla posizione dell'atomo ($\vec{r}=0$) con $C, D > 0$ (nota: questo campo è ammissibile poiché $\nabla^2 \varphi = 0$)

Consideriamo l'effetto Zeeman trascurando per semplicità lo spin: $\vec{\mu} = -\mu_B \vec{L}$ $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c}$

1) Si conservano $\vec{L}$ e/o L^2 ?

Poiché $-e\varphi$ non è invariante per rotazioni non si conserva $\vec{L}$ (se $C=D$ si conserva L_z). Per vedere se si conserva L^2 si può riscrivere $\varphi = C(x^2 - z^2) + D(y^2 - z^2)$ tramite armoniche sferiche per vedere cosa viene.

$$\left. \begin{aligned} r^2 Y_{40} &= \frac{1}{8} \sqrt{\frac{5}{4\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) r^2 = \frac{1}{8} \sqrt{\frac{5}{4\pi}} (3z^2 - r^2) \\ r^2 Y_{21} &= -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} e^{i\phi} \sin \theta \cos \theta r^2 = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} z(x+iy) \\ r^2 Y_{22} &= \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\phi} r^2 = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{8\pi}} (x+iy)^2 \end{aligned} \right\} \begin{aligned} &\text{ricordando } Y_{l-m}(\hat{n}) = (-1)^m Y_{lm}^*(\hat{n}) \text{ abbiamo} \\ &r^2 (Y_{22} - Y_{2-2}) \propto (x^2 - y^2) \\ &r^2 Y_{20} \propto (2z^2 - x^2 - y^2) \\ &\Rightarrow \text{sommando e sottraendo } z^2 - y^2 \text{ e } z^2 - x^2 \end{aligned}$$

$\Rightarrow -e\varphi$ è combinazione lineare di Y_{22}, Y_{2-2}, Y_{20} e quindi ha ad esempio elementi di matrice non nulli tra $l=0$ e $l=2 \Rightarrow$ non commuta con L^2 .

NOTA: cosa utile per il seguito è notare l'invarianza per riflessioni rispetto a un piano, ad es. $\begin{matrix} x \rightarrow -x \\ y \rightarrow y \\ z \rightarrow z \end{matrix}$

2) Usando le autofunzioni scritte in notazione cartesiana ($\psi_x = x f(r), \psi_y = y f(r), \psi_z = z f(r)$) scrivere i livelli energetici dell'atomo nel campo cristallino in funzione di

$$I_1 = -e \int x^4 f^2(r) d^3r \quad I_2 = -e \int x^2 y^2 f^2(r) d^3r$$

A causa delle simmetrie per riflessione tutti gli elementi non diagonali di V si annullano e

$$V_{xx} = \int (-e\varphi) x^2 f^2(r) d^3r = -e \int x^2 [Cx^2 + Dy^2 - (C+D)z^2] f^2(r) d^3r = CI_1 + DI_2 - (C+D)I_2 = C(I_1 - I_2)$$

$$V_{yy} = CI_2 + DI_1 - (C+D)I_2 = D(I_1 - I_2) \quad ; \quad V_{zz} = CI_2 + DI_2 - (C+D)I_1 = (C+D)(I_2 - I_1)$$

e questi elementi danno gli spostamenti dei livelli.

3) Considerare al primo ordine l'effetto di un campo magnetico debole, facendo attenzione al caso $C=D$

Se $C \neq D$ i livelli sono non degeneri e basta considerare $\langle \psi_a | (-\vec{\mu} \cdot \vec{B}) | \psi_a \rangle = \mu_B \vec{B} \cdot \langle \psi_a | \vec{L} | \psi_a \rangle$

Sugli stati cartesiani $(L_i)_{ja} = -i \epsilon_{ija}$ infatti

$$L_i(x_a f(r)) = (L_i x_a) f(r) = \left(-i \epsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k} x_a \right) f(r) = -i \epsilon_{ija} x_j f(r)$$

$$\text{quindi } L_i |\psi_a\rangle = -i \epsilon_{ija} |\psi_j\rangle \quad \text{e} \quad \langle \psi_j | L_i | \psi_a \rangle = -i \epsilon_{ija}$$

Di conseguenza gli elementi di matrice diagonali di $\vec{L}$ si annullano e non c'è Zeeman al primo ordine se $C \neq D$

Se $C=D$ la matrice del potenziale cristallino è $(I_1 - I_2)C \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}$ e per lo stato non degenere ψ_z non cambia nulla. Solo l_z ha elementi di matrice non nulli nel blocco degenere $\{|\psi_x\rangle, |\psi_y\rangle\}$ e si ha $(l_z)_{ij} = -i\epsilon_{zij} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ quindi la matrice da diagonalizzare è $\mu_B B_z \sigma_z$ e di conseguenza si ha l'effetto Zeeman al primo ordine

$$\lambda = \pm \mu_B B_z$$

Quindi se $C=D$ un campo con una componente B_z non nulla rompe la degenerazione e genera un effetto Zeeman lineare.

Quando $C=D$ c'è invarianza per rot. lungo $\hat{z}$ (quindi gli autostati possono essere classificati con l'autovalore di l_z) e quando $B=0$ c'è invarianza per $\begin{cases} x \leftrightarrow y \\ y \leftrightarrow x \\ z \leftrightarrow z \end{cases}$ che inverte il segno di l_z e quindi scambia tra loro gli autovalori $\pm l_z$, questo è il motivo della degenerazione.

Il termine $\mu_B l_z B_z$ è dispari sotto la riflessione e quindi rompe la degenerazione.

Quello che rimane vero è che $E(l_z, B_z) = E(-l_z, -B_z)$.

Oscillatori multidimensionali accoppiati

Consideriamo due particelle vincolate a muoversi in una dimensione, di spin $1/2$ e descritte dalla

hamiltoniana
$$H = \sum_{i=1}^2 \left(\frac{1}{2m} p_i^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x_i^2 \right) + \alpha \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 x_1 x_2$$

1) determinare i livelli del sistema quando $\alpha=0$, discutere in particolare fondamentale e primo eccitato

$|m_1, m_2\rangle$ ha energia $E_{m_1, m_2} = \hbar \omega (m_1 + m_2 + 1)$

Sul fondamentale è $|0, 0\rangle$, con energia $\hbar \omega$ e degenerazione 4 (4 stati di spin possibili). Per il primo eccitato abbiamo gli stati orbitali $|0, 1\rangle$ e $|1, 0\rangle$, con energia $2\hbar \omega$ e la degenerazione è $2 \times 4 = 8$.

2) determinare al primo ordine l'effetto della perturbazione su fondamentale e primo eccitato.

Notiamo che la perturbazione è diagonale nello spin totale in quanto $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \frac{1}{2} (\vec{S}^2 - \vec{S}_1^2 - \vec{S}_2^2) = \frac{1}{2} (\vec{S}^2 - \frac{3}{2} \hbar^2)$

quindi la perturbazione si scrive come $\gamma x_1 x_2$ con $\gamma = -\frac{3}{4} \hbar^2 \alpha$ sugli stati di singoletto di spin e $\gamma = \frac{1}{4} \hbar^2 \alpha$ sugli stati di tripletto di spin

Sul fondamentale la perturbazione non ha effetto in quanto $\langle 0|x_1|0\rangle = \langle 0|x_2|0\rangle = 0$ per parità. Sul primo

eccitato la matrice della perturbazione è $\gamma \begin{pmatrix} 0 & \langle 01|x_1 x_2|10\rangle \\ \langle 10|x_1 x_2|01\rangle & 0 \end{pmatrix}$ inoltre

$\langle 01|x_1 x_2|10\rangle = \langle 0|x|1\rangle^2 = \frac{l^2}{2} (\langle 0|(a+a^\dagger)|1\rangle)^2 = \frac{l^2}{2}$ con $l^2 = \frac{\hbar}{m\omega}$ quindi la perturbazione è $\gamma \frac{l^2}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ che ha autovalori $\Delta = \pm \gamma \frac{l^2}{2} = \pm \frac{\gamma}{2} \frac{\hbar}{m\omega}$

3) Determinare i livelli esatti

$$\frac{1}{2} m \omega^2 (x_1^2 + x_2^2 + 2\beta x_1 x_2) = \frac{1}{2} m \omega^2 (1+\beta) y_1^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 (1-\beta) y_2^2$$

$$= \frac{1+\beta}{2} (x_1 + x_2)^2 + \frac{1-\beta}{2} (x_1 - x_2)^2 = (1+\beta) y_1^2 + (1-\beta) y_2^2 \quad \text{con } y_1 = \frac{x_1 + x_2}{\sqrt{2}}, y_2 = \frac{x_1 - x_2}{\sqrt{2}}$$

$p_1 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_1} = -i\hbar \left(\frac{\partial y_1}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial y_1} + \frac{\partial y_2}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial y_2} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} (P_1 + P_2) \quad P_1 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y_1}; P_2 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y_2}$

$p_2 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_2} = \frac{1}{\sqrt{2}} (P_1 - P_2) \quad \text{quindi } p_1^2 + p_2^2 = P_1^2 + P_2^2$

$\alpha \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = m \omega^2 \beta \quad \text{quindi } \beta = \frac{\gamma}{m \omega^2}$ dove γ ha stato definito prima e è diverso per singoletto/tripletto

$E_{m_1, m_2} = \hbar \omega \left(\sqrt{1+\beta} m_1 + \sqrt{1-\beta} m_2 + 1 \right) \simeq \hbar \omega (m_1 + m_2 + 1) + \frac{\hbar \omega}{2} \beta (m_1 - m_2)$

quindi $\Delta = \frac{\hbar \omega}{2} \beta (m_1 - m_2) = \frac{\hbar \gamma}{2 m \omega} (m_1 - m_2)$ consistente con il risultato perturbativo.

Consideriamo una piccola deformazione di una buca infinitamente profonda di raggio R , che diventa un ellissoide di semiasse $a=b$, e mantenendo il volume costante.

L'equazione del bordo è $\frac{x_1^2 + y_1^2}{a^2} + \frac{z_1^2}{c^2} = 1$ e la Hamiltoniana è $H = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_1^2$

Effettuiamo il cambio di variabile $x_1 = \frac{a}{R} x$, $y_1 = \frac{a}{R} y$ e $z_1 = \frac{c}{R} z$, in modo che la equazione del bordo diventi $x^2 + y^2 + z^2 = R^2$, inoltre $\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} = \frac{R^2}{a^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ e così via, quindi

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_1^2 = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 - \frac{\hbar^2}{2M} \left[\left(\frac{R^2}{a^2} - 1 \right) \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \left(\frac{R^2}{c^2} - 1 \right) \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right]$$

Poiché il volume è costante abbiamo $R^3 = a^2 c$ quindi se la deformazione è piccola esiste un β piccolo t.c. $a \simeq R(1 - \frac{1}{3}\beta)$ e $c \simeq R(1 + \frac{2}{3}\beta)$ (nota che un cambio di R genererebbe una perturbazione $\propto \vec{p}^2$ quindi si riscala semplicemente i livelli) inoltre

$$\frac{R^2}{a^2} - 1 \simeq \frac{1}{(1 - \frac{1}{3}\beta)^2} - 1 \simeq \frac{1}{1 - \frac{2}{3}\beta} - 1 \simeq \frac{2}{3}\beta ; \quad \frac{R^2}{c^2} - 1 \simeq -\frac{4}{3}\beta$$

quindi la deformazione corrisponde alla perturbazione

$$V = \frac{1}{2M} \left(\frac{2}{3}\beta (\vec{p}_x^2 + \vec{p}_y^2) - \frac{4}{3}\beta \vec{p}_z^2 \right) = \frac{1}{3M} \beta (\vec{p}_x^2 + \vec{p}_y^2 - 2\vec{p}_z^2) = \frac{1}{3M} (\vec{p}^2 - 3\vec{p}_z^2)$$

Poiché $[V, L_z] = 0$ non serve usare teoria degenere per tenere conto della deg. in m , ma si ha semplicemente $\Delta E_{n\ell m}^{(1)} = \langle n\ell m | V | n\ell m \rangle$

$\vec{p}^2 - 3\vec{p}_z^2 =$ componente zz di $\vec{p}^2 \delta_{ij} - 3p_i p_j$ tensore cartesiano irriducibile equivalente a un tensore sferico di rango 2, quindi ai fini del calcolo degli elementi di matrice si ha

$$\vec{p}^2 \delta_{ij} - 3p_i p_j \propto \vec{J}^2 \delta_{ij} - \frac{3}{2} (J_i J_j + J_j J_i)$$

dove serve simmetrizzare in quanto $[J_i, J_j] \neq 0$ in generale.

Parametrizzazione degli elementi di matrice

$$\langle n\ell m | V | n\ell m \rangle = \alpha' \langle n\ell m | \vec{J}^2 - 3J_z^2 | n\ell m \rangle = \alpha' (\ell(\ell+1) - 3m^2) = \alpha' \left(1 - \frac{3m^2}{\ell(\ell+1)} \right). \quad \text{In particolare}$$

$$\langle n\ell 0 | V | n\ell 0 \rangle = \alpha' \quad \text{e quindi} \quad \langle n\ell m | V | n\ell m \rangle = \left(1 - \frac{3m^2}{\ell(\ell+1)} \right) \langle n\ell 0 | V | n\ell 0 \rangle.$$

A meno che $\langle n\ell 0 | V | n\ell 0 \rangle$ non si annulli, si rimuove la degenerazione in m , rimane per la deg. $m \leftrightarrow -m$ tipica della simmetria assiale (legata a invarianza per rotaz. di π attorno a $\hat{y}$)

$$\text{Smentre} \quad \sum_{- \ell}^{\ell} m^2 = 2 \sum_{1}^{\ell} m^2 = \frac{1}{3} \ell(\ell+1)(2\ell+1), \quad \text{quindi} \quad \frac{1}{2\ell+1} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \frac{m^2}{\ell(\ell+1)} = \frac{1}{3} \quad \text{e} \quad \sum_{m=-\ell}^{\ell} \Delta E_{n\ell m}^{(1)} = 0$$

quindi il baricentro del multipletto non si sposta.

Calcolo degli elementi di matrice

Un metodo che usa molte proprietà delle armoniche sferiche e che porta ad un risultato

sorprendentemente semplice è discusso nel problema 4 di Rondon 3 § 38. Vediamo che questo non è casuale ma è legato alle simmetrie del problema.

Usiamo di nuovo (in un sottospazio a l fissato) $p^2 \mathcal{S}_{ij} - 3 p_i p_j = \alpha' (\mathcal{S}^2 \mathcal{S}_{ij} - \frac{3}{2} (\mathcal{S}_i \mathcal{S}_j + \mathcal{S}_j \mathcal{S}_i))$

moltiplichiamo per $\mathcal{S}_i$ e sfruttiamo il fatto che per il momento orbitale si ha l'identità operatoriale

$$\vec{\mathcal{S}} \cdot \vec{p} = \mathcal{S}_i p_i = \epsilon_{ijk} \pi_j p_k p_i = 0 \quad \text{poiché} \quad [p_k, p_i] = 0$$

arrivando quindi a

$$p^2 \mathcal{S}_j = \alpha' (\mathcal{S}^2 \mathcal{S}_j - \frac{3}{2} \mathcal{S}^2 \mathcal{S}_j - \frac{3}{2} \mathcal{S}_i \mathcal{S}_j \mathcal{S}_i). \quad \text{Soltanto si ha}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_i \mathcal{S}_j \mathcal{S}_i &= (\mathcal{S}_i \mathcal{S}_j - \mathcal{S}_j \mathcal{S}_i) \mathcal{S}_i + \mathcal{S}_j \mathcal{S}^2 = i \epsilon_{ijk} \mathcal{S}_k \mathcal{S}_i + \mathcal{S}_j \mathcal{S}^2 = \frac{i}{2} \epsilon_{ijk} [\mathcal{S}_k, \mathcal{S}_i] + \mathcal{S}_j \mathcal{S}^2 = \\ &= \frac{i}{2} \epsilon_{ijk} i \epsilon_{kil} \mathcal{S}_l + \mathcal{S}_j \mathcal{S}^2 = -\frac{1}{2} \epsilon_{ijl} \mathcal{S}_l + \mathcal{S}_j \mathcal{S}^2 = -\mathcal{S}_j + \mathcal{S}_j \mathcal{S}^2 \end{aligned}$$

$$\text{quindi} \quad p^2 \mathcal{S}_j = \alpha' (\mathcal{S}^2 \mathcal{S}_j - \frac{3}{2} \mathcal{S}^2 \mathcal{S}_j + \frac{3}{2} \mathcal{S}_j - \frac{3}{2} \mathcal{S}_j \mathcal{S}^2) = \alpha' (\frac{3}{2} \mathcal{S}_j - \mathcal{S}^2 \mathcal{S}_j) \quad \text{poiché} \quad [\mathcal{S}^2, \mathcal{S}_j] = 0.$$

Moltiplicando per $\mathcal{S}_j$ e "semplifichiamo" $\mathcal{S}^2$ (sugli stati $l=0$ gli elementi di matrice di V

si annullano per W.E., quindi possiamo supporre $l \neq 0$) otteniamo

$$p^2 = \alpha' (\frac{3}{2} - \mathcal{S}^2)$$

Consideriamo ora l'elemento di matrice tra gli stati $|n l m\rangle$: usiamo $\langle n l m | \frac{p^2}{2M} | n l m \rangle = E_{nl}^{(0)}$

$$\text{abbiamo} \quad \alpha' = \frac{2M E_{nl}^{(0)}}{\frac{3}{2} - l(l+1)} = - \frac{4M E_{nl}^{(0)}}{4l^2 + 4l - 3} = - \frac{4M E_{nl}^{(0)}}{(2l-1)(2l+3)}$$

$$\text{quindi} \quad \Delta E_{nlm}^{(1)} = \langle n l m | V | n l m \rangle = \frac{\beta}{3M} \langle n l m | (p^2 - 3p_z^2) | n l m \rangle = \frac{\beta}{3M} \alpha' \langle n l m | (\mathcal{S}^2 - 3\mathcal{S}_z^2) | n l m \rangle =$$

$$= - \frac{4}{3} \frac{\beta E_{nl}^{(0)}}{(2l-1)(2l+3)} (l(l+1) - 3m^2) = - \frac{4}{3} \underbrace{\frac{\beta E_{nl}^{(0)} l(l+1)}{(2l-1)(2l+3)}}_{= \langle n l 0 | V | n l 0 \rangle} \left(1 - \frac{3m^2}{l(l+1)}\right)$$

(Una procedura del tutto analoga si può seguire nelle perturbazioni indotte da quadrupoli elettrici)

Problema $\vec{S} \cdot \vec{\pi}$ nell'idrogeno

Consideriamo un atomo di idrogeno soggetto alla perturbazione $V(\vec{r}) = \alpha \vec{S} \cdot \vec{\pi}$, dove $\vec{S}$ è lo spin dell'elettrone.

- 1) Calcolare la matrice della perturbazione sul doppietto di spin con $n=1$. La perturbazione ha un effetto al primo ordine sul fondamentale?

Il doppietto fondamentale si scrive $f(\vec{r})|\uparrow\rangle, f(\vec{r})|\downarrow\rangle$ quindi la matrice da calcolare è

$$\begin{pmatrix} \langle f(\vec{r})|\uparrow|V|f(\vec{r})|\uparrow\rangle & \langle f(\vec{r})|\uparrow|V|f(\vec{r})|\downarrow\rangle \\ \langle f(\vec{r})|\downarrow|V|f(\vec{r})|\uparrow\rangle & \langle f(\vec{r})|\downarrow|V|f(\vec{r})|\downarrow\rangle \end{pmatrix}$$

Ad esempio si ha $\langle f(\vec{r})|\uparrow|V|f(\vec{r})|\uparrow\rangle = \alpha \langle f(\vec{r})|\pi_x|f(\vec{r})\rangle \langle \uparrow|S_x|\uparrow\rangle$ ma $f(\vec{r})$ è invariante per rotazioni quindi $\langle f(\vec{r})|\pi_x|f(\vec{r})\rangle = 0$ (stessa conclusione si ottiene usando la parità). Analogamente tutti gli altri elementi di matrice si annullano e non c'è effetto al primo ordine.

- 2) mostrare che V è uno scalare calcolandolo esplicitamente $[V, \vec{S}]$

$$[\vec{S} \cdot \vec{\pi}, \vec{S}] = [\vec{S} \cdot \vec{\pi}, \vec{L}] + [\vec{S} \cdot \vec{\pi}, \vec{S}]$$

$$[\vec{S} \cdot \vec{\pi}, L_i] = S_j [\pi_j, L_i] = S_j [\pi_j, \epsilon_{ikl} x_l p_k] = S_j \epsilon_{ikl} x_l [\pi_j, p_k] = S_j \epsilon_{ikl} x_l i\hbar \delta_{jk} = S_j i\hbar \epsilon_{jik} x_k$$

$$[\vec{S} \cdot \vec{\pi}, S_i] = [S_j, S_i] \pi_j = i\hbar \epsilon_{jia} S_a \pi_j = -i\hbar \epsilon_{jia} S_j \pi_a \Rightarrow [V, \vec{S}] = 0$$

- 3) Consideriamo gli stati del livello $n=2$ e supponiamo α sufficientemente piccolo da fare in modo che l'effetto della perturbazione sia piccolo rispetto a splitting fine e Lamb-shift. Come cambiano le energie degli autostati al primo ordine in V ?

Per $n=2$ abbiamo $l=0$ e $l=1$ e con interazione fine e Lamb-shift si ottengono 3 livelli non deg. $S_{1/2}, P_{1/2}, P_{3/2}$ e l'unica degenerazione è quella legata a $\vec{S}_z$, ma $[V, \vec{S}_z] = 0$, quindi si può usare th. pert non degener. Tutti gli elementi di matrice diagonali si annullano per parità, in quanto V è dispari.

- 4) Consideriamo il livello $n=2$ supponendo α abbastanza grande da poter trascurare splitting fine e Lamb-shift. Usando la base $|\vec{S}, \vec{S}_z\rangle$ mostrare solo 4 elementi della matrice V 8×8 possono essere non nulli.

V è dispari, quindi può connettere solo s a p, inoltre $\langle S_{1/2}, \vec{S}_z | V | P_{3/2}, \vec{S}_z \rangle = 0$ poiché V è scalare. Unici elementi non nulli possono essere

$$\langle S_{1/2}, \vec{S}_z = \pm \frac{1}{2} | V | P_{1/2}, \vec{S}_z = \pm \frac{1}{2} \rangle \quad \text{e} \quad \langle P_{1/2}, \vec{S}_z = \pm \frac{1}{2} | V | S_{1/2}, \vec{S}_z = \pm \frac{1}{2} \rangle$$

5) mostrare che c'è un unico elemento di matrice indipendente e usarlo per parametrizzare lo spostamento dei livelli.

V è hermitiana, quindi dei 4 elementi scritti prima 3 sono i c.c. degli altri, inoltre

V è scalare, quindi usando W.E. si ha

$$\langle S_{1/2}, S_z = \pm \frac{1}{2} | V | P_{1/2}, S_z = \pm \frac{1}{2} \rangle = \langle S_{1/2} | V | P_{1/2} \rangle \underbrace{\langle \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} | 0, 0; \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \rangle}_{=1} \equiv E$$

Nel sottosospazio $S_z = +\frac{1}{2}$ di $S_{1/2}, P_{1/2}$ si ha $V = \begin{pmatrix} 0 & E \\ E & 0 \end{pmatrix}$ e analogamente nel sottosospazio $S_z = -\frac{1}{2}$ quindi $\Delta E^{(1)} = \pm |E|$ e gli autostati sono $\frac{1}{\sqrt{2}} (|P_{1/2}, S_z\rangle \pm |S_{1/2}, S_z\rangle)$

6) calcolare il valore di E

$$|S_{1/2}, S_z = +\frac{1}{2}\rangle = |l=0, l_z=0\rangle |\uparrow\rangle; \quad |P_{1/2}, S_z = +\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |l=1, l_z=1\rangle |\uparrow\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} |l=1, l_z=0\rangle |\uparrow\rangle$$

$$E = \langle S_{1/2}, S_z = \frac{1}{2} | \propto \vec{S} \cdot \vec{r} | P_{1/2}, S_z = \frac{1}{2} \rangle =$$

$$= \sqrt{\frac{2}{3}} \propto \langle \uparrow | \vec{S} | \uparrow \rangle \langle l=0, l_z=0 | \vec{r} | l=1, l_z=1 \rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} \propto \langle \uparrow | \vec{S} | \uparrow \rangle \langle l=0, l_z=0 | \vec{r} | l=1, l_z=0 \rangle =$$

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right\}$$

$$= \sqrt{\frac{2}{3}} \propto \hbar \langle l=0, l_z=0 | \frac{x-iy}{2} | l=1, l_z=1 \rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} \propto \hbar \langle l=0, l_z=0 | \frac{1}{2} z | l=1, l_z=0 \rangle$$

$$x-iy = r \sin \theta \cos \varphi - i r \sin \theta \sin \varphi = r \sin \theta e^{-i\varphi}$$

$$= \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{\alpha}{2} \hbar \int \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R_{2s}(r) r \sin \theta e^{-i\varphi} \left(-\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \right) \sin \theta e^{i\varphi} R_{2p}(r) r^2 dr d\Omega -$$

$$- \sqrt{\frac{1}{3}} \frac{\alpha}{2} \hbar \int \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R_{2s}(r) r \cos \theta \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta R_{2p}(r) r^2 dr d\Omega =$$

$$= -\frac{1}{8\pi} \propto \hbar \int R_{2s}(r) R_{2p}(r) r^3 dr (\sin^2 \theta + \cos^2 \theta) d\Omega = -\frac{1}{2} \propto \hbar \int_0^\infty R_{2s}(r) R_{2p}(r) r^3 dr =$$

$$= -\frac{1}{2} \propto \hbar \alpha \int_0^\infty 2 \frac{1}{2^{3/2}} \left(1 - \frac{r}{2}\right) e^{-r/2} r^3 \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{1}{2^{3/2}} r e^{-r/2} dr =$$

$$= -\alpha \propto \hbar \frac{1}{8\sqrt{3}} \int_0^\infty \underbrace{r^4 \left(1 - \frac{r}{2}\right)}_{4! - \frac{1}{2} 5! = -\frac{3}{2} 4!} e^{-r} dr = \alpha \propto \hbar \frac{1}{8\sqrt{3}} \frac{3}{2} \cdot 4 \cdot 3 \cdot 2 = \frac{3\sqrt{3}}{2} \propto \hbar$$

1 × 1/2		3/2							
		+3/2		3/2	1/2				
+1	+1/2	1		+1/2	+1/2				
		+1	-1/2	1/3	2/3	3/2	1/2		
		0	+1/2	2/3	-1/3	-1/2	-1/2		
				0	-1/2	2/3	1/3	3/2	
				-1	+1/2	1/3	-2/3	-3/2	
						-1	-1/2	1	

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

$$Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi}$$

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right)$$

$$Y_2^1 = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\phi}$$

$$Y_2^2 = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\phi}$$

$$Y_\ell^{-m} = (-1)^m Y_\ell^{m*}$$

Aspetti generali

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\phi$$

Classicamente

$$\begin{cases} \dot{\vec{x}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} & \dot{\vec{x}} = \frac{1}{m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \\ \dot{\vec{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{x}} & \dot{\vec{p}} = -e \vec{\nabla} \phi + \frac{e}{c} \underbrace{\left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)_i}_{\dot{x}_i} \nabla A_i \end{cases}$$

$$\begin{aligned} m \ddot{x}_j + \frac{e}{c} \partial_i A_j \dot{x}_i &= -e \partial_j \phi + \dot{x}_i \partial_j A_i \frac{e}{c} \\ m \ddot{x}_j &= -e \partial_j \phi + \frac{e}{c} (v_i \partial_j A_i - v_i \partial_i A_j) = -e \partial_j \phi + \frac{e}{c} v_a \partial_b A_c \underbrace{(\delta_{ac} \delta_{bj} - \delta_{jc} \delta_{ab})}_{-\epsilon_{kbc} \epsilon_{kaj}} = \\ &= -e \partial_j \phi - \frac{e}{c} \epsilon_{kbc} \epsilon_{kaj} v_a \partial_b A_c = -e \partial_j \phi + \frac{e}{c} \epsilon_{jak} v_a (\vec{\nabla} \times \vec{A})_k = \\ &= (-e \vec{\nabla} \phi + \frac{e}{c} \vec{v} \times \vec{B})_j \end{aligned}$$

Quantisticamente

$Q(t) = e^{iHt/\hbar} Q e^{-iHt/\hbar}$; $\dot{Q}(t) = \frac{i}{\hbar} [H, Q(t)]$ in rappresent. di Heisenberg. Da questa relazione si prende spunto per def. in rapp. di Schrodinger la velocità come

$$\begin{aligned} V_a &= \frac{i}{\hbar} [H, x_a] = \frac{i}{2m\hbar} \left\{ \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)_b \left[\left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)_b, x_a \right] + \left[\left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)_b, x_a \right] \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)_b \right\} = \\ &= \frac{i}{2m\hbar} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)_b (-i\hbar \delta_{ab}) = \frac{1}{m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)_a \quad \text{analogamente al caso classico} \end{aligned}$$

ovviamente $[x_a, V_b] = i \frac{\hbar}{m} \delta_{ab}$

$$\begin{aligned} [V_a, V_b] &= -\frac{e}{m^2 c} ([A_a, p_b] + [p_a, A_b]) = -\frac{i\hbar e}{m^2 c} (\partial_b A_a - \partial_a A_b) = -i \frac{\hbar e}{m^2 c} \partial_c A_d \underbrace{(\delta_{bc} \delta_{ad} - \delta_{ac} \delta_{bd})}_{\epsilon_{kab} \epsilon_{kdc}} = \\ &= i \frac{\hbar e}{m^2 c} \epsilon_{abk} (\vec{\nabla} \times \vec{A})_k = i \frac{\hbar e}{m^2 c} \epsilon_{abk} B_k \end{aligned}$$

Usando $H = \frac{1}{2} m \vec{V}^2 + e\phi$ si vede quindi facilmente che $m \frac{d\vec{V}}{dt} = m \frac{i}{\hbar} [H, \vec{V}] = \frac{1}{2} \frac{e}{c} (\vec{V} \times \vec{B} - \vec{B} \times \vec{V}) + e \vec{E}$

Un rappresentazione delle coordinate si ha

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\phi = \frac{1}{2m} \left\{ \vec{p}^2 - \frac{e}{c} (\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p}) + \frac{e^2}{c^2} \vec{A}^2 \right\} + e\phi = \quad \vec{p} \cdot \vec{A} - \vec{A} \cdot \vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla} \cdot \vec{A} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + i \frac{\hbar e}{m c} \vec{A} \cdot \vec{\nabla} + i \frac{\hbar e}{2m c} \vec{\nabla} \cdot \vec{A} + \frac{e^2}{2m c^2} \vec{A}^2 + e\phi \end{aligned}$$

Trasformazioni di gauge: $A^\mu \rightarrow A^\mu - \partial^\mu \chi$, tridimensionalmente $\begin{cases} \vec{A} \rightarrow \vec{A} + \vec{\nabla} \chi \\ \phi \rightarrow \phi - \frac{1}{c} \partial_t \chi \end{cases}$ e se usiamo

la trasformazione $\psi \rightarrow \psi e^{i \frac{e}{\hbar c} \chi}$ si vede che l'eq. di Schrodinger è invariante.

$$i\hbar \partial_t \psi \rightarrow i\hbar (\partial_t \psi) e^{i \frac{e}{\hbar c} \chi} - \frac{e}{c} \psi (\partial_t \chi) e^{i \frac{e}{\hbar c} \chi}$$

e d'altra parte si ha

$$\begin{aligned} H\psi &= \frac{1}{2m} (-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A})^2 \psi \rightarrow \frac{1}{2m} (-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A} - \frac{e}{c}\vec{\nabla}\chi)^2 e^{i\frac{e}{\hbar c}\chi} \psi + e(\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t}) e^{i\frac{e}{\hbar c}\chi} \psi = \\ &= \frac{1}{2m} (-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A} - \frac{e}{c}\vec{\nabla}\chi) e^{i\frac{e}{\hbar c}\chi} (-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}) \psi + e\phi e^{i\frac{e}{\hbar c}\chi} \psi - \frac{e}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t} e^{i\frac{e}{\hbar c}\chi} \psi = \\ &= \frac{1}{2m} e^{i\frac{e}{\hbar c}\chi} (-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A})^2 \psi + e\phi e^{i\frac{e}{\hbar c}\chi} \psi - \frac{e}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t} e^{i\frac{e}{\hbar c}\chi} \psi = e^{i\frac{e}{\hbar c}\chi} H\psi - \frac{e}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t} e^{i\frac{e}{\hbar c}\chi} \psi \end{aligned}$$

quindi $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}e^{i\frac{e}{\hbar c}\chi}\psi = H(e^{i\frac{e}{\hbar c}\chi}\psi)$

NOTA: in modo analogo si vede che i valori medi di $\vec{V}$ sono gauge invarianti; mentre i valori medi di $\vec{p}$ no.

$\rho(\vec{x}) = |\psi(\vec{x})|^2$ è gauge invariante e vediamo come si modifica l'equazione di continuità

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = \partial \text{Re}(\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial t}) = \partial \text{Re} \left\{ \psi^* \left(-\frac{i\hbar^2}{2m} \nabla^2 + i\frac{\hbar e}{mc} \vec{A} \cdot \vec{\nabla} + i\frac{\hbar e}{2mc} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) + \cancel{\frac{e^2}{2mc^2} A^2} \right) \psi \right\} =$$

$$= \partial \text{Re} \left\{ \frac{i\hbar}{2m} \psi^* \nabla^2 \psi + \frac{e}{mc} \psi^* \vec{A} \cdot \vec{\nabla} \psi + \frac{e}{2mc} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) |\psi|^2 \right\} =$$

$$= \partial \text{Re} \left\{ \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{i\hbar}{2m} \psi^* \vec{\nabla} \psi \right) + \vec{\nabla} \cdot \left(\psi^* \frac{e}{2mc} \vec{A} \psi \right) \right\} = -\vec{\nabla} \text{Re} \left\{ \psi^* \left(-\frac{i\hbar}{m} \vec{\nabla} - \frac{e}{mc} \vec{A} \right) \psi \right\}$$

$\uparrow \vec{\nabla} \psi^* \cdot \vec{\nabla} \psi \in \mathbb{R}$ e non contribuisce $\text{Re}(\vec{\nabla} \psi^* \cdot \vec{A} \psi) = \text{Re}(\psi^* \vec{A} \cdot \vec{\nabla} \psi)$ se $\vec{A} \in \mathbb{R}$

quindi $\frac{\partial\rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$ con $\vec{j} = \frac{1}{m} \text{Re} \left\{ \psi^* \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \psi \right\}$ NOTA: $\vec{j}$ è gauge invariante

NOTA: senza invarianza di gauge ψ è definita a meno di una fase globale. Quando c'è invarianza di gauge è possibile anche modificare localmente la fase di ψ , fintanto che questo corrisponde a una trasform. di gauge, ovvero fintanto che la cosa non introduce un campo f.t. esterno. Struttura di fibroto principale $U(1)$ con connessione A

Livelli di Landau

Supponiamo $\vec{B} \parallel \hat{z}$ e usiamo la gauge di Landau $A_x = -yB$, $A_y = 0$, $A_z = 0$. In questa gauge

$$\text{si ha } H = \frac{1}{2m} \left\{ \left(p_x + \frac{e}{c} y B \right)^2 + p_y^2 + p_z^2 \right\}$$

Ovviamente $[p_x, H] = [p_z, H] = 0$ e c'è invarianza per traslazioni lungo x, z . Sembra non ci sia invarianza per trasl. lungo y ma una traslazione lungo y è equivalente a un cambio di gauge $A_x \rightarrow A_x + \text{const.}$ $\Rightarrow$ le quantità invarianti di gauge sono invarianti per traslazioni lungo y .

Poiché $[p_x, H] = [p_z, H] = 0$ abbiamo per le autofunzioni $\psi(x, y, z) = e^{i(k_x x + k_z z)} f(y)$

$$\text{e } H\psi = E\psi \text{ si scrive } \underbrace{\frac{1}{2m} \left\{ (\hbar k_x + \frac{e}{c} y B)^2 + p_y^2 + \hbar^2 k_z^2 \right\}}_{= \frac{1}{2} m \omega_c^2 \left(y - \frac{\hbar k_x c}{eB} \right)} f = E f \quad \text{con } \frac{1}{2} m \omega_c^2 = \frac{1}{2m} \frac{e^2}{c^2} B^2$$

quindi $y_0 = \frac{\hbar k_x c}{eB}$, $\omega_c = \frac{eB}{mc}$ (frequenza di ciclotrone classica) e si ottiene

$$\left(\frac{1}{2} m \omega_c^2 (y - y_0)^2 + \frac{1}{2m} p_y^2 \right) f = E' f \quad \text{con } E' = E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

identica a un osc. armonico 1d, quindi $E' = \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right)$ con "n" che fissa

la soluz. dell'eq. per y ma che dipende implicitamente da k_x tramite y_0

$$E = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \psi(x, y, z) = e^{i(k_x x + k_z z)} f_n(y - y_0)$$

$\uparrow$
n-esima autofunzione dell'osc. armonico 1d

(Per maggiori dettagli su relazione con orbite circolari vedi Bollentine § 11.3, Landau § 11.2)

Se il sistema è finito lungo x, y e ha estensione L_x, L_y e assumiamo che

ci siano condiz. al bordo periodiche lungo x allora $k_x = \frac{2\pi}{L_x} n_x$, inoltre se assumiamo

che $L_y \gg \sqrt{\frac{\hbar}{m \omega_c}}$ = lunghezza magnetica possiamo trascurare gli effetti di bordo, usando

$$\text{quindi } 0 < y_0 < L_y, \text{ da cui } 0 < \frac{\hbar k_x c}{eB} < L_y \text{ e quindi } 0 < \frac{2\pi \hbar c}{L_x eB} n_x < L_y$$

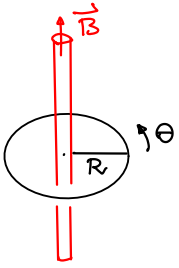
da cui $0 < n_x < L_x L_y B \frac{e}{2\pi \hbar c} = \Phi_B / \Phi = \text{degenerazione dei livelli di Landau poichè}$
 $\frac{e}{2\pi \hbar c}$ $\rightarrow$ $1/\Phi$ inverso del flusso elementare k_z non contribuisce all'energia.

Effetto Aharonov-Bohm

Aharonov Bohm "Significance of electromagnetic potentials in quantum theory" PhysRev 115 485 (1959)

g4

Consideriamo una particella carica vincolata a muoversi su un anello e supponiamo che attraversi il centro dell'anello passi un solenoide con flusso magnetico Φ_B



NOTA: la "traiettoria" della particella non è nota poiché si può muovere liberamente sulla circonferenza, tuttavia la particella è vincolata a muoversi in una zona in cui non è presente campo magnetico.

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2$$

In coordinate cilindriche $\vec{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial \rho} ; \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \theta} ; \frac{\partial}{\partial z} \right)$, inoltre per simmetria possiamo scegliere una gauge in cui per $\rho > \text{raggio del solenoide}$ solo la componente A_θ è non nulla e indep. da θ .

Dal teorema di Stokes si ha $\oint \vec{A} \cdot d\vec{s} = \oint A_\theta \rho d\theta = 2\pi \rho A_\theta = \int (\vec{\nabla} \times \vec{A}) \cdot d\vec{\Sigma} = \Phi_B$ quindi

sull'anello di raggio R si ha $A_\theta = \frac{1}{2\pi R} \Phi_B$.

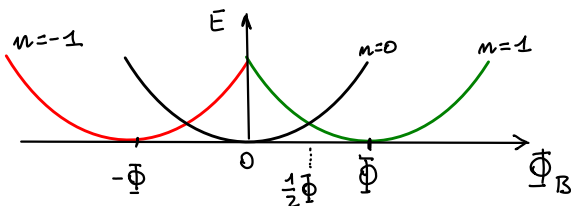
La hamiltoniana è quindi $H = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{e}{c} \frac{\Phi_B}{2\pi R} \right)^2 = \frac{1}{2mR^2} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{e}{c} \frac{\Phi_B}{2\pi} \right)^2$ e la funzione d'onda deve essere a singolo valore ($\psi(0) = \psi(2\pi)$) e normalizzata ($\int_0^{2\pi} |\psi(\theta)|^2 R d\theta = 1$).

Cerchiamo una soluzione usando la serie di Fourier $\psi(\theta) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{im\theta} a_n$: l'eq. di Schrodinger diventa

$$\sum_n a_n \frac{1}{2mR^2} \left(\hbar m - \frac{e}{c} \frac{\Phi_B}{2\pi} \right)^2 e^{im\theta} = E \sum_n a_n e^{im\theta}$$

e usando il fatto che per $n, k \in \mathbb{Z}$ si ha $\int_0^{2\pi} e^{i(n-k)\theta} d\theta = 2\pi \delta_{n,k}$ si ottiene

$$E_n = \frac{1}{2mR^2} \left(\hbar m - \frac{e}{c} \frac{\Phi_B}{2\pi} \right)^2 \text{ e la autofunzione corrispondente è } f_m(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi R}} e^{im\theta}.$$



$$E_n = \frac{\hbar^2}{2mR^2} \left(n - \frac{\Phi_B}{\Phi} \right)^2 \text{ con } \Phi = \frac{2\pi\hbar c}{e} = \text{flusso elementare}$$

j = corrente di probabilità. Unica componente possibilmente non nulla è j_θ e si ha

$$\text{sulla stato } n \quad j_\theta = \frac{1}{m} \text{Re} \left\{ f_n^* \left(-i\hbar \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{e}{c} \frac{\Phi_B}{2\pi R} \right) f_n \right\} = \frac{1}{m} \frac{1}{2\pi R} \left(\frac{1}{R} \hbar m - \frac{e}{c} \frac{\Phi_B}{2\pi} \right) = \frac{\hbar}{2\pi m R^2} \left(n - \frac{\Phi_B}{\Phi} \right)$$

Per $\Phi_B = 0$ il fondamentale ha $n=0$ e non c'è corrente, aumentandolo Φ_B inizia a scorrere corrente in verso orario e la corrente aumenta finché non si arriva a $\Phi_B = \frac{1}{2}\Phi - \epsilon$. Possiamo a

$\Phi_B = \frac{1}{2}\Phi + \epsilon$ il fondamentale ha $n=1$, la corrente ha la massima intensità e scorre in verso antiorario. Aumentando ancora Φ_B la corrente diminuisce fino ad annullarsi a $\Phi_B = \Phi$.

$B=0$ ma $\vec{A} \neq 0$ ha un effetto osservabile (nota $\Phi_B \leftrightarrow \Phi_B \pm \Phi$ corrisponde a $n \leftrightarrow n \mp 1$, quindi

Φ_B e $\Phi_B \pm \Phi$ sono indistinguibili)

Particelle identiche

Decadimenti ρ^0

Se ρ^0 è un mesone di spin 1 e massa $\approx 770 \text{ MeV}/c^2$, che decade preferenzialmente in $\pi^+\pi^-$.

Mostrare che il decadimento $\rho^0 \rightarrow \pi^0\pi^0$ è vietato.

Visto che i pioni hanno spin nullo, la conservazione del momento angolare implica che il momento orbitale relativo dei due pioni (= momento orbitale nel c.m.) deve essere $l=1$. Poiché per scambio dei due pioni si ha $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ ($\vec{r}$ = posizione relativa nel problema dei 2 corpi) e $Y_{lm}(-\hat{r}) = (-1)^l Y_{lm}(\hat{r})$, sotto scambio dei due pioni la funzione d'onda sarebbe antisimmetrica, mentre la statistica di Bose-Einstein impone di avere uno stato simmetrico per lo scambio dei pioni. Di conseguenza il decadimento non può avvenire.

Stati a 2 fotoni e Teorema di Landau-Yang

Consideriamo il decadimento di una particella in 2 fotoni e studiamo la forma possibile per la funzione d'onda dei due fotoni in rappresentazione dell'impulso nel centro di massa.

-) spin 0 La funzione d'onda deve essere bilineare nelle polarizzazioni $\vec{E}_1, \vec{E}_2$ (supponiamo per semplicità polarizzazione lineare), deve essere una funzione dell'impulso relativo $\vec{k}$ e deve essere invariante per rotazioni (spin 0). La trasversalità impone $\vec{k} \cdot \vec{E}_i = 0$, Bose-Einstein implica che lo stato deve essere simmetrico per scambio dei due fotoni (quindi per $\vec{k} \rightarrow -\vec{k}$ e $\vec{E}_1 \leftrightarrow \vec{E}_2$).

Due combinazioni soddisfano questi requisiti

$$P_+ = \vec{E}_1 \cdot \vec{E}_2 f(k^2) \quad P_- = \vec{k} \cdot (\vec{E}_1 \times \vec{E}_2) g(k^2)$$

dove $f(k^2)$ e $g(k^2)$ sono due funzioni arbitrarie dell'impulso relativo.

Sotto parità $\vec{E}_i \rightarrow -\vec{E}_i$ e $\vec{k} \rightarrow -\vec{k}$, quindi P_+ ha parità positiva e P_- ha parità negativa.

-) spin 1/2 Una particella di spin 1/2 non può decadere in 2 fotoni in quanto non si conserva il momento angolare (somma di momenti interi è sempre intero)

-) spin 1 Dobbiamo costruire un vettore con $\vec{E}_1, \vec{E}_2, \vec{k}$

$\vec{E}_1 \times \vec{E}_2$ non soddisfa Bose-Einstein; $\vec{E}_1 \cdot \vec{E}_2$ soddisfa Bose-Einstein ma non è un vettore

$(\vec{E}_1 \cdot \vec{E}_2) \vec{k}$ non soddisfa Bose-Einstein; $\vec{k} \times (\vec{E}_1 \times \vec{E}_2)$ soddisfa tutto ma si annulla identicamente

a causa della trasversalità: $\vec{k} \times (\vec{E}_1 \times \vec{E}_2) = \vec{E}_1 (\vec{k} \cdot \vec{E}_2) - (\vec{k} \cdot \vec{E}_1) \vec{E}_2 = 0$

Non si riesce a costruire un vettore non nullo! Non esistono stati di 2 fotoni con momento angolare totale 1. Di conseguenza il decadimento $\text{spin } 1 \rightarrow \gamma\gamma$ non può avvenire (th. Landau-Yang).

Conteggi stati simmetrici/antisimmetrici

Supponiamo che due particelle abbiano entrambe n stati a disposizione, mostrare che esistono

$$S = \frac{1}{2} n(n+1) \text{ stati simmetrici}$$

$$A = \frac{1}{2} n(n-1) \text{ stati antisimmetrici}$$

Ci sono in totale n^2 stati costruibili tramite le coppie di funzioni $\psi_a(x)\psi_b(y)$.
prima particella seconda particella

Per ogni coppia con $a \neq b$ si possono costruire sia lo stato simmetrico

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_a(x)\psi_b(y) + \psi_a(y)\psi_b(x))$$

che lo stato antisimmetrico $\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_a(x)\psi_b(y) - \psi_a(y)\psi_b(x)) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_a(x) & \psi_b(x) \\ \psi_a(y) & \psi_b(y) \end{vmatrix}$

mentre nei casi con $a=b$ esiste solo lo stato simmetrico.

Di conseguenza $A = \text{numero di coppie non ordinate } (a,b) = \frac{1}{2} n(n-1)$, $S = A + n = \frac{1}{2} n(n+1)$

(check $A + S = n^2$)

Nel caso specifico di particelle di spin $\frac{1}{2}$ si ha $n = 2S + 1$ e quindi

$$\left\{ \begin{array}{l} S = \frac{1}{2} (2S+1)(2S+2) = (S+1)(2S+1) \\ A = \frac{1}{2} (2S+1)(2S) = S(2S+1) \end{array} \right.$$

da cui $\frac{S}{A} = \frac{S+1}{S}$ e solo per $S \rightarrow \infty$ si ha $S \sim A$.

Due particelle in buca infinita

Consideriamo due particelle di massa m , non interagenti tra loro e confinate a muoversi su un segmento di lunghezza "a" da una buca infinita di potenziale.

1) scrivere i primi livelli energetici del sistema

Le funzioni d'onda di singola particella del sistema sono $\psi_n \propto \sin(n \frac{\pi x}{a})$, $n \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$ e $E_n = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar \pi}{a} n \right)^2$.

Di conseguenza i primi 4 livelli energetici corrispondono ai valori di n_1, n_2

$$(1,1) \quad E_{1,1} = 2 E_0$$

$$(1,2) \text{ e } (2,1) \quad E_{1,2} = 5 E_0$$

$$(2,2) \quad E_{2,2} = 8 E_0$$

$$(1,3) \text{ e } (3,1) \quad E_{1,3} = 10 E_0$$

2) Calcolare la degenerazione dei primi 4 livelli per

•) due particelle identiche di spin $\frac{1}{2}$

$E_{1,1}$ e $E_{2,2}$ sono necessariamente simmetrici orbitali, quindi devono essere antisimmetrici di spin e quindi hanno degenerazione 1

Per $E_{1,2}$ e $E_{1,3}$ ci possono essere sia combinazioni simmetriche che antisimmetriche orbitali, quindi

tutti i 4 stati di spin sono ammissibili e la degenerazione è 4.

•) due particelle diverse di spin $1/2$

Sum queste cose tutti i 4 stati di spin sono sempre ammissibili, inoltre gli stati $(1,2)$ e $(2,1)$ come anche gli stati $(1,3)$ e $(3,1)$ sono distinguibili, quindi $E_{1,2}$ e $E_{1,3}$ hanno deg. orbitale 2 (e quindi $\text{deg}=8$) mentre $E_{1,1}$ e $E_{2,2}$ hanno deg. orbitale 1 e quindi $\text{deg}=4$

•) due particelle identiche di spin 1

$$S = (2S+1)(S+1) = 6 \quad (= \text{deg spin } 0 + \text{deg spin } 2)$$

$$A = (2S+1)S = 3 \quad (= \text{deg spin } 1)$$

Negli stati $E_{1,1}$ e $E_{2,2}$ si hanno solo i 6 stati simmetrici di spin, in $E_{1,2}$ e $E_{1,3}$ ci possono essere tutti e 9 gli stati di spin

	$E_{1,1}$	$E_{1,2}$	$E_{2,2}$	$E_{1,3}$
spin $1/2$ id	1	4	1	4
spin $1/2$ div	4	8	4	8
spin 1 id	6	9	6	9
spin 1 div	9	18	9	18

spin S semintere id:

$$E_{ii} \quad \text{deg} = \frac{1}{2} (2S+1)(2S)$$

$$E_{ij} \quad \text{deg} = \frac{1}{2} N_A + \frac{1}{2} N_S = (2S+1)^2$$

spin S intere id:

$$E_{ii} \quad \text{deg} = \frac{1}{2} (2S+1)(2S+2)$$

$$E_{ij} \quad \text{deg} = \frac{1}{2} N_S + \frac{1}{2} N_A = (2S+1)^2$$

Due particelle id. in oscillatore 3d

Consideriamo due particelle identiche di spin $1/2$ e massa m non interagenti in un oscillatore armonico isotropo tridimensionale

1) Lo stato fondamentale è degenero? A che valori di spin totale S e momento orbitale totale L corrisponde? Scrivere esplicitamente la funzione d'onda

Lo spettro corrisponde alla somma di 6 oscillatori armonici unidimensionali

$$E = \hbar\omega(3 + n_{1x} + n_{1y} + n_{1z} + n_{2x} + n_{2y} + n_{2z})$$

e l'unico stato orbitale che ha $E = 3\hbar\omega$ è $n_{1x} = \dots = n_{2z} = 0$ che è non degenero (quindi $l=0$) e simmetrico per scambi, quindi per antisimmetria si deve avere $S=0$

$$|\psi\rangle = \frac{\psi(\vec{x}_1)\psi(\vec{x}_2)}{\sqrt{2}} \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \quad \text{dove } \psi(\vec{x}) = \psi_0(x)\psi_0(y)\psi_0(z)$$

e $\psi_0(\vec{x}) \propto e^{-\vec{x}^2/2\ell^2}$ è la funzione d'onda del fondamentale di un oscillatore 1d.

2) quale è la degenerazione del livello primo eccitato con energia $E = 4\hbar\omega$? Che valori di S e L sono possibili? Uno stato con energia $4\hbar\omega$ deve necessariamente essere auto stato di L^2 , L_z , S^2 , S_z ?

Per avere $E = 4\hbar\omega$ una particella deve necessariamente avere $n_x = n_y = n_z = 0$ mentre l'altra è in uno dei 3 stati: $(1,0,0)$ o $(0,1,0)$ o $(0,0,1)$. Poiché le particelle sono indistinguibili ci sono

quindi 3 stati orbitali possibili (e non 6 come se fossero distinguibili). Poiché le due particelle sono in due stati orbitali diversi, tutti e 4 gli stati di spin sono ammissibili, quindi

$$\text{deg} = 3026 \times 4 \text{ spin} = 12$$

Il primo eccitato dell'oscillatore armonico 1d è proporzionale a $\psi_0(\xi)$, quindi i 3 stati orbitali corrispondono a $x f(x)$, $y f(x)$, $z f(x)$, che hanno $l=1$, quindi solo $l=1$ è possibile e tutti gli stati sono autostati di L^2 ma in generale non di L_z (solo $z f(x)$ è autostato di L_z)

Usando combinazioni simmetriche/antisimmetriche degli stati orbitali e gli stati di spin $s=1,0$ si può ad esempio costruire (orb. simm.) $\times (S=0)$ + (orb. anti.) $\times (S=1)$ che non è autostato di $\vec{S}^2$ e analogamente (orb. anti.) $\times (| \uparrow \uparrow \rangle + | \downarrow \downarrow \rangle)$ che non è autostato di S_z .

3) Scrivere gli stati del punto 2 nella base in cui $\vec{L}^2$, L_z , $\vec{S}$ e S_z sono diagonali.

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi^{(0)}(\vec{x}_1) \psi_i^{(1)}(\vec{x}_2) + \psi^{(0)}(\vec{x}_2) \psi_i^{(1)}(\vec{x}_1) \right) \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi^{(0)}(\vec{x}_1) \psi_i^{(1)}(\vec{x}_2) - \psi^{(0)}(\vec{x}_2) \psi_i^{(1)}(\vec{x}_1) \right) \begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle \\ \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases}$$

dove $\psi^{(0)}$ e $\psi_i^{(1)}$ sono le funzioni orbitali col $l=0$ e $l=1, m=i$ rispettivamente.

4) Quale è la degenerazione del livello 5^{th} ?

Due possibilità si possono presentare

→ una particella in $(0,0,0)$ e l'altra in una tra $(1,1,0), (1,0,1), (0,1,1), (2,0,0), (0,2,0), (0,0,2)$

$$\deg = 6026 \times 4 \text{ spin} = 24$$

$(l=2)+(l=0)$ $(2,0,0)+(0,2,0)+(0,0,2)$ is invariant under rotation. $(H_2(\mathbb{S}) = 4\mathbb{S}^2 - 2)$

- entrambe le particelle in un livello del tipo $(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$, $(0, 0, 1)$

-) entrambe nello stesso livello: stato orbitale necessariamente simmetrico quindi

$$deg = 3orb \times 1spin = 3 \quad \text{singoleto antisimmetrico}$$

→ in due livelli diversi: 3 possibilità di salto, quindi poiché le particelle sono identiche altrimenti sarebbero 6

$$\deg = 3 \text{ orb} \times 4 \text{ spin} = 12$$

Questi cosicorispondono dal punto di vista orbitale a $1 \times 1 = 2 + 1 + 0$ ^{spin} _{anti} quindi i 15

stat: Trovati corrispondenze a $(l=2) \cdot (s=0)$, $(l=1) \cdot (s=1)$, $(l=0) \cdot (s=0)$
 $\quad \quad \quad 5 \text{ stat.} \quad \quad \quad 9 \text{ stat.} \quad \quad \quad 1 \text{ stat.}$

degenerazione totale del livello $5thW = 24+3+12 = 39$

quindi il primo eccitatore ha degenerazione 4

•) per il secondo eccitatore si può avere $(m_1, m_2) = (2, 0) \text{ o } (0, 2) \text{ o } (1, 1)$ quindi gli stati sono

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|m_1=2, m_2=0\rangle + |m_1=0, m_2=2\rangle) \quad |S=0, S_z=0\rangle$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|m_1=2, m_2=0\rangle - |m_1=0, m_2=2\rangle) \quad |S=1, S_z=0\rangle$$

$$|m_1=1, m_2=1\rangle \quad |S=0, S_z=0\rangle$$

quindi la degenerazione è 5

2) Calcolare al primo ordine perturbativo l'effetto sullo spettro di $d \neq 0$

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \frac{1}{2} (S^2 - S_1^2 - S_2^2) = \frac{1}{2} (S^2 - \frac{3}{2} \hbar^2) = \begin{cases} -\frac{3}{4} \hbar^2 & S=0 \\ \frac{1}{4} \hbar^2 & S=1 \end{cases}$$

•) quindi $S=0 \quad \Delta = -\frac{3}{4} \hbar^2 d \langle 0 | x_1^2 | 0 \rangle \langle 0 | x_2^2 | 0 \rangle$

inoltre $\langle 0 | x^2 | 0 \rangle = \|x|0\rangle\|^2 = \|\frac{d}{\sqrt{2}} (a + a^\dagger)|0\rangle\|^2 = \|\frac{d}{\sqrt{2}} |1\rangle\|^2 = \frac{d^2}{2}$ quindi $\Delta = -\frac{3}{4} \hbar^2 d \frac{d^2}{4}$

•) primo eccitatore

si ha $\left(\begin{array}{c|c} 0 & \\ \hline 0 & \propto \mathbb{1}_{3 \times 3} \end{array} \right) \begin{cases} |S=0, 0\rangle \\ |S=1, S_z\rangle \end{cases}$ poiché usiamo base diagonale in $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$

Per gli elementi di matrice si ha quindi:

$$\begin{aligned} & -\frac{3}{4} \hbar^2 d \frac{1}{2} (\langle m_1=0, m_2=1 | + \langle m_1=1, m_2=0 |) x_1^2 x_2^2 (|m_1=0, m_2=1\rangle + |m_1=1, m_2=0\rangle) = \\ & = -\frac{3}{4} \hbar^2 d \frac{1}{2} (\langle m_1=0, m_2=1 | x_1^2 x_2^2 | m_1=0, m_2=1 \rangle + \langle m_1=1, m_2=0 | x_1^2 x_2^2 | m_1=1, m_2=0 \rangle) = \\ & = -\frac{3}{4} \hbar^2 d \langle m_1=0 | x_1^2 | m_1=0 \rangle \langle m_2=1 | x_2^2 | m_2=1 \rangle = -\frac{3}{4} \hbar^2 d \left(\frac{1}{2} d^2 \right) \left(\frac{3}{2} d^2 \right) = -\frac{9}{16} \hbar^2 d^4 \\ & \langle 1 | x^2 | 1 \rangle = \|x|1\rangle\|^2 = \|\frac{d}{\sqrt{2}} (a + a^\dagger) |1\rangle\|^2 = \|\frac{d}{\sqrt{2}} (|0\rangle + \sqrt{2} |2\rangle)\|^2 = \frac{d^2}{2} (1+2) = \frac{3}{2} d^2 \end{aligned}$$

Per gli stati del tripletto si ha invece

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4} \hbar^2 d \frac{1}{2} (\langle m_1=0, m_2=1 | - \langle m_1=1, m_2=0 |) x_1^2 x_2^2 (|m_1=0, m_2=1\rangle - |m_1=1, m_2=0\rangle) = \\ & = \frac{1}{4} \hbar^2 d \frac{1}{2} (\langle m_1=0, m_2=1 | x_1^2 x_2^2 | m_1=0, m_2=1 \rangle + \langle m_1=1, m_2=0 | x_1^2 x_2^2 | m_1=1, m_2=0 \rangle) = \\ & = \frac{1}{4} \hbar^2 d \langle m_1=0 | x_1^2 | m_1=0 \rangle \langle m_2=1 | x_2^2 | m_2=1 \rangle = \frac{1}{4} \hbar^2 d \left(\frac{1}{2} d^2 \right) \left(\frac{3}{2} d^2 \right) = \frac{3}{16} \hbar^2 d^4 \end{aligned}$$

•) per il secondo eccitatore nuovamente gli stati del tripletto e del singoletto non interferiscono, infatti

a causa della simmetria per partito anche nel sottosistema dei singoletti la matrice è diagonale

$$\Delta_{S,1} = -\frac{3}{4} \hbar^2 d (\langle m_1=2 | x_1^2 | m_1=2 \rangle \langle m_2=0 | x_2^2 | m_2=0 \rangle + \langle m_1=2 | x_1^2 | m_1=0 \rangle^2) = -\frac{3}{4} \hbar^2 d \left(\frac{d^2}{2} (2+3) \frac{d^2}{2} + \frac{d^4}{4} \cdot 2 \right)$$

$$\Delta_T = \frac{1}{4} \hbar^2 d (\langle m_1=2 | x_1^2 | m_1=2 \rangle \langle m_2=0 | x_2^2 | m_2=0 \rangle - \langle m_1=2 | x_1^2 | m_1=0 \rangle^2) = -\frac{3}{4} \hbar^2 d \left(\frac{d^2}{2} (2+3) \frac{d^2}{2} - \frac{d^4}{4} \cdot 2 \right)$$

$$\Delta_{S,2} = -\frac{3}{4} \hbar^2 d \langle m_1=1 | x_1^2 | m_1=1 \rangle^2 = -\frac{3}{4} \hbar^2 d \left(\frac{3}{2} d^2 \right)^2$$

Urto di particella carica su oscillatore

Consideriamo una particella carica "pesante" che si muove lungo l'asse x con velocità v . Un oscillatore armonico isotropo è presente nel punto $(0, b, 0)$, quindi con parametro d'urto b per la particella carica incidente.

Il campo elettrico nella posizione dell'oscillatore è

$$\begin{cases} E_x = - \frac{e \gamma v t}{(b^2 + \gamma^2 v^2 t^2)^{3/2}} \\ E_y = \frac{e \gamma b}{(b^2 + \gamma^2 v^2 t^2)^{3/2}} \end{cases}$$

con tempo caratteristico $\tau = \frac{b}{\gamma v}$ (vedi Fisica 3)

La hamiltoniana di interazione è $V = -\vec{d} \cdot \vec{E}(t)$ dove $\vec{E}(t)$ è campo nella posizione dell'oscillatore e se l'oscillatore è inizialmente nello stato $|i\rangle$ la probabilità di essere in $|f\rangle \neq |i\rangle$ dopo la perturbazione è data dalla ampiezza

$$a_{fi} = - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i \omega_{fi} t} V_{fi}(t) dt = \frac{i}{\hbar} \langle f | \vec{d} | i \rangle \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{E}(t) e^{i \omega_{fi} t} dt \quad \text{con } \omega_{fi} = \frac{E_f - E_i}{\hbar}$$

$\vec{d} = e \vec{r}$; $r_i = \frac{b}{\sqrt{2}} (a_i + a_i^\dagger)$; $\ell^2 = \frac{\hbar}{m \omega}$; $a_i, a_i^\dagger$ = op. di disc./solita per la componente "i"

$\uparrow$ massa della particella nell'oscillatore

Supponiamo di essere inizialmente nel fondamentale $|0_x\rangle |0_y\rangle |0_z\rangle$, allora $\vec{d}$ ha elementi non nulli solo con $|1_x\rangle |0_y\rangle |0_z\rangle$, $|0_x\rangle |1_y\rangle |0_z\rangle$ e $|0_x\rangle |0_y\rangle |1_z\rangle$. Smette tutti gli elementi di matrice non nulli di $\vec{d}$ sono uguali e valgono $\langle 1 | d | 0 \rangle = \frac{e \ell}{\sqrt{2}}$

NOTA: elementi non nulli di d_x, d_y, d_z corrispondono a stati finali diversi, no interferenza.

La probabilità di eccitazione è quindi $P(b) = |a_x|^2 + |a_y|^2 = \frac{e^2 \ell^2}{2 \hbar^2} (|\tilde{E}_x(\omega)|^2 + |\tilde{E}_y(\omega)|^2)$ con $\omega_{fi} = \omega$ e

la corrispondente perdita media di energia della particella incidente è $-\Delta E(b) = \hbar \omega P(b)$

$$\tilde{E}_x(\omega) = -e \gamma v \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i \omega t} \frac{t}{(b^2 + \gamma^2 v^2 t^2)^{3/2}} dt = -e \gamma v \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i \omega \tau \alpha} \left(\frac{b}{\gamma v} \right)^2 \frac{d \alpha}{b^3 (1 + \alpha^2)^{3/2}} = -\frac{e}{b \gamma v} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i \omega \tau \alpha} \frac{d \alpha}{(1 + \alpha^2)^{3/2}}$$

$t = \frac{b}{\gamma v} \alpha = \tau \alpha$

Funzione di Bessel modificata di secondo tipo $K_0(\xi) = \int_0^\infty \frac{\cos(\xi t)}{\sqrt{1+t^2}} dt = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i \xi t} \frac{1}{\sqrt{1+t^2}} dt =$

$$= -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i \xi t}}{i \xi} \left(-\frac{1}{2} \frac{2t}{(1+t^2)^{3/2}} \right) dt = \frac{1}{2 i \xi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i \xi t} \frac{t dt}{(1+t^2)^{3/2}} \Rightarrow \tilde{E}_x(\omega) = -\frac{e}{b \gamma v} 2 i \omega \tau K_0(\omega \tau)$$

$$\tilde{E}_y(\omega) = e \gamma b \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i \omega t} \frac{dt}{(b^2 + \gamma^2 v^2 t^2)^{3/2}} = e \gamma b \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i \omega \tau \alpha} \frac{b}{\gamma v} \frac{d \alpha}{b^3 (1 + \alpha^2)^{3/2}} = \frac{e}{b \gamma v} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i \omega \tau \alpha} \frac{d \alpha}{(1 + \alpha^2)^{3/2}}$$

$t = \frac{b}{\gamma v} \alpha = \tau \alpha$

$$K_1(\xi) = \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{\cos(\xi t)}{(1+t^2)^{3/2}} dt = \frac{1}{2 \xi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i \xi t}}{(1+t^2)^{3/2}} dt \Rightarrow \tilde{E}_y(\omega) = \frac{e}{b \gamma v} 2 \omega \tau K_1(\omega \tau)$$

$$P(b) = \frac{e^2 \ell^2}{2 \hbar^2} (|\tilde{E}_x(\omega)|^2 + |\tilde{E}_y(\omega)|^2) = \frac{1}{2 \hbar^2} \frac{\hbar}{m \omega} e^2 \left(\frac{2e}{b \gamma v} \right)^2 (\omega \tau)^2 \left(\frac{1}{\gamma^2} K_0(\omega \tau)^2 + K_1(\omega \tau)^2 \right) =$$

$\ell^2 = \hbar / m \omega$

ricordiamo $\tau = \frac{b}{\gamma v}$

$$= \frac{2}{\hbar \omega} \frac{e^4}{m \gamma^2} \frac{1}{b^2} (\omega \tau)^2 \left(\frac{1}{\gamma^2} K_0(\omega \tau)^2 + K_1(\omega \tau)^2 \right)$$

Andamenti asintotici delle funzioni di Bessel (vedi ad es. Abramowitz, Stegun "Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables" § 9.6, 9.7)

per $z \gg 1$: $K_\alpha(z) \sim \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z}$

per $z \ll 1$: $K_\alpha(z) \begin{cases} \alpha=0 & -\log(z/2) - \gamma \quad \text{con } \gamma \approx 0.577 \text{ costante Euler-Hascheroni} \\ \alpha \geq 1 & \frac{\Gamma(\alpha)}{2} \left(\frac{z}{2}\right)^\alpha \quad \text{quindi } \frac{1}{z} \text{ per } \alpha=1 \end{cases}$

Per $\omega z \gg 1$ (v piccolo e b grandi) $P(b) \rightarrow 0$ esp in ωz e quindi in b , quindi non ci sono problemi di salto del limite di integrazione in b e non c'è assorbimento in questo limite (case adiabatic)

Per $\omega z \ll 1$ (v grandi e b piccoli) $(\omega z)^2 \left(\frac{1}{z^2} K_0(\omega z)^2 + K_1(\omega z)^2 \right) \rightarrow 1$ quindi

$P(b) \rightarrow \frac{2}{\hbar \omega} \frac{e^4}{m v^2} \frac{1}{b^2}$ e quindi $-\Delta E(b) = \hbar \omega P(b) = \frac{2e^4}{m v^2} \frac{1}{b^2}$

come nel caso classico con particella non legata e approx impulsiva

$\left(P_y = \int_{-\infty}^{+\infty} e E_y dy \Rightarrow 2\pi b p_y = \frac{e}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} E_y dx \cdot 2\pi b = \frac{e^2}{v^2} 4\pi \Rightarrow p_y = \frac{2e^2}{v b} \right)$ e quindi

$-\Delta E = \frac{p_y^2}{2m} = \frac{2e^4}{m v^2} \frac{1}{b^2}$ da cui si ottiene la formula di Bohr

NOTA: l'energia persa deve essere integrata in $2\pi b db$ quindi per b piccoli si ha una divergenza logaritmica che necessita di cut-off. Dal punto di vista fisico non ha senso usare la approx. di dipolo per $b \rightarrow 0$

NOTA: se l'oscillatore fosse stato al livello $|n\rangle$ si sarebbe usato $\langle n+1|a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}$ e $\langle n-1|a|n\rangle = \sqrt{n}$ e il sistema può sia assorbire che cedere energia, in media $-\Delta E(b) = \hbar \omega [P(b)(n+1) - P(b)n] = \hbar \omega P(b)$ come prima.

$\uparrow$ assorb $\uparrow$ emissione

Osc. armonici con accensione campo elettrico

Consideriamo un sistema 1d con una carica "e" legata a un potenziale armonico. Al tempo $t=0$ è acceso "istantaneamente" (tempo di accensione $\ll 1/\omega$) un campo elettrico $\mathcal{E}$

1) Quale è la probabilità esatta che a $t > 0$ l'oscillatore si trovi in uno stato eccitato della hamiltoniana finale?

$$H_{\mathcal{E}} = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 - e \mathcal{E} x = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \left(x - \frac{e \mathcal{E}}{m \omega^2} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{e^2}{m \omega^2} \mathcal{E}^2$$

Rispetto a $\mathcal{E}=0$ le energie cambiano per l'aggiunta di una costante e negli autostati si deve

$$\text{usare } x \rightarrow x - \frac{e \mathcal{E}}{m \omega^2} = x - x_0 \quad \left(x_0 = \frac{e \mathcal{E}}{m \omega^2} \right)$$

$$\psi_n = \text{autostati con } \mathcal{E}=0, \quad \phi_n = \text{autostati con } \mathcal{E} \neq 0$$

$$P_{\text{ecc}} = \text{probabilità di andare in stati eccitati} = 1 - \text{probabilità di andare nel fondamentale} = 1 - |\langle \phi_0 | \psi_0 \rangle|^2$$

Usando la rapp. di Schrodinger ($\ell^2 = \hbar/m\omega$)

$$\psi_0(x) = \left(\frac{1}{\pi \ell^2} \right)^{1/4} \exp(-x^2/2\ell^2); \quad \phi_0(x) = \psi_0(x - x_0)$$

$$\begin{aligned} \langle \phi_0 | \psi_0 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{\pi} \ell} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{1}{2\ell^2} x^2 - \frac{1}{2\ell^2} (x - x_0)^2\right) dx = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\ell} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{-\frac{1}{2\ell^2} \left[(y + \frac{1}{2}x_0)^2 + (y - \frac{1}{2}x_0)^2 \right]\right\} dy = \\ &= \frac{e^{-x_0^2/4\ell^2}}{\sqrt{\pi} \ell} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2/\ell^2} dy = e^{-x_0^2/4\ell^2} \end{aligned}$$

$$\text{quindi } P_{\text{ecc}} = 1 - |\langle \phi_0 | \psi_0 \rangle|^2 = 1 - e^{-x_0^2/2\ell^2} = 1 - \exp\left(-\frac{e^2 \mathcal{E}^2}{2 m^2 \omega^4} \frac{m \omega}{\hbar}\right) = 1 - \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{m \omega^3 \hbar}\right)$$

2) All'ordine perturbativo più basso quali livelli possono essere raggiunti e quanto vale P_{ecc} ?

$$|\phi_k\rangle \simeq |\psi_k\rangle + \sum_i' |\psi_i\rangle \frac{\langle \psi_i | V | \psi_k \rangle}{E_k^{(0)} - E_i^{(0)}}$$

$$\text{Se } k \neq 0 \quad |\langle \psi_0 | \phi_k \rangle|^2 \simeq \frac{|\langle \psi_0 | V | \psi_k \rangle|^2}{(E_k^{(0)} - E_0^{(0)})^2} \equiv \frac{V_{0k}^2}{\hbar^2 \omega_{k0}^2} \quad \hbar \omega_{k0} \equiv E_k - E_0$$

$$\langle \phi_k | \phi_k \rangle = 1 + \sum_i' \frac{|V_{ik}|^2}{(E_k - E_0)^2} = 1 + O(V^2) \quad \text{quindi } P_{0 \rightarrow k \neq 0} = \frac{|\langle \psi_0 | \phi_k \rangle|^2}{\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle \langle \phi_k | \phi_k \rangle} \simeq \frac{|V_{0k}|^2 / \hbar^2 \omega_{k0}^2}{1 + O(V^2)} \simeq \frac{|V_{0k}|^2}{\hbar^2 \omega_{k0}^2}$$

NOTA: con teoria delle perturb. al primo ordine non si può usare $P_{\text{ecc}} = 1 - P_{0 \rightarrow 0}$ poiché

$$P_{0 \rightarrow 0} = 1 + O(V^2) \quad \text{e questo risultato non è il corretto valore al secondo ordine,}$$

poiché il termine $O(V^2)$ viene modificato dal secondo ordine di ϕ_0 in funzione di ψ_k

Nel caso specifico dell'oscillatore $\hbar \omega_{k0} = k \hbar \omega$, $V = -e \mathcal{E} x$, $x = \frac{\ell}{\sqrt{2}} (a + a^\dagger)$ con $\ell^2 = \hbar/m\omega$

$V_{0k} \propto \langle 0 | (a + a^\dagger) | 1 \rangle = \delta_{1k}$ quindi solo $|1\rangle$ è raggiungibile, $V_{01} = -e \mathcal{E} \frac{\ell}{\sqrt{2}}$ e quindi

$$P_{\text{ecc}} \simeq P_{0 \rightarrow 1} \simeq \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{\hbar^2 \omega^2} \frac{\ell^2}{2} = \frac{1}{2} \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{m \hbar \omega^3} = \text{sviluppa al primo ordine del risultato del punto 1)}$$

3) Ripetere il calcolo perturbativo usando la forma del campo $E(t) = E_0 \begin{cases} \frac{1}{2} e^{t/\tau} & \text{per } t < 0 \\ 1 - \frac{1}{2} e^{-t/\tau} & \text{per } t \geq 0 \end{cases}$

Si vuole quindi determinare la probabilità di passare dallo stato

$|\psi_0\rangle$ a $t = -\infty$ allo stato $|\phi_0\rangle$ a $t = +\infty$. Usando Teoria delle pert. dipendenti dal Tempo abbiamo al tempo t_f : $|\psi_0(t_f)\rangle \simeq \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t_f} V_{00}(t) dt\right) e^{-iE_0^{(0)} t_f/\hbar} |\psi_0\rangle + \sum_{i \neq 0} \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t_f} e^{i\omega_{i0} t} V_{i0}(t) dt\right) e^{-iE_i^{(0)} t_f/\hbar} |\psi_i\rangle$ mentre usando teoria delle pert. indep. dal tempo abbiamo

$$|\phi_k\rangle \simeq |\psi_k\rangle + \sum_{j \neq k} |\psi_j\rangle \frac{W_{jk}}{E_k^{(0)} - E_j^{(0)}} \quad \text{dove} \quad W_{jk} = \langle \psi_j | V(t_f \rightarrow \infty) | \psi_k \rangle = \lim_{t_f \rightarrow \infty} V_{jk}(t_f)$$

Abbiamo allora al primo ordine per $k \neq 0$

$$\begin{aligned} \langle \phi_k | \psi_0(t) \rangle &\simeq -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t_f} e^{i\omega_{k0} t} V_{k0}(t) dt e^{-iE_k^{(0)} t_f/\hbar} + \underbrace{\left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t_f} V_{00}(t) dt\right) e^{-iE_0^{(0)} t_f/\hbar}}_{\simeq 1 \text{ poich\'e } W \text{ \u00e9 gi\u00e0 del primo ordine}} \frac{W_{0k}^*}{E_k^{(0)} - E_0^{(0)}} \simeq W_{k0} \text{ se } V \text{ \u00e9 herm.} \\ &\simeq -\frac{i}{\hbar} e^{-iE_k^{(0)} t_f/\hbar} \int_{-\infty}^{t_f} e^{i\omega_{k0} t} V_{k0}(t) dt + \frac{1}{\hbar \omega_{k0}} e^{-iE_0^{(0)} t_f/\hbar} V_{k0}(t_f \rightarrow \infty) = \\ &= -\frac{i}{\hbar} e^{-iE_k^{(0)} t_f/\hbar} \left(\frac{e^{i\omega_{k0} t}}{i\omega_{k0}} V_{k0}(t) \Big|_{-\infty}^{t_f} - \int_{-\infty}^{t_f} \frac{e^{i\omega_{k0} t}}{i\omega_{k0}} V'_{k0}(t) dt \right) + \frac{1}{\hbar \omega_{k0}} e^{-iE_0^{(0)} t_f/\hbar} V_{k0}(t_f \rightarrow \infty) = \\ &= \frac{1}{\hbar \omega_{k0}} e^{-iE_k^{(0)} t_f/\hbar} \int_{-\infty}^{t_f} e^{i\omega_{k0} t} \frac{\partial}{\partial t} V_{k0}(t) dt \quad \omega_{k0} = \frac{E_k^{(0)} - E_0^{(0)}}{\hbar} \end{aligned}$$

Abbiamo quindi:

$$P_{0 \rightarrow k \neq 0} = \frac{1}{\hbar^2 \omega_{k0}^2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial t} (V_{k0}) e^{i\omega_{k0} t} dt \right|^2 \quad \text{e usando } V = -exE(t), \quad \langle 1|x|0 \rangle = \frac{d}{\sqrt{2}}; \quad e^2 = \frac{\hbar}{m\omega}$$

e si deve calcolare ($\omega_{10} = \omega$)

$$\begin{aligned} \frac{1}{E_0} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial E}{\partial t} e^{i\omega t} dt &= \frac{1}{2\tau} \int_0^{\infty} e^{-t/\tau + i\omega t} dt + \frac{1}{2\tau} \int_{-\infty}^0 e^{t/\tau + i\omega t} dt = \frac{1}{2\tau} \int_0^{\infty} e^{(i\omega - \frac{1}{\tau})t} dt + \frac{1}{2\tau} \int_0^{\infty} e^{(-i\omega - \frac{1}{\tau})t} dt = \\ &= -\frac{1}{2\tau} \frac{1}{i\omega - 1/\tau} + \frac{1}{2\tau} \frac{1}{i\omega + 1/\tau} = \frac{1}{2\tau} \frac{-i\omega - 1/\tau + i\omega - 1/\tau}{- \omega^2 - 1/\tau^2} = \frac{1}{\tau^2} \frac{1}{\omega^2 + 1/\tau^2} = \frac{1}{1 + \omega^2 \tau^2} \end{aligned}$$

(per ω grande $\sim 1/\omega^2$ poich\'e $\frac{\partial E}{\partial t}$ \u00e9 continua con derivata discontinua)

Abbiamo quindi infine

$$P_{acc.} = P_{0 \rightarrow 1} = \frac{1}{\hbar^2 \omega^2} \frac{e^2 E_0^2}{2} \frac{\hbar}{m\omega} \left(\frac{1}{1 + \omega^2 \tau^2} \right)^2 = \frac{1}{2} \frac{e^2 E_0^2}{m \hbar \omega^3} \left(\frac{1}{1 + \omega^2 \tau^2} \right)^2 \quad \begin{aligned} &\simeq 0 \text{ per } \omega \tau \gg 1 \\ &\text{Nessuna transizione} \\ &\text{in regime adiabatico.} \end{aligned}$$

valore ottenuto prima
per accensione "istantanea"
 $\omega \tau \rightarrow 0$

Modello semplificato di effetto fotoelettrico

Consideriamo una particella di massa m legata da un potenziale $\propto \delta$ in una dimensione:

$$H = \frac{1}{2m} p^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \beta \delta(x) \quad [\beta] = 1/\text{lunghezza}$$

e consideriamo una perturbazione $V(t) = -x F_0 \cos(\omega t)$, analoga a una interazione di dipolo elettrico con un campo oscillante.

Vogliamo calcolare il rate di ionizzazione. Indichiamo con $\varphi(x)$ la funzione d'onda dell'unico stato legato

$\varphi(x) = \sqrt{\beta} e^{-\beta|x|}$, avente energia $E_0 = -\frac{\hbar^2 \beta^2}{2m}$, sia inoltre $\psi_k(x)$ la generica funzione d'onda

dello spettro continuo dell'hamiltoniana H , normalizzata con $\langle \psi_k | \psi_{k'} \rangle = 2\pi \delta(k - k')$

(stessa normalizzazione di e^{ikx}). Poiché $V(t) = -x \frac{F_0}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})$ le possibili condizioni

di risonanza sono

$$1) E_k - E_0 + \hbar\omega = 0$$

$$2) E_k - E_0 - \hbar\omega = 0$$

Poiché $E_k > 0$ e $E_0 < 0$ solo la 2) è realizzabile (la particella legata può solo assorbire energia ma non cederne, poiché è nel fondamentale), quindi la "regola d'oro" si scrive

$$\gamma = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_k - E_0 - \hbar\omega) \left| \frac{F_0}{2} \langle \psi_k | x | \varphi \rangle \right|^2 \frac{dk}{2\pi}$$

densità degli stati per gli stati del continuo normalizzati con $\langle \psi_k | \psi_{k'} \rangle = 2\pi \delta(k - k')$

Densità degli stati $\rho(k) dk$ dove essere tale che $1 = \int |\psi_k\rangle \langle \psi_k| \rho(k) dk + \sum_i p_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|$

Moltiplichiamo a destra per $|\psi_{k'}\rangle$ e a sinistra per $\langle \psi_{k''}|$ otteniamo usando la normalizz.

generale $\langle \psi_k | \psi_{k'} \rangle = N(k) \delta(k - k')$ la relazione

$$N(k') \delta(k'' - k') = \int N(k'') N(k) \delta(k'' - k) \delta(k - k') \rho(k) dk = N(k')^2 \rho(k') \delta(k'' - k')$$

quindi $\rho(k') = \frac{1}{N(k')}$. Procedendo in modo identico per gli stati legati con $\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = N_i \delta_{ij}$

si ottiene per gli stati legati $p_i = 1/N_i$, quindi $p_i = 1$ per stati ortonormali.

$$\langle \psi_k | x | \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_k(x) x \underbrace{\sqrt{\beta} e^{-\beta|x|}}_{\text{disponi}} dx \quad \text{quindi contribuisce solo la parte disponi di } \psi_k(x)$$

Ai fini del calcolo dell'elemento di matrice si può quindi sostituire $\psi_k(x)$ con e^{ikx} , in quanto la parte disponi di $\psi_k(x)$ soddisfa una equazione di Schrödinger libera (la δ non ha effetto sulle funzioni disponi)

$$\langle \psi_k | x | \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} x \sqrt{\beta} e^{-\beta|x|} dx = i \frac{\partial}{\partial k} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} \sqrt{\beta} e^{-\beta|x|} dx = i \frac{\partial}{\partial k} I_k$$

$$I_k = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} \sqrt{\beta} e^{-\beta|x|} dx = \sqrt{\beta} \left(\int_0^{\infty} e^{-(\beta+ik)x} dx + \int_{-\infty}^0 e^{(\beta-ik)x} dx \right) = \sqrt{\beta} \left(\frac{1}{\beta+ik} + \frac{1}{\beta-ik} \right) =$$

$$= \sqrt{\beta} \frac{\beta - ik + \beta + ik}{\beta^2 + k^2} = 2\sqrt{\beta} \frac{1}{\beta^2 + k^2}$$

quindi $\langle \psi_k | x | \psi \rangle = i \frac{\partial}{\partial k} I_k = -4i \frac{\beta^{3/2} k}{(\beta^2 + k^2)^2}$ e di conseguenza

$$\gamma = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_k - E_0 - \hbar\omega) \frac{F_0^2}{4} 16 \frac{\beta^3 k^2}{(\beta^2 + k^2)^4} \frac{dk}{2\pi} = \frac{4F_0^2 \beta^3}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(E_k - E_0 - \hbar\omega) \frac{k^2}{(\beta^2 + k^2)^4} dk =$$

$$= \frac{8F_0^2 \beta^3}{\hbar} \int_0^{\infty} \delta(E_k - E_0 - \hbar\omega) \frac{k^2}{(\beta^2 + k^2)^4} dk \quad \text{risolve la porta di } E_k \text{ nell'integrale}$$

Usiamo ora $\delta(f(k)) = \sum_{k_i} \frac{\delta(k - k_i)}{|f'(k_i)|}$ con $f(k) = E_k - E_0 - \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \beta^2}{2m} - \hbar\omega$

$\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} = \hbar\omega - \frac{\hbar^2 \beta^2}{2m}$ energia di ionizzazione $\left. \frac{\partial f}{\partial k} \right|_{k_0} = \frac{\hbar^2}{m} k_0$ quindi

$$\gamma = \frac{8F_0^2 \beta^3}{\hbar} \frac{k_0^2}{(\beta^2 + k_0^2)^4} \frac{m}{k_0 \hbar^2} \quad \left(\text{dimensionalmente } \underbrace{\frac{1}{\hbar} \left(\frac{F_0}{\beta} \right)^2}_{E^2} \underbrace{\frac{m}{\hbar^2 \beta^2}}_{1/E} \underbrace{\frac{k_0/\beta}{(1 + k_0^2/\beta^2)^4}}_{\sim 1} \sim \frac{E}{\hbar} \sim \frac{1}{t} \right)$$

$$= \frac{8F_0^2 \beta^3}{\hbar} \frac{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(\hbar\omega - \frac{\hbar^2 \beta^2}{2m} \right)}}{\left(\frac{2m\omega}{\hbar} \right)^4} \cdot \frac{m}{\hbar}$$

Decadimenti β e ionizzazione

Consideriamo un generico decadimento β : $(Z, A) \rightarrow (Z+1, A) + e^- + \bar{\nu}_e$ e studiamo la possibilità che un elettrone di un guscio interno possa venire eccitato. Per grande Z è possibile approssimare le funzioni d'onda dei gusci interni con funzioni idrogenoidi.

- 1) Supponiamo sia presente un singolo elettrone atomico, trascurando l'interazione con l'elettrone emesso nel decadimento e trascurando l'impulso trasferito all'atomo. Quale è la probabilità che un elettrone $1s$ resti nel suo livello? Si stimi l'ordine di grandezza per grande Z .

Usando unità atomiche ($m=\hbar=e=1$) si ha $a_B = \frac{\hbar^2}{m e^2} \rightarrow a = \frac{1}{Z}$ (poiché $e^2 \rightarrow e^2 Z$) quindi

$$\psi_{1s}(r) = \frac{Z^{3/2}}{\sqrt{\pi}} e^{-Zr} \quad \text{da cui}$$

$$\begin{aligned} \langle \psi_{1s}^{(Z)} | \psi_{1s}^{(Z+1)} \rangle &= \int \frac{Z^{3/2}}{\pi} e^{-Zr} e^{-(Z+1)r} r^2 dr d\Omega = 4 Z^{3/2} (Z+1)^{3/2} \int_0^\infty e^{-r(2Z+1)} r^2 dr \stackrel{x=(2Z+1)r}{=} \\ &= \frac{4 Z^{3/2} (Z+1)^{3/2}}{(2Z+1)^3} \underbrace{\int_0^\infty x^2 e^{-x} dx}_{2!} = \frac{8 Z^{3/2} (Z+1)^{3/2}}{(2Z+1)^3} = \frac{8 Z^3 (1+1/2)^{3/2}}{8 Z^3 (1+1/2Z)^{3/2}} = \frac{1 + \frac{3}{8} \frac{1}{Z} + \frac{3}{8} \frac{1}{Z^2} + \dots}{1 + 3 \frac{1}{2Z} + 3 \left(\frac{1}{2Z}\right)^2 + \dots} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \left(1 + \frac{3}{8} \frac{1}{Z} + \frac{3}{8} \frac{1}{Z^2} + \dots\right) \left(1 - \frac{3}{2Z} - \frac{3}{4Z^2} + \frac{9}{4Z^2} + \dots\right) = \left(1 + \frac{3}{2Z} + \frac{3}{8Z^2} + \dots\right) \left(1 - \frac{3}{2Z} + \frac{3}{8Z^2} + \dots\right) \simeq \\ &\stackrel{\frac{1}{1-x} = 1+x+x^2+\dots}{\simeq} 1 + \frac{1}{Z} \left(\frac{3}{8} - \frac{3}{2}\right) + \frac{1}{Z^2} \left(\frac{3}{8} + \frac{3}{8} - \frac{9}{4}\right) = 1 - \frac{3}{8} \frac{1}{Z^2} \end{aligned}$$

quindi $P_{1s \rightarrow 1s} = |\langle \psi_{1s}^{(Z)} | \psi_{1s}^{(Z+1)} \rangle|^2 \simeq 1 - \frac{3}{4} \frac{1}{Z^2}$ per $Z \gg 1$.

- 2) Calcolare in modo esatto e perturbativo la probabilità di transizione $1s \rightarrow 2s$.

$$\psi_{2s}^{(Z)} = \frac{Z^{3/2}}{\sqrt{8\pi}} e^{-Zr/2} \left(1 - \frac{Zr}{2}\right) \quad \text{quindi il calcolo esatto è}$$

$$\begin{aligned} \langle \psi_{1s}^{(Z)} | \psi_{2s}^{(Z+1)} \rangle &= \int \frac{Z^{3/2}}{\sqrt{\pi}} e^{-Zr} \frac{(Z+1)^{3/2}}{\sqrt{8\pi}} e^{-(Z+1)r/2} \left(1 - \frac{(Z+1)r}{2}\right) r^2 dr d\Omega = \\ &= Z^{3/2} (Z+1)^{3/2} \frac{4\pi}{\pi 2\sqrt{2}} \int_0^\infty e^{-r(2Z+\frac{1}{2})} \left(1 - \frac{Z+1}{2} r\right) r^2 dr \stackrel{\frac{3Z+1}{2}r = x}{=} \\ &= \frac{2}{\sqrt{2}} Z^{3/2} (Z+1)^{3/2} \frac{2^3}{(3Z+1)^3} \int_0^\infty e^{-x} \left(1 - \frac{Z+1}{3Z+1} x\right) x^2 dx = \frac{2^4}{\sqrt{2}} \frac{Z^{3/2} (Z+1)^{3/2}}{(3Z+1)^3} \left(2! - \frac{Z+1}{3Z+1} 3!\right) \\ &= - \frac{2^6}{\sqrt{2}} \frac{Z^{3/2} (Z+1)^{3/2}}{(3Z+1)^4} \end{aligned}$$

$$\text{Quindi } P_{1s \rightarrow 2s} = |\langle \psi_{1s}^{(Z)} | \psi_{2s}^{(Z+1)} \rangle|^2 = \frac{2^{11} Z^3 (Z+1)^3}{(3Z+1)^8} \simeq \frac{2^{11}}{3^8} \frac{1}{Z^2} \quad \text{per } Z \gg 1$$

NOTA: $\frac{2^{11}}{3^8} \simeq 0.31 < \frac{3}{4} = 0.75$, quindi il risultato è consistente con la probabilità di rimanere nello stato $1s$ trovata al punto 1.

Passiamo ora al calcolo perturbativo, con $H_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r}$ e la perturbazione $V = -\frac{e^2}{r}$.

3_m approssimazione impulsiva da $|\psi_k^{(1)}\rangle = |\psi_k\rangle + \sum_i' |\psi_i\rangle \frac{\langle \psi_i | V | \psi_k \rangle}{E_k^{(0)} - E_i^{(0)}}$ si trova $P_{i \rightarrow f} = \frac{|V_{fi}|^2}{(\hbar \omega_{fi})^2}$

e per la transizione $1s \rightarrow 2s$: $\hbar \omega_{fi} = E_2 - E_1 = -\frac{Z^2}{2 \cdot 2^2} - \left(-\frac{Z^2}{2 \cdot 1^2}\right) = Z^2 \left(-\frac{1}{8} + \frac{1}{2}\right) = \frac{3}{8} Z^2$.

$$\int \psi_{2s} \frac{1}{r} \psi_{1s} r^2 dr d\Omega = \frac{4\pi}{\sqrt{\pi} \sqrt{8\pi}} Z^3 \int_0^\infty e^{-Zr} \frac{1}{r} e^{-Zr/2} \left(1 - \frac{Zr}{2}\right) r^2 dr = \sqrt{2} Z^3 \int_0^\infty e^{-\frac{3}{2}Zr} \left(1 - \frac{Zr}{2}\right) r dr =$$

$$= \sqrt{2} Z^3 \frac{1}{\left(\frac{3}{2}Z\right)^2} \int_0^\infty e^{-x} \left(1 - \frac{1}{3}x\right) x dx = \sqrt{2} Z \frac{4}{9Z^2} \underbrace{\left(1! - \frac{1}{3}2!\right)}_{1/3} = \frac{2^2 \sqrt{2}}{3^3} Z$$

da cui $P_{1s \rightarrow 2s} \simeq \frac{2^5 Z^2}{3^6} \frac{1}{\frac{3^2 Z^4}{2^6}} = \frac{2^{11}}{3^8 Z^2}$ in accordo con il limite $Z \gg 1$ del calcolo esatto.

3) Stimare la probabilità di ionizzazione del livello $1s$ approssimando gli stati del continuo con onde piane.

3_m questo caso usiamo nuovamente l'approssimazione impulsiva abbiamo (usando l'onda piana $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_0}$)

$$dP(\vec{k}) = \frac{|V_{fi}|^2}{(\hbar \omega_{fi})^2} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \quad \text{con} \quad \hbar \omega_{fi} = \frac{k^2}{2} - \left(-\frac{Z^2}{2}\right) = \frac{1}{2}(k^2 + Z^2)$$

$$V_{fi} = \int \frac{Z^{3/2}}{\sqrt{\pi}} e^{-Zr} \frac{1}{r} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} d^3 r \stackrel{\vec{k} \parallel \hat{z}}{=} \frac{Z^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dr \frac{r^2}{r} e^{-Zr} 2\pi \int_{-1}^1 e^{-ikr \cos \theta} d \cos \theta$$

$$\int_{-1}^1 e^{-ikr x} dx = \frac{e^{-ikr x}}{-ikr} \Big|_{-1}^1 = \frac{e^{-ikr} - e^{ikr}}{-ikr} = \frac{e^{ikr} - e^{-ikr}}{ikr}$$

$$V_{fi} = \frac{2\sqrt{\pi} Z^{3/2}}{ik} \int_0^\infty (e^{ikr} - e^{-ikr}) e^{-Zr} dr = \frac{2\sqrt{\pi} Z^{3/2}}{ik} \left(\int_0^\infty e^{-(Z-ik)r} dr - \int_0^\infty e^{-(Z+ik)r} dr \right) =$$

$$= \frac{2\sqrt{\pi} Z^{3/2}}{ik} \left(\frac{1}{Z-ik} - \frac{1}{Z+ik} \right) = \frac{2\sqrt{\pi} Z^{3/2}}{ik} \frac{Z+ik - Z+ik}{Z^2+k^2} = 4\sqrt{\pi} \frac{Z^{3/2}}{Z^2+k^2}$$

$$P = \int |V_{fi}|^2 \frac{1}{(\hbar \omega_{fi})^2} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} = \int \frac{2^4 \pi Z^3}{(Z^2+k^2)^2} \frac{Z^2}{(k^2+Z^2)^2} \frac{k^2 dk}{(2\pi)^3} d\Omega = \frac{2^5}{\pi} Z^3 \int_0^\infty \frac{k^2}{(k^2+Z^2)^4} dk =$$

$$= \frac{2^4}{\pi} Z^3 \int_{-\infty}^\infty \frac{k^2}{(k^2+Z^2)^4} dk = \frac{2^4}{\pi} Z^3 \cdot 2\pi i \operatorname{Res}_{iZ} \left(\frac{k^2}{(k^2+Z^2)^4} \right)$$

$$\frac{k^2}{(k^2+Z^2)^4} = \frac{k^2}{(k+iZ)^4 (k-iZ)^4} \quad \text{usiamo } k = iZ + x \quad \text{e sviluppiamo per } x \text{ piccolo}$$

$$\simeq \frac{(iZ+x)^2}{(2iZ+x)^4 x^4} = -\frac{Z^2}{16Z^4 x^4} \frac{\left(1 + \frac{x}{iZ}\right)^2}{\left(1 + \frac{x}{2iZ}\right)^4} \simeq -\frac{1}{16Z^2 x^4} \left(1 - \frac{1}{2}\left(\frac{x}{iZ}\right)^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{x}{iZ}\right)^3 + \dots\right)$$

dove si è usato $\frac{(1+t)^2}{(1+t/2)^4} \simeq 1 - \frac{1}{2}t^2 + \frac{1}{2}t^3 + \dots$. Quindi $\operatorname{Res}_{iZ} \left(\frac{k^2}{(k^2+Z^2)^4} \right) = -\frac{1}{16Z^2} \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{1}{iZ}\right)^3 = \frac{1}{i2^5 Z^5}$

e di conseguenza la prob. di ionizzazione è $P = \frac{2^4 Z^3}{\pi} \cdot 2\pi i \frac{1}{i2^5 Z^5} = \frac{1}{Z^2} > \frac{3}{4Z^2}$ trovato al punto 1

per la prob. di non rimanere in $1s$. Questo è dovuto all'uso delle onde piane come autof. del continuo.

Regola di selezione $0 \rightarrow 0$

$A \rightarrow B + \gamma$ non può mai avvenire se A e B hanno spin (momento nel c.m.) nullo.

Nel c.m. A è ferma e $B + \gamma$ si muovono back-to-back lungo una direzione che identifichiamo con l'asse $\hat{z}$ della quantizzazione dei momenti. Consideriamo ora $\hat{z} \cdot \vec{S}_{\text{tot}}$, che si annulla in quanto $S_A = 0$.

Per i momenti orbitali si ha $\hat{z} \cdot \vec{L} \propto \vec{p} \cdot \vec{L}$ che si annulla in quanto $\vec{p} \perp \vec{L}$, quindi rimangono solo gli spin e si ha $\hat{z} \cdot \vec{S}_B + \hat{z} \cdot \vec{S}_\gamma = 0$ ma $S_B = 0$ e $\hat{z} \cdot \vec{S}_\gamma$ non può essere nullo in quanto per un fotone lo spin è sempre parallelo/antiparallelo a $\vec{p}$ (elicità ± 1)

Reminder su momenti angolari orbitali e di spin: consideriamo rotazioni attive allora

1) caso scalare $R: \vec{x} \rightarrow \vec{x} + \delta\vec{\phi} \times \vec{x}$ rotazione attiva di angolo $\delta\phi$ e

$$\psi_R(\vec{x}) = \psi(R^{-1}\vec{x}) \simeq \psi(\vec{x} - \delta\vec{\phi} \times \vec{x}) \simeq \psi(\vec{x}) - (\delta\vec{\phi} \times \vec{x}) \cdot \nabla \psi(\vec{x}) = \psi(\vec{x}) - \delta\vec{\phi} \cdot (\vec{x} \times \nabla) \psi(\vec{x}) =$$

$$= \psi(\vec{x}) - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \cdot (\vec{x} \times \vec{p}) \psi(\vec{x})$$

$$\psi_R(\vec{x}) = U \psi(\vec{x}) \quad \text{con} \quad U = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \cdot \vec{J}\right) \quad \text{quindi} \quad \vec{J} = \vec{x} \times \vec{p} = \vec{L}$$

2) caso vettoriale (spin 1)

$$\vec{A}_R(\vec{x}) = R \vec{A}(R^{-1}\vec{x}) \simeq (1 + \delta\vec{\phi} \times) \vec{A}(\vec{x} - \delta\vec{\phi} \times \vec{x}) \simeq \vec{A}(\vec{x} - \delta\vec{\phi} \times \vec{x}) + \delta\vec{\phi} \times \vec{A}(\vec{x}) \simeq$$

$$\simeq \vec{A}(\vec{x}) - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \cdot (\vec{x} \times \vec{p}) \vec{A}(\vec{x}) + \delta\vec{\phi} \times \vec{A}(\vec{x}) \quad \text{quindi}$$

$$[\vec{A}_R(\vec{x})]_a \simeq A_a(\vec{x}) - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \cdot (\vec{x} \times \vec{p}) A_a + \epsilon_{abc} \delta\phi_b A_c \equiv \left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \cdot \vec{J}_b\right) \right]_{ac} A_c$$

$$\text{quindi } (J^b)_{ac} = (\vec{x} \times \vec{p})_b \delta_{ac} + i\hbar \epsilon_{abc} = (\vec{x} \times \vec{p})_b \delta_{ac} - i\hbar \epsilon_{bac}$$

$\uparrow$ momento orbitale $\uparrow$ spin

$$(L_b x_c = -i\hbar (\epsilon_{bjk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k})) x_c = -i\hbar \epsilon_{bjc} x_j \quad \text{e quindi per spin 1 si ha } \langle a | L_b | c \rangle = -i\hbar \epsilon_{bac}$$

Elicità per particelle di spin 1: $\vec{p} \cdot \vec{J} = \vec{p} \cdot \vec{S} = i\hbar p_b \epsilon_{abc}$ Supponiamo $\vec{p} \parallel \hat{z}$ e definiamo

$$\vec{E}^{(\pm)} = \mp i \frac{\hat{x} \pm i\hat{y}}{\sqrt{2}} \quad (\text{il uso abbastanza comune moltiplicare per "i" così che } \vec{E}^{(\pm)*} = \vec{E}^{(\mp)})$$

$$(\hat{z} \cdot \vec{J}) \vec{E}^{(+)} = i\hbar \hat{z}_b \epsilon_{abc} E_c^{(+)} = i\hbar \hat{z} \times \vec{E}^{(+)} = i\hbar \hat{z} \times \left(-i \frac{\hat{x} + i\hat{y}}{\sqrt{2}}\right) = \hbar \frac{\hat{y} - i\hat{x}}{\sqrt{2}} = -i\hbar \frac{\hat{x} + i\hat{y}}{\sqrt{2}} = \hbar \vec{E}^{(+)}$$

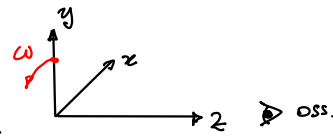
quindi $\vec{E}^{(+)}$ ha elicità $+1$; in modo identico si vede che $(\hat{z} \cdot \vec{J}) \vec{E}^{(-)} = -\hbar \vec{E}^{(-)}$ e quindi

$\vec{E}^{(-)}$ ha elicità -1 e ovviamente $(\hat{z} \cdot \vec{J}) \hat{z} = 0$ quindi $\vec{E}^{(0)} = \hat{z}$ ha elicità nulla.

$\vec{E}^{(\pm)}$ corrispondono alle polarizzazioni circolari (attenzione a usare destrorse/sinistrorse perché esistono convenzioni diverse, che usano emettitore o ricevitore)

$$\text{Re}(\vec{E}^{(+)} e^{i(kz - \omega t)}) = \text{Re}\left(-i\hat{x} e^{i(kz - \omega t)} + \hat{y} e^{i(kz - \omega t)}\right) = \begin{pmatrix} \sin(kz - \omega t) \\ \cos(kz - \omega t) \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{emett.}$$

destrorsa per emettitore, sinistrorsa per osservatore.



$$\begin{cases} \psi_0^{(1)} = \psi_z \\ \psi_{\pm}^{(1)} = \mp \frac{\psi_x \pm i\psi_y}{\sqrt{2}} \end{cases} \quad \text{consistente con } Y_{\pm 1}^1 \quad \text{quindi} \quad \vec{E}^{(\pm)} \cdot \vec{d} = \mp \frac{i}{\sqrt{2}} (d_x \pm i d_y) = i d_{\pm 1}^{(1)} \quad \text{e} \quad \vec{E}^{(0)} \cdot \vec{d} = d_0^{(1)}$$

Transizioni tra stati Zeeman

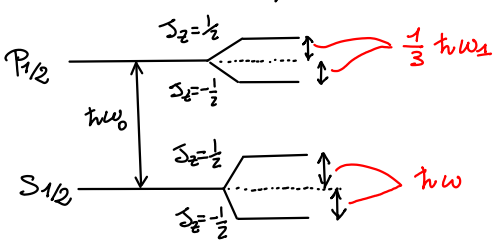
Consideriamo l'effetto di un campo magnetico esterno sulle transizioni tra fondamentale e prime eccitate del sodio ($Z=11$). Lo stato fondamentale è $3^2S_{1/2}$ (reminder $2S+1 L_J$) e il primo eccitato $3p$ è in realtà $3^2P_{1/2}$ a causa dell'interazione fine, con $3^2P_{3/2}$ seconda eccitata. Chiamiamo $\hbar\omega_0 = E(P_{1/2}) - E(S_{1/2})$ e supponiamo sia presente un campo magnetico diretto lungo $\hat{z}$.

1) Livelli Zeeman

$\Delta H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$, $\vec{\mu} = -\mu_B (\vec{L} + g\vec{S})$, $g \approx 2$ e $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$ magnetone di Bohr, $\vec{B} \parallel \hat{z}$.
 $\vec{L} + g\vec{S} = \vec{S} + (g-1)\vec{S}$ e per campo magnetico debole usiamo th pert. degenere sugli stati fini a S fissi. Poiché la deg è in S_z e $[\Delta H, S_z] = 0$ in realtà th pert. deg = th pert non deg. Sugli stati a S fissati possiamo usare Wigner-Eckart e $\vec{S} \sim c_S \vec{S}$ da cui $c_S \sim \frac{\vec{S} \cdot \vec{S}}{S(S+1)}$ e usando $\vec{L} = \vec{S} - \vec{S}$ si ha $\vec{S} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2}(\vec{S}^2 + \vec{S}^2 - \vec{L}^2)$ quindi $c_S = \frac{1}{2} \frac{S(S+1) + S(S+1) - L(L+1)}{S(S+1)}$ e dunque $\vec{S} + (g-1)\vec{S} \rightarrow (1+(g-1)c_S)\vec{S} = A_{SL} \vec{S}$ con A_{SL} = fattore di Lande.

Usando $g=2$ otteniamo $A_{SL} = \begin{cases} S_{1/2} & 1 + \frac{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1) + \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)}{2 \cdot \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)} = 2 \\ P_{1/2} & 1 + \frac{2 \cdot \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1) - 1 \cdot 2}{2 \cdot \frac{1}{2} \cdot (\frac{1}{2}+1)} = 1 + \frac{\frac{3}{2} - 2}{3/2} = 1 - \frac{1}{3} = \frac{2}{3} \end{cases}$

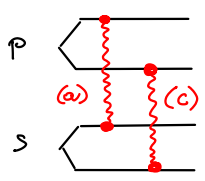
Quindi $\Delta E = A_{SL} \mu_B B S_z$ con $S_z = \pm 1/2$ in entrambi i casi. Chiamando $\hbar\omega_1 = \mu_B B$ abbiamo



2) Supponiamo ora che sul sistema incida luce che propaga lungo $\hat{y}$ e polarizzata lungo $\hat{z}$. Quanto righe di assorbimento si vedono e a che frequenze? (in approx di dipolo)

La ampiezza è $\propto \vec{E}^* \cdot \vec{d} = d_z = d_0^{(1)}$ (NOTA: la diraz. di propagaz. della luce non è la diraz. di quantizzazione dei momenti)

quindi per W.E. non si possono avere cambiamenti di S_z e le transiz. possibili sono

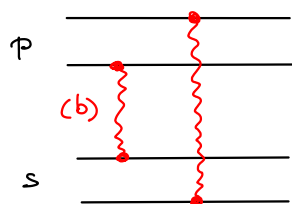


a) $\frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{2}$; $\hbar\omega_a = (E(P_{1/2}) + \frac{1}{3}\hbar\omega_1) - (E(S_{1/2}) + \hbar\omega_1) = \hbar\omega_0 - \frac{2}{3}\hbar\omega_1$
 c) $-\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}$; $\hbar\omega_c = (E(P_{1/2}) - \frac{1}{3}\hbar\omega_1) - (E(S_{1/2}) - \hbar\omega_1) = \hbar\omega_0 + \frac{2}{3}\hbar\omega_1$

c) stessa cosa per luce polarizzata lungo x

$$\vec{E} \cdot \vec{d} = d_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (d_{-1}^{(1)} - d_{+1}^{(1)}) \quad \left(\text{ricordando } d_{\pm 1}^{(1)} = \mp \frac{d_x \pm i d_y}{\sqrt{2}} \right)$$

quindi per W.E. ci possono essere transizioni con $\Delta S_z = \pm 1$.



NOTA: non ci possono essere transizioni all'interno delle stesse multiplette Zeeman a causa della regola di selezione sulla parità in appross. di dipolo.

$$\hbar\omega_b = (E(P_{1/2}) - \frac{1}{3}\hbar\omega_1) - (E(S_{1/2}) + \hbar\omega_1) = \hbar\omega_0 - \frac{4}{3}\hbar\omega_1$$

$$\hbar\omega_d = (E(P_{1/2}) + \frac{1}{3}\hbar\omega_1) - (E(S_{1/2}) - \hbar\omega_1) = \hbar\omega_0 + \frac{4}{3}\hbar\omega_1$$

c) Calcolare i rapporti tra le intensità delle righe.

Tutti stati non degeneri, quindi "rapporti intensità" = "rapporti $|\text{ampiezza}|^2$ "

Servono gli elementi di matrice di d_z (casi "a" e "c") e $d_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (d_{-1}^{(1)} - d_{+1}^{(1)})$ (casi "b" e "d")

tra gli stati: $|\psi = \frac{1}{2}, S_z = \pm \frac{1}{2}\rangle_P$ e $|\psi = \frac{1}{2}, S_z = \pm \frac{1}{2}\rangle_S$.

quindi abbiamo $\alpha = \langle \frac{1}{2} | d | \frac{1}{2} \rangle_S$

$$a) \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | d_z | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle_S = \alpha \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | 1, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}} \alpha$$

$$c) \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | d_z | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle_S = \alpha \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | 1, 0; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \alpha$$

$$b) \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | \frac{d_{-1}^{(1)}}{\sqrt{2}} | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle_S = \frac{1}{\sqrt{2}} \alpha \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | 1, -1; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}} \alpha$$

$$d) \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | -\frac{d_{+1}^{(1)}}{\sqrt{2}} | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle_S = -\frac{1}{\sqrt{2}} \alpha \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | 1, +1; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}} \alpha$$

$1 \times 1/2$		$3/2$			
	$+3/2$	1	$3/2$	$1/2$	
$+1$	$+1/2$		$+1/2$	$+1/2$	
	$+1 - 1/2$	$1/3$	$2/3$	$3/2$	$1/2$
	$0 + 1/2$	$2/3$	$-1/3$	$-1/2$	$-1/2$
		$0 - 1/2$	$2/3$	$1/3$	$3/2$
		$-1 + 1/2$	$1/3$	$-2/3$	$-3/2$
			$-1 - 1/2$		1

Di conseguenza tutti i moduli quadrati delle ampiezze sono uguali e le righe hanno tutte la stessa intensità.

Vita media oscillatore 1d

Consideriamo un oscillatore unidimensionale (diretto lungo $\hat{z}$) di pulsazione ω_0 , massa m e carica "e".

• Calcolare la vita media dello stato "n" per transizioni di dipolo elettrico, usando la appross.

$$a = \langle f, \vec{k}, \lambda | \vec{d} \cdot \vec{E} | i, 0 \rangle \simeq \langle \vec{k}, \lambda | \vec{E} | 0 \rangle \cdot \langle f | \vec{d} | i \rangle = -i\sqrt{2\pi\hbar\omega} \vec{E}^{(\lambda)*}(\vec{k}) \cdot \langle f | \vec{d} | i \rangle$$

↑ stato oscillatore ↑ impulso e polarizz. del fotone finale ↑ no fotoni ↑ stato oscill.

dove si è trascurato un esponenziale complesso irrilevante ai fini di $|a|^2$.

L'espressione precedente segue da $\vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$ per un onda e.m. e

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \int c \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega}} \sum_{\lambda=1,2} \left(\vec{E}^{(\lambda)}(\vec{k}) a_{\lambda}(\vec{k}) e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x})} + \vec{E}^{(\lambda)*}(\vec{k}) a_{\lambda}^{\dagger}(\vec{k}) e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x})} \right) \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}$$

con $[a_{\lambda}(\vec{k}), a_{\lambda'}^{\dagger}(\vec{k}')] = \delta_{\lambda\lambda'} (2\pi)^3 \delta(\vec{k} - \vec{k}')$, da cui la normalizz. $\langle \vec{k}, \lambda | \vec{k}', \lambda' \rangle = \delta_{\lambda\lambda'} (2\pi)^3 \delta(\vec{k} - \vec{k}')$.

Poiché l'oscillatore è diretto lungo $\hat{z}$ c'è solo $d_z = ez = \frac{e\ell}{\sqrt{2}} (a + a^{\dagger})$ con $\ell^2 = \frac{\hbar}{m\omega_0}$, quindi al primo ordine in appross. di dipolo $|m\rangle$ può decadere solo in $|m-1\rangle$ (c'è elemento di matrice non nullo anche con $|m+1\rangle$ ma la δ di conservat. energia annulla il rate per $m, 0 \rightarrow m+1, \pm 1$)

$$\langle f | d_z | i \rangle = \frac{e\ell}{\sqrt{2}} \langle m-1 | a | m \rangle = \frac{e\ell}{\sqrt{2}} \sqrt{m} \equiv d_0 \sqrt{m} \quad \text{con} \quad d_0 = \frac{e\ell}{\sqrt{2}} \quad \text{quindi}$$

$a = -iE_z^{(\lambda)*}(\vec{k}) d_0 \sqrt{m} \sqrt{2\pi\hbar\omega}$ e il rate differenziale di decadimento si scrive

$$d\gamma = \frac{2\pi}{\hbar} |a|^2 \delta\left(\hbar\omega_0(m+\frac{1}{2}) - [\hbar\omega_0(m-1+\frac{1}{2}) + \hbar\omega]\right) \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} = \frac{2\pi}{\hbar} |a|^2 \frac{\omega^2 d\omega}{c^3 (2\pi)^3} \frac{\delta(\omega_0 - \omega)}{\hbar} d\Omega$$

$$= \delta(\hbar\omega_0 - \hbar\omega) = \frac{1}{\hbar} \delta(\omega_0 - \omega)$$

Integrare in ω equivale a sostituire $\omega \rightarrow \omega_0$ e si ottiene

$$d\gamma = \frac{2\pi}{\hbar} 2\pi\hbar\omega_0 |\vec{E}_z^{(\lambda)}(\vec{k})|^2 d_0^2 m \frac{\omega_0^2}{c^3 (2\pi)^3 \hbar} d\Omega = \frac{\omega_0^3 d_0^2}{2\pi \hbar c^3} |\vec{E}_z^{(\lambda)}(\vec{k})|^2 m d\Omega.$$

Usiamo il fatto che i vettori di polarizzazione formano una base ortonormale nel piano $\perp \vec{k}$,

quindi $\sum_{\lambda} \vec{E}_z^{(\lambda)}(\vec{k}) \vec{E}_j^{(\lambda)*}(\vec{k}) = \text{proiettore su piano } \perp \vec{k} = \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2}$, da cui si ottiene

$$\sum_{\lambda} |\vec{E}_z^{(\lambda)}(\vec{k})|^2 = 1 - k_z^2/k^2 = 1 - \cos^2\theta \quad \text{con } \theta = \text{angolo tra } \hat{z} \text{ e la direzione di emissione del fotone.}$$

Il rate di decadimento differenziale, sommato sulle polarizzazioni finali è quindi

$$d\gamma = \frac{\omega_0^3 d_0^2 m}{c^3 \hbar 2\pi} (1 - \cos^2\theta) d\Omega \quad \text{e come al solito} \quad \int (1 - \cos^2\theta) d\Omega = 2\pi \int_{-1}^1 (1 - \cos^2\theta) d\cos\theta = 2\pi(2 - \frac{2}{3}) = \frac{8}{3}\pi$$

quindi il rate di decadimento è $\gamma = \frac{4}{3} \frac{\omega_0^3}{\hbar c^3} d_0^2 m$.

$$[\gamma] = \frac{1}{\hbar} \frac{1}{L^3} e^2 L^2 = \frac{E}{\hbar} = \frac{1}{\tau}$$

-) Mostrare che per grandi valori di n la legge di decadimento dell'energia si riduce a quella classica.

$$\frac{dE}{dt} = -\hbar\omega_0 \gamma = -\hbar\omega_0 n \underbrace{\frac{4}{3} \frac{\omega_0^3}{\hbar c^3}}_{\frac{e^2}{2 m \omega_0}} \underbrace{\frac{e^2}{2}}_{\substack{\simeq E_{sc} \\ n \text{ grande}}} = -\underbrace{n \hbar \omega_0}_{\simeq E_{sc} \text{ n grande}} \left[\frac{2}{3} \frac{e^2}{m c^3} \omega_0^2 \right]$$

Classicamente la potenza irradiata è data dalla formula di Larmor: $P = \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \ddot{z}^2$ quindi (indicando con una barra le medie su un'orbita)

$$\frac{d}{dt} \bar{E} = -\bar{P} = -\frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \overline{\ddot{z}^2} ; \quad z = A \cos(\omega_0 t + \text{const}) \quad \text{quindi} \quad \overline{\ddot{z}^2} = \frac{1}{2} A^2 \omega_0^4$$

$$\text{inoltre} \quad \bar{E} = \bar{T} + \bar{U} = 2\bar{T} = 2 \underbrace{\frac{1}{2}}_{\text{th. del viriale}} m \frac{\omega_0^2 A^2}{2} = \frac{1}{2} m \omega_0^2 A^2 \Rightarrow \overline{\ddot{z}^2} = \frac{1}{m} \bar{E} \omega_0^2$$

da cui $\frac{d}{dt} \bar{E} = - \left(\frac{2}{3} \frac{e^2}{m c^3} \omega_0^2 \right) \bar{E}$ come si era trovato prima.

Distribuzione angolare nei decadimenti $p \rightarrow s$

Consideriamo un decadimento $p \rightarrow s$ con lo stato p che può essere polarizzato con $L_z = +1, -1, 0$

$$d\gamma = C |\vec{E}^{(\lambda)*}(\vec{k}) \cdot \langle f | \vec{d} | i \rangle|^2 d\Omega$$

(eventualmente sommando su λ se non si osserva la polarizzazione)

1) Cosa ci si aspetta per la distribuzione angolare in φ (angolo azimutale)?

Lo stato iniziale è autostato di L_z quindi a meno di una fase è invariante per rotazioni attorno a $\hat{z}$, quindi ci aspettiamo una distribuzione indipendente da φ . Più formalmente, se indichiamo con R una rotazione attorno a $\hat{z}$ di angolo α , allora $\vec{E}^* \cdot \vec{d} = (R \vec{E}^*) \cdot (R \vec{d})$ inoltre $R \vec{d} = U^\dagger \vec{d} U$ con $U = \exp(-i\alpha J_z/\hbar)$ in quanto $\vec{d}$ è un operatore vettoriale, quindi $\langle f | R \vec{d} | i \rangle = \langle f | U^\dagger \vec{d} U | i \rangle = e^{-im_i \alpha + im_f \alpha} \langle f | \vec{d} | i \rangle$ quindi il $|\cdot|^2$ che entra in $d\gamma$ non cambia (ovviamente quando si ruota il sistema va ruotata anche la polarizz. del fotone).

2) Si scriva la distribuzione angolare di emissione dei fotoni (sommando sulle polarizzazioni)

per i diversi casi iniziali, cioè $L_z = +1, 0, -1$.

$$\text{Usando } d_{\pm} = \mp \frac{d_x \pm i d_y}{\sqrt{2}} \text{ e il fatto che a causa di W.E. abbiamo } \begin{cases} d_x = \frac{d_- - d_+}{\sqrt{2}} \\ d_y = -\frac{d_- + d_+}{i\sqrt{2}} \end{cases}$$

$\langle 1, 1 | d_+ | 0 \rangle = \langle 1, -1 | d_- | 0 \rangle = \langle 1, 0 | d_z | 0 \rangle = D$ gli elementi di matrice non nulli per le transiz. $p \rightarrow s$ nei diversi casi sono (indichiamo per semplicità $\langle f | d_j | i \rangle$ con d_j)

$$L_z = 1 \rightarrow 0 \quad d_x = -\frac{D}{\sqrt{2}} \quad ; \quad d_y = i \frac{D}{\sqrt{2}}$$

$$L_z = 0 \rightarrow 0 \quad d_z = D$$

$$L_z = -1 \rightarrow 0 \quad d_x = \frac{D}{\sqrt{2}} \quad ; \quad d_y = i \frac{D}{\sqrt{2}}$$

$$\text{e abbiamo quindi } d\gamma = C \sum_{\lambda} \underbrace{E_i^{(\lambda)*}(\vec{k}) E_j^{(\lambda)}(\vec{k})}_{= \delta_{ij} - \hat{n}_i \hat{n}_j} \langle f | d_i | i \rangle \langle f | d_j | i \rangle^* = C (|\vec{d}|^2 - |\vec{d} \cdot \hat{n}|^2)$$

3) In coordinate polari $\hat{n} = (\sin\theta \cos\varphi, \sin\theta \sin\varphi, \cos\theta)$ si ha

$$\vec{d} \cdot \hat{n} = d_z \cos\theta + d_x \sin\theta \cos\varphi + d_y \sin\theta \sin\varphi \text{ da cui}$$

$$L_z = 1 \rightarrow 0 \quad |\vec{d}|^2 = \frac{D^2}{2} + \frac{D^2}{2} = D^2 \quad ; \quad \vec{d} \cdot \hat{n} = -\frac{D}{\sqrt{2}} (\sin\theta \cos\varphi - i \sin\theta \sin\varphi) = -\frac{D}{\sqrt{2}} \sin\theta e^{-i\varphi}$$

$$L_z = 0 \rightarrow 0 \quad |\vec{d}|^2 = D^2 \quad ; \quad \vec{d} \cdot \hat{n} = D \cos\theta$$

$$L_z = -1 \rightarrow 0 \quad |\vec{d}|^2 = \frac{D^2}{2} + \frac{D^2}{2} = D^2 \quad ; \quad \vec{d} \cdot \hat{n} = \frac{D}{\sqrt{2}} (\sin\theta \cos\varphi + i \sin\theta \sin\varphi) = \frac{D}{\sqrt{2}} \sin\theta e^{i\varphi}$$

$$\text{quindi } |\vec{d}|^2 - |\vec{d} \cdot \hat{n}|^2 \begin{cases} \xrightarrow{1 \rightarrow 0} D^2 (1 - \frac{1}{2} \sin^2\theta) = \frac{D^2}{2} (1 + \cos^2\theta) \\ \xrightarrow{0 \rightarrow 0} D^2 (1 - \cos^2\theta) = D^2 \sin^2\theta \\ \xrightarrow{-1 \rightarrow 0} D^2 (1 - \frac{1}{2} \sin^2\theta) = \frac{D^2}{2} (1 + \cos^2\theta) \end{cases}$$

si passa da una all'altra
con $\theta \leftrightarrow \pi - \theta$
ma $\cos^2\theta = \cos^2(\pi - \theta)$

3) Calcolare la probabilità di decadimento per unità di tempo nei diversi casi

$$2\pi \int_{-1}^1 \frac{1}{2} (1 + \cos^2 \theta) d\cos \theta = \pi \left(2 + \frac{2}{3}\right) = \frac{8}{3}\pi \quad ; \quad 2\pi \int_{-1}^1 \sin^2 \theta d\cos \theta = 2\pi \int_{-1}^1 (1 - \cos^2 \theta) d\cos \theta = 2\pi \left(2 - \frac{2}{3}\right) = \frac{8}{3}\pi$$

quindi $\gamma = \frac{8}{3}\pi C D^2$ in tutti i casi. C'è invarianza per rotazioni e il risultato non può dipendere dalla polarizzazione iniziale: indichiamo con H_I la hamiltoniana di interazione e con $|S\rangle$ lo stato iniziale $|i\rangle|0_{\text{fotoni}}\rangle$ e con $|F\rangle$ lo stato finale $|f\rangle|\vec{k}, \lambda\rangle$. Dal fatto che H_I è uno scalare da W.E. segue che i suoi elementi di matrice non dipendono da S_z , quindi:

$$\langle F, S_z | H_I | S, S_z \rangle = \langle F, S_z | H_I | S, S_z \rangle.$$

Poiché $\gamma = \sum_F |\langle F | H_I | S \rangle|^2$ si vede che γ non dipende dallo stato di polarizzazione di $|S\rangle$.

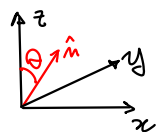
4) Calcoliamo la distribuzione angolare nel caso si misuri la polarizzazione circolare del fotone

$$Q_+ = \langle f | \vec{E}^{(+)}(\hat{n}) \cdot \vec{d} | i \rangle = \langle f | \vec{E}^{(-)}(\hat{n}) \cdot \vec{d} | i \rangle$$

$$Q_- = \langle f | \vec{E}^{(-)*}(\hat{n}) \cdot \vec{d} | i \rangle = \langle f | \vec{E}^{(+)}(\hat{n}) \cdot \vec{d} | i \rangle$$

$$d\gamma_+ = C |Q_+|^2 d\Omega \quad ; \quad d\gamma_- = C |Q_-|^2 d\Omega \quad ; \quad d\gamma = d\gamma_+ + d\gamma_-$$

Abbiamo visto che c'è invarianza per rotaz. in φ quindi possiamo supporre $\hat{n}$ nel piano $\hat{x}\hat{z}$



e $\hat{n}$ si ottiene da $\hat{z}$ ruotandolo di θ attorno a $\hat{y}$

Usiamo la base sferica $\vec{e}_{\pm} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (\vec{e}_x \pm i \vec{e}_y)$, $\vec{e}_z$ e ruotandolo otteniamo $\vec{E}$ in genere.

Abbiamo quindi $\vec{E}^{(\lambda)}(\hat{n}) = \sum_m \vec{e}_m R_{m\lambda}$ con $R_{m\lambda}$ = matrice di rotazione di spin 1

$$R = \begin{bmatrix} \frac{1}{2}(1 + \cos \theta) & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta & \frac{1}{2}(1 - \cos \theta) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta & \cos \theta & -\frac{\sin \theta}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2}(1 - \cos \theta) & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta & \frac{1}{2}(1 + \cos \theta) \end{bmatrix} \begin{matrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{matrix}$$

$$\vec{E}^{(-)}(\hat{n}) \cdot \vec{d} = \left\{ \frac{1}{2}(1 - \cos \theta) \vec{e}_+ - \frac{\sin \theta}{\sqrt{2}} \vec{e}_z + \frac{1}{2}(1 + \cos \theta) \vec{e}_- \right\} \cdot \vec{d} = \left\{ \frac{1}{2}(1 - \cos \theta) d_+ - \frac{\sin \theta}{\sqrt{2}} d_z + \frac{1}{2}(1 + \cos \theta) d_- \right\}$$

terza col.

$$\vec{E}^{(+)}(\hat{n}) \cdot \vec{d} = \left\{ \frac{1}{2}(1 + \cos \theta) d_+ + \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta d_z + \frac{1}{2}(1 - \cos \theta) d_- \right\}$$

Consideriamo ad esempio $L_z = 1 \rightarrow 0$: contribuisce solo d_- , quindi in questo caso

$$d\gamma_+ = C D^2 \frac{1}{4} (1 + \cos \theta)^2 \quad \leftarrow \text{si annulla per } \theta = \pi \text{ perché altrimenti sarebbe incompatibile con cons. momento angolare}$$

$$d\gamma_- = C D^2 \frac{1}{4} (1 - \cos \theta)^2 \quad \leftarrow \text{omologo per } \theta = 0$$

$$d\gamma = d\gamma_+ + d\gamma_- = C D^2 \frac{1}{2} (1 + \cos^2 \theta) \text{ come trovato prima.}$$

Scattering

Formule utili

Per $x \rightarrow \infty$ abbiamo $\psi(\vec{r}) \simeq e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}$ per uno scattering elastico e la sezione d'urto differenziale è $\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2$.

In approssimazione di Born si ha $f(\hat{n}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int V(\vec{r}) e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}} d^3r$ dove $\vec{k}' = \hat{n}k$ e l'espressione per la sez. d'urto si può anche ottenere da teoria delle pert. ol'p. del Tempus:

$$d\sigma = \frac{1}{v} \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_f - E_i) |\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle|^2 \frac{d^3k'}{(2\pi)^3}$$

$\uparrow$ fissa norm. $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$
 onda inc. poiché così
 si ha $\vec{j} = \vec{v}$

$\uparrow$ fissa normalizz. $e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}}$ per onda uscente
 poiché con questa norm $\langle \vec{k}' | \vec{k}'' \rangle = (2\pi)^3 \delta(\vec{k}' - \vec{k}'')$

Usando $E = \frac{p^2}{2m}$ si ha $\delta(E_f - E_i) = \frac{\delta(p' - p)}{|dE/dp|} = \frac{m}{p'} \delta(p' - p) = \frac{1}{v} \delta(p' - p)$ quindi

$$\frac{1}{v} \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_f - E_i) \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} = \frac{1}{v^2} \frac{2\pi}{\hbar} \delta(p' - p) \frac{p'^2 dp' d\Omega}{(2\pi\hbar)^3} \xrightarrow{\text{integr. } p'} \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \frac{p^2}{v^2} d\Omega = \frac{m^2}{(2\pi\hbar^2)^2} d\Omega$$

coerente con l'espressione precedente della ampiezza di scattering.

Validità della approssimazione di Born: V_0 = valore tipico del potenziale a = raggio di azione

1) per ogni energia $\frac{m|V_0|a^2}{\hbar^2} \ll 1$ assicura che $|f_{\text{scatt}}| \ll |f_{\text{inc}}|$ e quindi la validità della approx perturbativa

2) Se $V \in L^1(\mathbb{R}^3)$ (no Coulomb) la approx è sempre vera per k grande perché la ampiezza si annulla per $k \rightarrow \infty$ a causa del lemma di Riemann-Lebesgue. In questo caso il range di validità è $\frac{m|V_0|a}{k\hbar^2} \ll 1$ (vedi Landau 3 § 45).

Scattering su buca sferica

Consideriamo $V(\vec{r}) = \begin{cases} -V_0 & \text{se } r < a \\ 0 & \text{altrimenti;} \end{cases}$ e definiamo l'impulso trasferito $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$

Per ogni compo. centrale si ha $f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} V(r) d^3r$, $d^3r = r^2 dr d\varphi d\cos\theta$ e

usando $\hat{z}$ lungo $\vec{q}$ si ha

$$\int_{-1}^1 e^{-iqr \cos\theta} d\cos\theta = \frac{e^{-iqr} - e^{+iqr}}{-iqr} \Big|_{x=-1}^{x=+1} = \frac{e^{-iqr} - e^{+iqr}}{-iqr} = 2 \frac{\sin(qr)}{qr}$$

e la ampiezza di scattering si scrive quindi $f = -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^\infty V(r) r \sin(qr) dr$.

Per la buca sferica

$$\int_0^a r \sin(qr) dr = \left(r \frac{-\cos(qr)}{q} \right) \Big|_0^a - \int_0^a \frac{-\cos(qr)}{q} dr = -\frac{a}{q} \cos(aq) + \frac{1}{q^2} \sin(aq)$$

e quindi

$$f = \frac{2mV_0}{\hbar^2 q} \frac{\sin(qa) - qa \cos(qa)}{q^2} = 2a \left(\frac{ma^2 V_0}{\hbar^2} \right) \frac{\sin(qa) - qa \cos(qa)}{(qa)^3}$$

adimensionali

$$d\sigma = |f|^2 d\Omega$$



quindi $q = 2k \sin(\theta/2)$ con θ angolo di scattering, inoltre

k è costante, quindi $dq = k \cos(\theta/2) d\theta$ e

$$q dq = 2k^2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} d\theta = k^2 \sin \theta d\theta \quad \text{cioè} \quad \sin \theta d\theta = \frac{q dq}{k^2} \quad \text{e per problemi con}$$

simmetria assiale si ha $d\Omega \rightarrow 2\pi \sin \theta d\theta = 2\pi \frac{q dq}{k^2}$ con $q \in [0, 2k]$.

Quindi

$$d\sigma = |f|^2 d\Omega = 8\pi a^2 \left(\frac{ma^2 V_0}{\hbar^2} \right)^2 \left(\frac{\sin(qa) - qa \cos(qa)}{(qa)^3} \right)^2 \frac{q dq}{k^2} \quad \text{e integrando su } q \text{ tra } 0 \text{ e } k \text{ si trova}$$

$$\sigma = \frac{2\pi}{k^2} \left(\frac{ma^2 V_0}{\hbar^2} \right)^2 \left(1 - \frac{1}{(2ak)^2} + \frac{\sin(4ak)}{(2ak)^3} - \frac{\sin^2(2ak)}{(2ak)^4} \right)$$

Per $ak \ll 1$ il termine tra parentesi tende a $\frac{8}{9} k^2 a^2$ mentre per $ak \gg 1$ tende a 1 quindi

$$\sigma \begin{cases} \frac{2\pi}{k^2} \left(\frac{ma^2 V_0}{\hbar^2} \right)^2 & ak \gg 1 \\ \frac{16}{9} \pi a^2 \left(\frac{ma^2 V_0}{\hbar^2} \right)^2 & ak \ll 1 \end{cases}$$

Per $ak \ll 1$ è più facile e istruttivo passare dallo sviluppo di f :

$$\text{per } |x| \ll 1 \quad \sin(x) - x \cos(x) \simeq x - \frac{1}{6}x^3 - (1 - \frac{1}{2}x^2)x = \frac{1}{3}x^3 \quad \text{quindi}$$

per $ak \ll 1$ si ha $f \simeq 2a \left(\frac{ma^2 V_0}{\hbar^2} \right) \frac{1}{3}$. Non c'è dipendenza da q e quindi da θ e lo scattering è isotropo, quindi si ha

$$\sigma \simeq 4\pi |f|^2 \quad \text{e si riottiene il risultato di prima.}$$

Scattering Yukawa e Coulomb

Consideriamo il potenziale centrale $V(r) = \alpha \frac{e^{-\mu r}}{r}$, che è stato un primo modello di interazione nucleare con $\mu \simeq \left(\frac{\hbar c}{m_{\pi} c^2} \right)^{-1}$.

Usiamo l'espressione generale della ampiezza per pot. centrali $f = -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^{\infty} V(r) r \sin(qr) dr$:

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} V(r) r \sin(qr) dr &= \alpha \int_0^{\infty} \frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{2i} e^{-\mu r} dr = \frac{\alpha}{2i} \left(\frac{e^{(iq-\mu)r}}{iq-\mu} \Big|_0^{\infty} + \frac{e^{-(iq+\mu)r}}{iq+\mu} \Big|_0^{\infty} \right) = \\ &= -\frac{\alpha}{2i} \left(\frac{1}{iq-\mu} + \frac{1}{iq+\mu} \right) = \frac{\alpha}{2i} \frac{iq+\mu + iq-\mu}{q^2 + \mu^2} = \frac{\alpha q}{q^2 + \mu^2} \end{aligned}$$

$$\text{quindi} \quad f = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \frac{1}{q^2 + \mu^2}$$

Poiché $q = 2k \sin \theta/2$ se $k \ll \mu$ allora $q \ll \mu$ e f è a simmetria sferica, quindi per $k \ll \mu$ si ha $\sigma \simeq 4\pi |f|^2 = 16\pi \left(\frac{m\alpha}{\hbar^2 \mu^2} \right)^2$ ($\left[\frac{m\alpha}{\hbar^2 \mu^2} \right] = \frac{m \cdot E \cdot L}{E^2 T^2 \frac{1}{L^2}} = \frac{m L^3}{E T^2} = \frac{m L^3}{\frac{m L^2}{T^2} T^2} = L$ ok)

Per calcolare σ con k generico usiamo $d\Omega = 2\pi \frac{q dq}{k^2}$ con $q \in [0, 2k]$

$$\begin{aligned} \text{quindi } \sigma &= 8\pi \frac{4m^2 \alpha^2}{k^2 \hbar^4} \int_0^{2k} \frac{1}{(q^2 + \mu^2)^2} q dq = \frac{8\pi m^2 \alpha^2}{k^2 \hbar^4} \left. \frac{-1/2}{(q^2 + \mu^2)} \right|_0^{2k} = \frac{4\pi m^2 \alpha^2}{k^2 \hbar^4} \left(\frac{1}{\mu^2} - \frac{1}{\mu^2 + 4k^2} \right) = \\ &= \frac{4\pi m^2 \alpha^2}{k^2 \hbar^4} \frac{\mu^2 + 4k^2 - \mu^2}{\mu^2 (\mu^2 + 4k^2)} = \frac{16\pi m^2 \alpha^2}{\hbar^4} \frac{1}{\mu^2 (\mu^2 + 4k^2)} \quad \text{che per } k \rightarrow 0 \text{ riproduce il} \\ &\quad \text{risultato precedente.} \end{aligned}$$

Nel limite $\mu \rightarrow 0$ si ottiene Coulomb

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 = \frac{4m^2 \alpha^2}{\hbar^4} \frac{1}{q^4} = \frac{4m^2 \alpha^2}{\hbar^4} \frac{1}{(2k \sin \theta/2)^4} = \frac{m^2 \alpha^2}{4\hbar^4 k^4} \frac{1}{\sin^4 \theta/2} \overset{E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}{=} \frac{\alpha^2}{16 E^2} \frac{1}{\sin^4 \theta/2}$$

che coincide con la sezione d'urto classica ed è la sezione d'urto esatta in

meccanica quantistica (vedi London 3, § 135). La sezione d'urto totale diverge finché il potenziale va a zero troppo lentamente all'infinito, infatti la divergenza è dovuta alla componente $\theta \simeq 0$ dell'integrale ($\sim \int_0^{\theta_0} \frac{1}{\theta^4} \theta d\theta$). NOTA: in mecc. classica tutti i potenziali non a supporto compatto hanno sezione d'urto infinita, in meccanica quantistica no, ma V deve annullarsi più velocemente di $\frac{1}{x^2}$.

NOTA il pot. a lungo raggio fa capire sì che per bassa energia lo scattering non sia isotropo.

Scattering elastico su idrogeno

Consideriamo lo scattering di un μ su un atomo di idrogeno.

modellizzazione semplificata) $V(\vec{r}) = -\frac{e^2}{r} + e^2 \int \rho(\vec{r}') \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r'$ con $\rho(\vec{r}') =$ densità di probabilità di trovare l'elettrone in $\vec{r}' = |\psi(\vec{r}')|^2$

$$\text{quindi } f = -\frac{m}{2\pi \hbar^2} F[V](\vec{q}) \quad \text{con } \vec{q} = \vec{k}' - \vec{k} \quad \text{e} \quad F[V](\vec{q}) = \int V(\vec{r}) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} d^3 r$$

trattazione esatta) $\psi_i(\vec{r}, \vec{r}') = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \psi(\vec{r}')$ $\vec{r} =$ posiz. muone, $\vec{r}' =$ posizione elettrone

$\psi_f(\vec{r}, \vec{r}') = e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}} \psi(\vec{r}')$ NOTA: ψ non cambia finché stiamo considerando il caso di scattering elastico

$$V(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{e^2}{r} - \frac{e^2}{r'} + \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

$$\begin{aligned} \langle f | V | i \rangle &= \int e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} \frac{e^2}{r} |\psi(\vec{r}')|^2 d^3 r d^3 r' + \int d^3 r e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} e^2 \int \frac{|\psi(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r' - \int e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} d^3 r \int |\psi(\vec{r}')|^2 \frac{e^2}{r'} d^3 r' = \\ &= \int d^3 r e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} \left(-\frac{e^2}{r} + e^2 \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r' \right) \quad \text{come nel caso 1} \end{aligned}$$

$$F\left[\frac{1}{x}\right](\vec{q}) = \frac{4\pi}{q^2} \quad (\text{segue da } \nabla^2 \frac{1}{x} = -4\pi \delta(\vec{x}) \text{ o da Yukawa con } \mu \rightarrow 0)$$

$$\text{inoltre } F[g_1 * g_2](\vec{q}) = \tilde{g}_1(q) \tilde{g}_2(q), \quad \text{quindi } F[V](\vec{q}) = -\frac{4\pi e^2}{q^2} + \frac{4\pi e^2}{q^2} \tilde{\rho}(\vec{q}).$$

$$\text{Di conseguenza } f = -\frac{m}{8\pi \hbar^2} F[V](\vec{q}) = \frac{2me^2}{\hbar^2 q^2} (1 - \tilde{\rho}(\vec{q})) = \frac{2}{a q^2} (1 - \tilde{\rho}(\vec{q})) \quad \text{con } a = \frac{\hbar^2}{m e^2}$$

che se fosse $m=m_e$ sarebbe il raggio di Bohr.

$$\text{Per idrogeno nel fondamento } \psi = \frac{1}{\sqrt{\pi} a_B^3} e^{-r/a_B} \quad \text{con } a_B = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \quad \text{quindi } \rho = \frac{1}{\pi a_B^3} e^{-2r/a_B}.$$

Calcoliamo la trasformata di $e^{-\mu x}$ poi sostituiamo $\mu = r/a_B$

$$\int e^{-\mu x - i\vec{q} \cdot \vec{x}} x^2 dx d\Omega = \int e^{-\mu x - i q x \cos\theta} 2\pi x^2 dx d\cos\theta = 2\pi \int_0^\infty dx e^{-\mu x} x^2 \int_{-1}^1 e^{-i q x \cos\theta} d\cos\theta =$$

$$= \frac{2\pi}{i q} \int_0^\infty e^{-\mu x} x (e^{i q x} - e^{-i q x}) dx$$

$$\int_0^\infty e^{(-\mu + i q)x} x dx = \frac{e^{(-\mu + i q)x}}{-\mu + i q} x \Big|_0^\infty - \int_0^\infty \frac{e^{(-\mu + i q)x}}{(-\mu + i q)} dx = \frac{1}{(-\mu + i q)^2}$$

$$\text{quindi } \int e^{-\mu x - i\vec{q} \cdot \vec{x}} d^3x = \frac{2\pi}{i q} \left[\frac{1}{(-\mu + i q)^2} - \frac{1}{(-\mu - i q)^2} \right] = \frac{2\pi}{i q} \frac{4i\mu q}{(\mu^2 + q^2)^2} = \frac{8\pi\mu}{(\mu^2 + q^2)^2}$$

$$\text{quindi } \tilde{\rho}(\vec{q}) = \frac{1}{\pi a_B^3} \frac{8\pi \frac{r}{a_B}}{(q^2 + \frac{4}{a_B^2})^2} = \frac{16}{(a_B^2 q^2 + 4)^2}.$$

$$\text{Di conseguenza } f = \frac{2}{a q^2} \left(1 - \frac{16}{(a_B^2 q^2 + 4)^2} \right) = 2 \frac{a_B^2}{a} \frac{a_B^2 q^2 + 8}{(q^2 a_B^2 + 4)^2} \quad \text{di conseguenza in } \frac{d\sigma}{d\Omega} \text{ si}$$

distingue un andamento $\sim \frac{1}{q^4}$ Coulomb-like per $a_B q \gg 1$ mentre per $a_B q \ll 1$ tende ad un valore finito e non si hanno divergenze IR.

Per calcolare σ usiamo $d\Omega = 2\pi \frac{q dq}{k^2}$ e approssimiamo $q_{\max} = 2k \simeq \infty$, cosa sensata se

$a_B k \gg 1$ poiché $f \sim \frac{1}{q^4}$ per q grande

$$\sigma \simeq 4 \frac{a_B^4}{a^2} \int_0^\infty \frac{(a_B^2 q^2 + 8)^2}{(a_B^2 q^2 + 4)^4} \frac{2\pi}{k^2} q dq = \frac{4\pi}{k^2} \frac{a_B^2}{a^2} \int_0^\infty \frac{(x+8)^2}{(x+4)^4} dx$$

$$a_B^2 q^2 = x$$

$$\text{inoltre } \int_0^\infty \frac{(x+8)^2}{(x+4)^4} dx = \int_0^\infty \frac{((x+4)+4)^2}{(x+4)^4} dx = \int_0^\infty \left[\frac{1}{(x+4)^2} + \frac{8}{(x+4)^3} + \frac{16}{(x+4)^4} \right] dx = \frac{1}{4} + 8 \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{4^2} + 16 \cdot \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{4^3} = \frac{7}{12}$$

$$\text{quindi } \sigma \simeq \frac{7}{3} \frac{\pi}{k^2} \frac{a_B^2}{a^2}$$

Cosa sarebbe cambiato se la particella incidente fosse stata un elettrone? Post. identiche

$$\psi_i = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \psi(\vec{x}') + e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}'} \psi(\vec{x}) \right) \Big|_{1,0}^{1,0}$$

$$\psi_f = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{i\vec{k}' \cdot \vec{x}} \psi(\vec{x}') + e^{i\vec{k}' \cdot \vec{x}'} \psi(\vec{x}) \right) \Big|_{1,0}^{1,0}$$

+ nei singoletti e - nei tripletti.

L'intensità non dipende dallo stato di spin quindi lo spin entra in modo banale

$$\begin{aligned}
\langle f | V | i \rangle &= \frac{1}{2} \int e^{-i\vec{q} \cdot \vec{x}} |\psi(\vec{x}')|^2 V(\vec{x}, \vec{x}') d^3x d^3x' \pm \frac{1}{2} \int e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{x}' + i\vec{k} \cdot \vec{x}} \psi(\vec{x}) \psi(\vec{x}') V(\vec{x}, \vec{x}') d^3x d^3x' \\
&\quad \pm \frac{1}{2} \int e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{x} + i\vec{k} \cdot \vec{x}'} \psi(\vec{x}) \psi(\vec{x}') V(\vec{x}, \vec{x}') d^3x d^3x' + \frac{1}{2} \int e^{-i\vec{q} \cdot \vec{x}} |\psi(\vec{x})|^2 V(\vec{x}, \vec{x}') d^3x d^3x' \\
V(\vec{x}, \vec{x}') &= V(\vec{x}', \vec{x}) \\
&\Rightarrow \underbrace{\int e^{-i\vec{q} \cdot \vec{x}} |\psi(\vec{x}')|^2 V(\vec{x}, \vec{x}') d^3x d^3x'}_{\text{quella di prima}} \pm \int e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{x}' + i\vec{k} \cdot \vec{x}} \psi(\vec{x}) \psi(\vec{x}') V(\vec{x}, \vec{x}') d^3x d^3x'
\end{aligned}$$

secondo termine $\pm \int e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{x}' + i\vec{k} \cdot \vec{x}} \psi(\vec{x}) \psi(\vec{x}') \left(-\frac{e^2}{x} - \frac{e^2}{x'} + \frac{e^2}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \right) d^3x d^3x'$ corrisponde

a processi di scambio (rientrano nei cosiddetti rearrangement in multichannel scattering) che danno effetti trascurabili quando $\arg k \gg 1$ e $q \ll k$.

Per capire cosa succede in un contesto semplice consideriamo lo scattering di due elettroni, che separando C.M. e moto relativo è equivalente allo scattering su potenziale di una particella.

Se per particelle non identiche $\psi \sim e^{ikz} + f(\hat{n}) \frac{e^{ikr}}{r}$, per particelle identiche si ha $\psi \sim e^{ikz} \pm e^{-ikz} + (f(\hat{n}) \pm f(-\hat{n})) \frac{e^{ikr}}{r}$ con + per il singoletto e - per il tripletto.

poiché lo scambio delle particelle è equivalente a $\vec{x} \rightarrow -\vec{x}$

(non dividiamo per $\frac{1}{\sqrt{2}}$ in modo da mantenere il flusso incidente uguale)

$$e \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\hat{n}) \pm f(-\hat{n})|^2.$$