

TORTUGA
Publisher

Esercizi svolti di Meccanica Quantistica

Esercitazioni per il corso di Istituzioni di Fisica Teorica B

Giugno 2001

Alberto Maggi

[219,915]

55 via Lopez, 57010 Guasticce (LI)

0586 984 980

Sommario

Prefazione	5
I L'equazione di Schrodinger unidimensionale	7
II Momento angolare e moto in campo centrale	35
III Spin. Particelle identiche	37
IV Transizioni elettromagnetiche e fisica atomica	55

Prefazione

Questo testo si affianca agli *Appunti di Istituzioni di Fisica Teorica* e raccoglie una serie di esercizi di Meccanica Quantistica inventati da me ed altri, la maggior parte, tratti dai problemi d'esame del corso del professor Menotti e da vari libri ed eserciziari indicati nella bibliografia (ma qui voglio menzionare in particolare il lavoro degli autori russi Galitski, Karnakov e Kogan) Gli esercizi sono divisi indicativamente per argomento, ma si suppone che il lettore abbia già studiato una buona parte di teoria, anche nei primi capitoli (tant'è che il capitolo dedicato all'equazione di Schrödinger unidimensionale include problemi risolubile mediante il metodo variazionale e il metodo di WKB).

All'interno di ciascun capitolo non vi è un ordine preciso nella presentazione degli esercizi, né dal punto di vista della difficoltà, né della materia.

Il materiale presentato è suddiviso nel modo seguente

- (i) equazione unidimensionale di Schrödinger;
- (ii) momento angolare;
- (iii) moto in campo centrale;
- (iv) spin, particelle identiche;
- (v) perturbazioni ai livelli energetici;
- (vi) perturbazioni dipendenti dal tempo e transizioni elettromagnetiche;
- (vii) altro...

Tutti gli esercizi sono risolti e non credo che agli studenti questo parrà un difetto. I docenti spesso invitano a non guardare le soluzioni e questo è, in linea di massima, giusto, ma credo anche che, **soprattutto all'inizio della preparazione**, guardare le soluzioni sia importante almeno quanto tentare di risolvere autonomamente il problema.

Un ringraziamento particolare va al mio professore e maestro Armando Bracci.

Guasticce, Marzo 2001

L'equazione di Schrodinger unidimensionale

In questo primo capitolo, presentiamo una rassegna di esercizi sulla equazione di Schrödinger in una dimensione. Come sempre nel seguito, si supporrà che il lettore abbia già una certa dimistichezza con tutto l'apparato teorico della meccanica quantistica (nessuna esperienza nel campo della soluzione dei problemi è richiesta!), tuttavia i requisiti per gli esercizi che seguono sono: i postulati, l'analisi qualitativa dei problemi unidimensionali, problemi unidimensionali tipici (buca rettangolare e oscillatore armonico), calcolo variazionale e approssimazione semiclassica. Gli esercizi non sono, comunque, ordinati per argomento. Nel pacchetto di esercizi presentati ve ne sono alcuni molto belli, ma, al contempo, molto impegnativi.

Esercizio I.1
(a cura di
Alberto Maggi)

Si consideri la seguente famiglia di stati (descritti in rappresentazione delle coordinate)

$$\psi_{\alpha, v, x_0}(q) = \exp\left(-\frac{(q-x_0)^2}{2\alpha}\right) \exp\left(i\frac{mvx}{\hbar}\right)$$

parametrizzata dai valori reali α, v_0, x_0 . Vogliamo studiare l'evoluzione temporale di questa famiglia per una hamiltoniana unidimensionale

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q)$$

- (i) Mostrare che al limite classico ($\hbar \rightarrow 0$) l'evoluto temorale all'istante t dello stato che a $t = 0$ è dato da $\psi_{\alpha, v_0, x_0}(q)$ è $\psi_{\alpha, v(t), x(t)}(q)$, dove la coppia $(mv(t), x(t))$ risolve le equazioni classiche di Hamilton

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = \frac{\partial H}{\partial p} \\ mv(t) = -\frac{\partial H}{\partial q} \end{cases}$$

al dato iniziale $(mv(0), x(0)) \doteq (mv_0, x_0)$.

- (ii) Discutere la validità dell'approssimazione

$$\exp\left(-i\frac{tH}{\hbar}\right) \psi_{\alpha, v_0, x_0}(q) \approx \psi_{\alpha, v(t), x(t)}(q).$$

- (iii) Dire in che senso il risultato trovato dimostra che al limite per $\hbar \rightarrow 0$, la meccanica quantistica si riduce alla meccanica classica.

Risoluzione

Verifichiamo che, al limite per $\hbar \rightarrow 0$, con le condizioni dette per le funzioni $v(t), x(t)$, la funzione d'onda $\psi_{\alpha, v(t), x_0(t)}(q)$ risolve l'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo. In questo modo avremo ottenuto la tesi, visto che

$$\psi_{\alpha, v(t), x(t)}(q) \Big|_{t=0} = \psi_{\alpha, v_0, x_0}(q).$$

Abbiamo

$$\begin{aligned}\frac{d}{dq}\psi_{\alpha,v(t),x(t)}(q) &= \left(i\frac{mv(t)}{\hbar} - \frac{q-x(t)}{\alpha}\right)\psi_{\alpha,v(t),x_0(t)}(q) \\ \frac{d^2}{dq^2}\psi_{\alpha,v(t),x(t)}(q) &= \left[\left(i\frac{mv(t)}{\hbar} - \frac{q-x(t)}{\alpha}\right)^2 - \frac{1}{\alpha}\right]\psi_{\alpha,v(t),x_0(t)}(q) \\ \frac{d}{dt}\psi_{\alpha,v(t),x(t)}(x) &= \left(\dot{x}(t)\frac{q-x(t)}{\alpha} + i\frac{m}{\hbar}\dot{v}(t)q\right)\psi_{\alpha,v(t),x_0(t)}(q)\end{aligned}$$

dunque,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(i\frac{mv(t)}{\hbar} - \frac{q-x(t)}{\alpha}\right)^2 - \frac{1}{\alpha}\right] + V(q) = i\hbar\left(\dot{x}(t)\frac{q-x(t)}{\alpha} + i\frac{m}{\hbar}\dot{v}(t)q\right)$$

sicché

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2m}\left[-\frac{m^2v^2}{\hbar^2} + \frac{(q-x)^2}{\alpha^2} - 2i\frac{q-x}{\alpha}\frac{mv}{\hbar} - \frac{1}{\alpha}\right] + V(q) &= i\hbar\dot{x}\frac{q-x}{\alpha} - m\dot{v}q \\ \frac{mv^2}{2} - \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{(q-x)^2}{\alpha^2} + \frac{1}{\alpha}\right) + i\hbar\frac{q-x}{\alpha}v + V(q) &= i\hbar\dot{x}\frac{q-x}{\alpha} - m\dot{v}q\end{aligned}$$

perciò, eguagliando i termini reali a quelli immaginari

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{(q-x)^2}{\alpha^2} + \frac{1}{\alpha}\right) + \frac{mv^2}{2} + V(q) + m\dot{v}q &= 0 \\ v(t) &= \dot{x}(t)\end{aligned}$$

Nella prima equazione trascuriamo il termine in \hbar^2 , sicché

$$\begin{aligned}\frac{mv^2}{2} + V(q) + m\dot{v}q &= 0 \\ v(t) &= \dot{x}(t)\end{aligned}$$

derivando rispetto a q la prima equazione troviamo

$$\begin{aligned}m\dot{v} &= -\frac{\partial V}{\partial q} = -\frac{\partial H}{\partial q} = p \\ \dot{x} &= v = \frac{p}{m} = \frac{\partial H}{\partial p}\end{aligned}$$

Abbiamo così dimostrato il punto (i).

Veniamo a (ii). L'approssimazione è buona qualora

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{(q-x)^2}{\alpha^2} + \frac{1}{\alpha}\right) \ll \frac{mv^2}{2}$$

Ora, $q-x$ è dell'ordine di $\sqrt{\alpha}$, nella nostra equazione visto che ψ è sostanzialmente diversa da 0 solo per $(q-x)^2 \sim \alpha$ essendo descritta da una gaussiana. Ne segue

$$\frac{\hbar^2}{m\alpha} \ll \frac{mv^2}{2}$$

cioè

$$\alpha \gg \left(\frac{m}{\hbar}\right)^2 \frac{v^2}{2}$$

Dunque, la larghezza del pacchetto ψ deve esser piccola perché lo si possa assimilare a una particella classica, ma, pure, deve essere sufficientemente grande per poter trascurare i termini in \hbar .

Veniamo al punto (iii). In meccanica classica, posizione ed impulso sono conosciuti in modo esatto simultaneamente, perciò, per discutere la situazione quantistica che più si avvicina a quella classica, è interessante andare a considerare stati di minima indeterminazione, tali cioè che $\Delta p \Delta q = \hbar/2$ come si fa in questo problema. Nelle condizioni determinate al punto (ii),

- si ha che la funzione d'onda è un pacchetto di larghezza fissata nel tempo il cui baricentro di muove secondo le leggi della fisica classica. In questo senso, la meccanica quantistica si riduce
- a quella classica.

Esercizio I.2
(a cura di
Alberto Maggi,
min-max principle)

Sia H la hamiltoniana per una particella di massa m soggetta al potenziale $V(x)$ limitato inferiormente e asintotizzante a 0 all'infinito. Assegnato l'intero $n \in \mathbb{N}$, $n \geq 1$ e scelti i vettori $\varphi_1, \dots, \varphi_{n-1} \in \mathcal{H}$, definiamo le quantità

$$U_H(\varphi_1, \dots, \varphi_{n-1}) \doteq \inf \left\{ (\psi, H\psi) \mid \psi \in \langle \varphi_1, \dots, \varphi_{n-1} \rangle^\perp, \|\psi\| = 1 \right\}$$

$$\mu_n(H) \doteq \sup_{\varphi_1, \dots, \varphi_{n-1}} U_H(\varphi_1, \dots, \varphi_{n-1})$$

Si mostri che

- (i) se $\mu_n(H) > 0$ allora H ha al più $n - 1$ stati legati.
- (ii) se $\mu_n(H) < 0$ allora H ha almeno n stati legati.

Ricavarne che se esiste ψ per cui $(\psi, H\psi) < 0$ allora H ammette almeno uno stato legato.

Risoluzione

Proviamo (i) ragionando per assurdo. Sia $\mu_n(H) > 0$ e inoltre H ammetta almeno n stati legati. Consideriamo gli autostati relativi ψ_1, \dots, ψ_n e sia $W \doteq \langle \psi_1, \dots, \psi_n \rangle$. Ogni $\psi \in W$ può essere scritto come combinazione degli autostati $\psi_i, i \in J_n$, per cui

$$(\psi, H\psi) = \sum_{i=1}^n E_i |(\psi_i, \psi)|^2 \leq 0$$

Ora, presa una qualsiasi $(n - 1)$ -upla di vettori $\varphi_1, \dots, \varphi_{n-1}$ si ha che $\langle \varphi_1, \dots, \varphi_{n-1} \rangle^\perp \cap W \neq \emptyset^1$. Prendiamo allora $\psi \in \langle \varphi_1, \dots, \varphi_{n-1} \rangle^\perp \cap W$, abbiamo

$$(\psi, H\psi) \leq 0$$

sicché

$$U_H(\varphi_1, \dots, \varphi_{n-1}) \leq 0$$

per ogni scelta di $\varphi_1, \dots, \varphi_{n-1}$. Ne viene

$$\mu_n(H) \leq 0$$

il che contraddice l'ipotesi di partenza.

Per provare (ii), ragioniamo allo stesso modo. Supponiamo, per assurdo, che $\mu_n(H) < 0$, ma che H ammetta al più $n - 1$ autostati legati. Prendiamo $n - 1$ vettori, $\varphi_1^0, \dots, \varphi_{n-1}^0$ (eventualmente nulli se H non ammette nemmeno uno stato legato) che siano combinazioni lineari degli autostati legati di H . Se $\psi \in \langle \varphi_1^0, \dots, \varphi_{n-1}^0 \rangle^\perp$, allora ψ è certamente ortogonale agli autostati legati di H , perciò, essendo combinazione di autostati impropri, $(\psi, H\psi) \geq 0$. Ne viene che

$$U_H(\varphi_1^0, \dots, \varphi_{n-1}^0) \geq 0$$

sicché

$$\mu_n(H) \geq 0$$

la qual cosa nega l'ipotesi di partenza.

Infine, se poniamo $n = 1$, abbiamo

$$\mu_1(H) = \inf_{\psi} (\psi, H\psi)$$

Se esiste ψ talché $(\psi, H\psi) < 0$, allora $\mu_1 < 0$ e con ciò H ammette almeno uno stato legato.

Risolto l'esercizio è lecito chiedersi quale idea sta alla base della costruzione delle quantità μ_n . Come abbiamo visto μ_n serve per decidere sull'esistenza dell' n -esimo stato legato. Il problema si risolverebbe dimostrando che l'inf dei valori medi nell'ortogonale ai primi $n - 1$ autostati è minore di zero, se si conoscesse l'espressione esplicita di tali autostati. Ma dal momento

¹ Sia V la varietà generata dai vettori $\varphi_i, i \in J_{n-1}$. W si decompone nella somma diretta di $V \cap W$ e $V^\perp \cap W$. $V \cap W$ non può avere dimensione maggiore di $n - 1$, perciò $\dim V^\perp \cap W \geq 1$, cioè $V^\perp \cap W \neq \emptyset$.

che essi non sono noti, il metodo basato sulla semplice ricerca di un minimo è inapplicabile. D'altra parte, a n fissato, possiamo determinare tutti i possibili inf al variare delle $n - 1$ -uple $\varphi_1, \dots, \varphi_{n-1}$. Se la $n - 1$ -upla non coincide con l'insieme dei primi $n - 1$ autostati, essi vanno a cadere nell'ortogonale della $n - 1$ -upla fissata e perciò contribuiscono a mantenere più basso possibile l'inf. Quando poi gli $n - 1$ vettori saranno nella $n - 1$ -upla l'inf sarà ragionevolmente il massimo.

Compreso questo ragionamento qualitativo si istituisce il μ_n di cui nel testo dell'esercizio e si dimostra che se $\mu_n < 0$ allora esistono n stati legati. C'è di più, con un minimo di teoria spettrale, si può dimostrare che μ_n è proprio l' n autovalore (contando la molteplicità che nel caso unidimensionale è comunque 1) della nostra hamiltoniana. ■

Esercizio I.3
(a cura di
Alberto Maggi,
*comparison
theorem*)

Siano dati due potenziali unidimensionali V_1 e V_2 tali che $V_1(x) \leq V_2(x)$ per ogni $x \in \mathbb{R}$. Si considerino le hamiltoniane H_1 e H_2 associate a V_1 e V_2 rispettivamente, per una particella di massa m . Tenendo conto dell'esercizio precedente, si mostri che il numero di stati legati (a energia strettamente negativa) ammessi da H_1 è maggiore o eguale al numero di stati legati (a energia strettamente negativa) ammessi da H_2 .

Risoluzione Sia n il numero di stati legati ammessi da H_2 . Vogliamo mostrare che H_1 ammette almeno n stati legati. Utilizzando il risultato dell'esercizio precedente, si tratta di far vedere che

$$\mu_n(H_1) < 0.$$

A questo scopo, mostriamo che

$$\mu_n(H_1) \leq \mu_n(H_2)$$

la qual cosa, in effetti, discende dal fatto che $H_1 \leq H_2$.

Fissiamo i vettori $\varphi_1, \dots, \varphi_{n-1}$, per ogni ψ normalizzato talché $\psi \in \langle \varphi_1, \dots, \varphi_{n-1} \rangle^\perp$ abbiamo

$$\langle \psi, H_1 \psi \rangle \leq \langle \psi, H_2 \psi \rangle$$

d'altra parte

$$U_{H_1}(\varphi_1, \dots, \varphi_{n-1}) \leq \langle \psi, H_1 \psi \rangle \leq \langle \psi, H_2 \psi \rangle$$

Passando all'inf nell'ultimo membro, essendo il primo un minorante,

$$U_{H_1}(\varphi_1, \dots, \varphi_{n-1}) \leq U_{H_2}(\varphi_1, \dots, \varphi_{n-1})$$

ma, ancora,

$$U_{H_1}(\varphi_1, \dots, \varphi_{n-1}) \leq U_{H_2}(\varphi_1, \dots, \varphi_{n-1}) \leq \mu_n(H_2)$$

e, passando al sup del primo membro, essendo l'ultimo un maggiorante,

$$\mu_n(H_1) \leq \mu_n(H_2)$$

Si tratta allora di mostrare che

$$\mu_n(H_2) < 0$$

per avere che anche H_1 ammette almeno n stati legati.

Denotiamo con ψ_1, \dots, ψ_n gli autostati legati di H_2 e sia $W \doteq \langle \psi_1, \dots, \psi_n \rangle$. Passiamo a considerare un set qualsiasi di $n - 1$ vettori, $\varphi_1, \dots, \varphi_{n-1}$. Abbiamo che $\langle \varphi_1, \dots, \varphi_{n-1} \rangle^\perp \cap W \neq \emptyset$, perciò, preso $\psi \in \langle \varphi_1, \dots, \varphi_{n-1} \rangle^\perp \cap W$, abbiamo, essendo $\psi \in W$,

$$\langle \psi, H_2 \psi \rangle < 0$$

e dunque

$$U_{H_2}(\varphi_1, \dots, \varphi_{n-1}) < 0$$

per ogni scelta di $\varphi_1, \dots, \varphi_{n-1}$. In definitiva,

$$\mu_n(H_2) < 0$$

e dunque

$$\mu_n(H_1) < 0$$

- da cui H_1 ammette almeno n stati legati.

Esercizio I.4 Vogliamo riderivare alcune conseguenze del principio del min-max, esercizio I.2, senza farne uso esplicito, perciò usando una via più artigianale, meno elegante, ma di certo più semplice. Si consideri, ancora una buca di potenziale $V(x)$ infinitesima all'infinito. Sia H la hamiltoniana per una particella di massa m soggetta a $V(x)$.

- Mostrare che se esiste uno stato sul quale il valor medio della hamiltoniana è negativo, allora H ammette almeno uno stato legato.
- Nell'ipotesi in cui H ammetta uno stato legato il cui vettore rappresentativo sia ψ , mostrare che H ammette anche un secondo stato legato se nello spazio $\{\psi\}^\perp$ esiste un vettore sul quale il valor medio di H è negativo. Generalizzare al caso di $n - 1$ stati legati, per l'esistenza dello stato legato n -esimo.

Si considerino ora le due buche $V_1(x) \leq V_2(x)$, ambedue infinitesime all'infinito.

- Dimostrare che se la hamiltoniana associata a V_2 ammette n stati legati alle energie $E_{2,i}$, $i \in J_n$, allora la hamiltoniana associata a V_1 ammette almeno n stati legati a energie $E_{1,i}$, $i \in J_n$, tali che

$$E_{1,i} \leq E_{2,i}, \quad i \in J_n.$$

Risoluzione La hamiltoniana H ammette spettro misto e, come noto, lo spazio degli stati (e quindi il dominio di H) si decompone in somma diretta di due sottospazi \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 , il primo generato dagli autovettori (se esistono) dello spettro discreto, ψ_k , il secondo dagli autovettori impropri, ψ_E , relativi allo spettro continuo (che è in $(0, +\infty)$). Ogni stato si scrive come

$$\psi = \sum_{i=1}^n c_i \psi_i + \int_0^{+\infty} dE c_1(E) \psi_{1,E} + \int_0^{+\infty} dE c_2(E) \psi_{2,E}$$

dove, correttamente, abbiamo imposto la degenerazione 2 agli autostati dello spettro continuo.

Vogliamo mostrare che se esiste ψ talché $(\psi, H\psi) < 0$, allora H ammette almeno uno stato legato, perciò $n \geq 1$. Per mostrarlo, ragioniamo per assurdo. Esista dunque ψ per cui $(\psi, H\psi) < 0$ e, inoltre, $n = 0$. Allora esistono le funzioni $L^2(0, +\infty)$ c_1 e c_2 tali che

$$\psi = \int_0^{+\infty} dE c_1(E) \psi_{1,E} + \int_0^{+\infty} dE c_2(E) \psi_{2,E}$$

perciò, data la relazione di ortogonalità

$$(\psi_{j',E'}, \psi_{j,E}) = \delta_{jj'} \delta(E - E')$$

si ha

$$0 > (\psi, H\psi) = \int_0^{+\infty} dE E \left(|c_1(E)|^2 + |c_2(E)|^2 \right),$$

ma il secondo membro è l'integrale di una quantità non negativa, il che è assurdo.

Se H ammette gli stati legati i cui relativi autostati (ortogonali) sono $\psi_1, \dots, \psi_{n-1}$, sappiamo che \mathcal{H} si decompone nella somma diretta dello spazio $\mathcal{H}_1 \doteq \langle \psi_1, \dots, \psi_{n-1} \rangle$, dello spazio \mathcal{H}_2 generato dagli eventuali altri autovettori e da \mathcal{H}_3 spazio generato dagli autovettori impropri. Cercare un minimo in \mathcal{H}_1^\perp , significa perciò cercare il minimo in $\mathcal{H}_2 \oplus \mathcal{H}_3$. La tesi si ottiene allora ripetendo alla lettera la dimostrazione (per assurdo) di cui al punto precedente per lo spazio $\mathcal{H}_2 \oplus \mathcal{H}_3$.

Ragioniamo per induzione su n , numero di stati legati ammessi da H_2 . Il passo $n = 1$ è molto semplice e si basa sul risultato di cui al primo punto: se $\psi_{2,1}$ è l'autostato relativo al

fondamentale di H_1 abbiamo

$$(\psi_{2,1}, H_1 \psi_{2,1}) \leq (\psi_{2,1}, H_2 \psi_{2,1}) = E_{2,1} < 0$$

Dunque, H_1 ammette uno stato legato. Se $E_{1,1}$ è l'autovalore di H_1 si ha

$$E_{1,1} \leq (\psi_{2,1}, H_1 \psi_{2,1}) = E_{2,1}.$$

Passo induttivo: valga la tesi per $n - 1$. Ora, H_2 ammetta n stati legati, perciò H_1 ammette, dall'induzione, almeno $n - 1$ stati legati. Siano gli autovettori di H_1 , $\psi_{1,1}, \dots, \psi_{1,n-1}$. Dobbiamo determinare un vettore nell'ortogonale allo spazio $W_1 \doteq \langle \psi_{1,1}, \dots, \psi_{1,n-1} \rangle$ tale che, su di esso, H_1 ammetta valor medio negativo. Consideriamo lo spazio $W_2 \doteq \langle \psi_{2,1}, \dots, \psi_{2,n} \rangle$, su di esso H_2 , e perciò H_1 , ammette valori medi negativi. Se mostriamo che $W_1^\perp \cap W_2 \neq \emptyset$, abbiamo concluso. Ora, lo spazio di Hilbert si decompone in somma diretta di W_1 e W_1^\perp , perciò anche W_2 si decompone in somma diretta di $W_1 \cap W_2$ e $W_1^\perp \cap W_2$. Ora, se $W_1^\perp \cap W_2$ fosse nullo, avrebbe dimensione 0, con ciò

$$\dim W_1 \cap W_2 = \dim W_2 = n$$

ma

$$\dim W_1 \cap W_2 \leq \dim W_1 = n - 1,$$

■ il che è assurdo.

Esercizio I.5 Si consideri un potenziale $V(x) \in L^1(\mathbb{R})$ avente le seguenti caratteristiche

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow \pm\infty} V(x) &= 0 \\ \int_{-\infty}^{+\infty} V(x) dx &< 0 \end{aligned}$$

Mostrare che l'hamiltoniana associata al potenziale $V(x)$ ammette almeno un stato legato.

Risoluzione Se $V(x)$ ha integrale negativo, deve esistere una regione dell'asse x nel quale V è negativo, perciò è plausibile l'esistenza di un autostato dell'hamiltoniana a energia negativa. Del resto, all'infinito il potenziale va a zero, perciò, siccome un bound state deve avere energia tale che le regioni all'infinito siano classicamente proibite, ricaviamo che, se un bound state esiste, esso ha energia negativa. Se poi l'energia è positiva lo stato non è legato, perciò si deve mostrare che esiste un autovalore negativo dell'energia. Grazie ai due esercizi precedenti, ci basta mostrare che esiste ψ talché $(\psi, H\psi) < 0$.

Prendiamo come funzione di prova la

$$\psi_a(x) = e^{-a|x|}$$

essa è L^2 , cioè è normalizzabile.

Andiamo a calcolare il valor medio di p^2 su ψ_a . A questo scopo occorre calcolare la derivata seconda di ψ_a . Siccome ψ_a è \mathcal{C} ma non \mathcal{C}^1 , abbiamo che comparirà una δ nella derivata seconda, infatti

$$\psi'_a(x) = \begin{cases} -ae^{-ax}, & x > 0 \\ ae^{ax}, & x < 0 \end{cases}$$

la discontinuità nell'origine vale $-2a$, perciò

$$\psi''_a(x) = a^2 e^{-a|x|} - 2a\delta(x).$$

Dunque

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m} (\psi_a, p^2 \psi_a) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} a^2 e^{-2a|x|} dx - 2a \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a|x|} \delta(x) dx \right] = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[2a^2 \int_0^{+\infty} e^{-2ax} dx - 2a \right] = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[-2a^2 \frac{e^{-2ax}}{2a} \Big|_0^{+\infty} - 2a \right] = \end{aligned}$$

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

Un altro modo, molto più semplice (ma forse non del tutto lecito) di determinare il valor medio dell'energia cinetica è il seguente, siccome $\psi_a \in D(p)$ (ha trasformata di Fourier data da una lorentziana)

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m}(\psi_a, p^2 \psi_a) &= \frac{1}{2m}(\psi_a, p^+ p \psi_a) = \frac{1}{2m}(p \psi_a, p \psi_a) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} a^2 e^{-2a|x|} dx = -\frac{\hbar^2 a^2}{2m} 2 \int_0^{+\infty} e^{-2ax} dx = \\ &= \frac{\hbar^2 a}{2m}. \end{aligned}$$

Calcoliamo adesso il valor medio del potenziale

$$(\psi_a, V \psi_a) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2a|x|} V(x) dx$$

Passiamo, per un attimo, al limite, se esiste,

$$\ell \doteq \lim_{a \rightarrow 0} (\psi_a, H \psi_a) = \lim_{a \rightarrow 0} (\psi_a, V \psi_a)$$

Abbiamo

$$\left| e^{-2a|x|} V(x) \right| \leq |V(x)| \in L^1, \forall a$$

e, per (quasi) ogni x , puntualmente

$$\lim_{a \rightarrow 0} e^{-2a|x|} V(x) = V(x)$$

Usando allora il teorema di Lebesgue

$$\ell = \lim_{a \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2a|x|} V(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} V(x) dx < 0$$

Siccome ℓ è negativo, per il teorema della permanenza del segno, esiste \bar{a} , talché

$$(\psi_{\bar{a}}, H \psi_{\bar{a}}) < 0$$

siccome $\psi_{\bar{a}} \in L^2$, abbiamo concluso.

Se vogliamo evitare il ricorso alla δ e dunque ogni possibile *domain problem*, possiamo utilizzare una famiglia più regolare di funzioni

$$\psi_a(x) = e^{-ax^2}$$

con $a > 0$. Si tratta dunque di considerare delle gaussiane che sono sì L^2 , ma anche \mathcal{S} : la complicazione che sorge in questo modo è, per fortuna (!), solo di natura algebrica.

Cominciamo con il calcolare

$$\psi'_a(x) = -2ax e^{-ax^2}$$

siccome ψ_a appartiene al dominio di autoaggiunzione di p , possiamo effettivamente calcolare il valor medio dell'energia cinetica usando

$$(\psi_a, p^2 \psi_a) = (p \psi_a, p \psi_a) = 4\hbar^2 a^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-2ax^2} dx = 4\hbar^2 a^2 \sqrt{\frac{\pi}{2a}} = 4\hbar^2 \sqrt{\frac{\pi}{2}} a^{3/2}$$

Per calcolare l'integrale ricordiamo che esso è la derivata seconda calcolata nell'origine e cambiata di segno della trasformata di Fourier della gaussiana

$$-\frac{d^2}{d\omega^2} \left(\sqrt{\frac{\pi}{2a}} e^{-\omega^2/8a} \right) \Big|_{\omega=0} = \sqrt{\frac{\pi}{2a}} \frac{1}{4a}$$

perciò

$$(\psi_a, p^2 \psi_a) = \hbar^2 a \sqrt{\frac{\pi}{2a}} = \hbar^2 \sqrt{\frac{\pi}{2}} a^{1/2} \rightarrow 0, a \rightarrow 0$$

Per quanto riguarda il valor medio dell'energia potenziale, si procede come prima

$$(\psi_a, V\psi_a) = \int_{-\infty}^{+\infty} V(x) e^{-2ax^2} dx$$

ancora, per ogni a

$$\left| V(x) e^{-2ax^2} \right| \leq |V(x)| \in L^1$$

e per ogni x

$$\lim_{a \rightarrow 0} V(x) e^{-2ax^2} = V(x)$$

Visto che l'energia cinetica media va a 0, per $a \rightarrow 0$, usando il teorema di Lebesgue

$$\lim_{a \rightarrow 0} (\psi_a, H\psi_a) < 0$$

sicch  esiste \bar{a} per cui

$$(\psi_{\bar{a}}, H\psi_{\bar{a}}) < 0$$

- ma $\psi_{\bar{a}}$   una gaussiana il che conclude definitivamente il problema.

Esercizio I.6 Determinare la funzione di Green $G_E(x, x')$ dell'equazione di Schr dinger per una particella avente $E < 0$, decrescente per $|x - x'| \rightarrow \infty$. Si ricorda che la funzione di Green   tale da soddisfare l'equazione

$$(H - E)G_E = \delta(x - x')$$

Mediante la funzione di Green, scrivere sotto forma di equazione integrale l'equazione di Schr dinger per gli autostati discreti a $E < 0$ di una particella soggetta al campo $V(x)$ tendente a 0 all'infinito.

Infine, determinare gli stati legati per il potenziale seguente

$$V(x) = -\alpha\delta(x)$$

dove $\alpha < 0$.

Risoluzione L'equazione che dobbiamo risolvere  

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 G_E}{\partial x^2} - EG_E = \delta(x - x')$$

chiamiamo $t \doteq x - x'$ e passiamo alla trasformata di Fourier

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 G_E}{\partial t^2} - EG_E &= \delta(t) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} (-ik)^2 \hat{G}_E(k) - E\hat{G}_E(k) &= 1 \end{aligned}$$

da cui

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + |E| \right) \hat{G}_E(k) = 1$$

dunque,

$$\hat{G}_E(k) = \frac{1}{\frac{\hbar^2}{2m} k^2 + |E|} = \frac{1}{|E|} \frac{|E|}{\frac{\hbar^2}{2m} \left(k^2 + \frac{2m}{\hbar^2} |E| \right)} = \frac{1}{|E|} \frac{a^2}{k^2 + a^2}$$

dove $a^2 = 2m|E|/\hbar^2$. Allora \hat{G}_E   una lorentziana, la cui antitrasformata  

$$\hat{G}_E(x, x') = \frac{a}{2|E|} e^{-a|x-x'|} = \frac{m}{a\hbar^2} e^{-a|x-x'|}$$

La soluzione generale dell'equazione

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + |E|\psi = f(x)$$

è quindi data dalla sovrapposizione delle soluzioni dell'omogenea con una soluzione particolare. Quest'ultima è data da

$$\int_{-\infty}^{+\infty} G_E(x, x') f(x') dx'$$

Mentre la soluzione generale dell'omogenea è

$$Ae^{-ax} + Be^{ax}$$

Ne segue che, dovendo porre

$$f(x) = -V(x)\psi(x)$$

si ha

$$\psi(x) = Ae^{-ax} + Be^{ax} - \int_{-\infty}^{+\infty} G_E(x, x') V(x') \psi(x') dx'$$

la soluzione fisicamente accettabile è dunque

$$\psi(x) = -\frac{m}{a\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a|x-x'|} V(x') \psi(x') dx'$$

Quest'ultima equazione è equivalente all'equazione di Schrödinger, quando si cerchi uno stato legato, dunque, $E < 0$.

Il caso particolare in cui $V(x) = -\alpha\delta(x)$ reca

$$\psi(x) = \frac{\alpha m}{a\hbar^2} \psi(0) e^{-a|x|}$$

perciò

$$\frac{\alpha m}{a\hbar^2} = 1 \iff \frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2} = |E|$$

- Sicché esiste un solo stato legato all'energia di sopra.

Esercizio I.7 Utilizzando i risultati ottenuti nell'esercizio precedente, dimostrare che i livelli energetici discreti di una particella soggetta al potenziale $V(x)$, sommabile e tendente a 0 all'infinito, soddisfano (se esistono) la seguente disuguaglianza

$$|E_n| \leq \frac{m}{2\hbar^2} \|V\|_{L^1}^2 = \frac{m}{2\hbar^2} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} |V(x)| dx \right)^2$$

Dire in quali condizioni vale l'eguaglianza.

Risoluzione Siccome il potenziale tende a 0 per $x \rightarrow \pm\infty$, allora gli stati legati hanno energie negative (il che richiede che V non sia ovunque positivo). In queste condizioni è possibile applicare la formula integrale ottenuta nell'esercizio precedente. Abbiamo

$$\psi(x) = -\frac{m}{\hbar\sqrt{2m|E_n|}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\sqrt{2m|E_n|}|x-x'|/\hbar} V(x') \psi(x') dx'$$

Dunque,

$$\begin{aligned} |\psi(x)| &= \frac{m}{\hbar\sqrt{2m|E_n|}} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\sqrt{2m|E_n|}|x-x'|/\hbar} V(x') \psi(x') dx' \right| \leq \\ &\leq \frac{m}{\hbar\sqrt{2m|E_n|}} \int_{-\infty}^{+\infty} |V(x')| |\psi(x')| dx' \end{aligned}$$

Ora, le funzioni $|\psi(x)|$ sono continue e tendono esponenzialmente a 0 all'infinito, perciò, dal teorema di Weierstraß ammettono un massimo positivo. Il punto di massimo sia in $x = x_0$, allora

$$|\psi(x_0)| \leq \frac{m}{\hbar\sqrt{2m|E_n|}} |\psi(x_0)| \int_{-\infty}^{+\infty} |V(x')| dx'$$

$$|E_n| \leq \frac{m}{2\hbar^2} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} |V(x')| dx' \right)^2$$

Esercizio I.8 Cercare la corrispondenza tra i livelli energetici dello spettro discreto e tra le autofunzioni corrispondenti per le hamiltoniane associate ai potenziali $V(x)$ e $\tilde{V}(x)$ tali che

- (i) V è pari, cioè $V(-x) = V(x)$;
- (ii) $\tilde{V}(x)$ è definito come segue

$$\tilde{V}(x) \doteq \begin{cases} V(x), & x > 0 \\ +\infty, & x < 0 \end{cases}$$

Risoluzione Le autofunzioni appartenenti allo spettro discreto della hamiltoniana associata a V sono a parità definita, infatti, l'operatore di inversione spaziale commuta con H e, siccome i livelli discreti sono non degeneri, ne viene che gli autovettori di H sono autovettori dell'inversione spaziale, ossia sono funzioni pari oppure dispari.

Consideriamo, se esistono, le autosoluzioni dispari di V , esse risolvono la medesima equazione differenziale implementata da \tilde{V} in $x > 0$ e inoltre, essendo dispari, soddisfano la condizione al contorno $\psi(0) = 0$ richiesta da \tilde{V} . Perciò le autofunzioni dispari di V sono autofunzioni di \tilde{V} . Mostriamo ora che le autosoluzioni di \tilde{V} sono tutte autosoluzioni dispari per V . Infatti, se ψ è autosoluzione di \tilde{V} , prolungata per disparità essa soddisfa l'equazione per V , visto che V è pari.

In definitiva, se E_0, E_1, \dots sono gli autovalori di V , gli autovalori di \tilde{V} sono E_1, E_3, \dots , gli autovettori (a parte la normalizzazione) sono gli stessi (fissati gli autovalori detti!!).

Esercizio I.9 Si consideri una buca di potenziale $V(x)$ definita per le $x > 0$, tale che $V(x) = \infty$, per $x < 0$. Determinare la condizione di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld per l'energia in regime semiclassico.

Risoluzione Sia V la nostra buca di potenziale e definiamo $U(x) = V(|x|)$, allora U è una funzione pari e V e U stanno nello stesso rapporto di \tilde{V} e V nell'esercizio precedente.

Visto che la condizione di quantizzazione per U è nota dallo studio del metodo WKB (vedi capitolo sui metodi di approssimazione), noto che dobbiamo solo prendere gli autovalori a n dispari per ottenere gli autovalori di V , otteniamo il risultato richiesto.

La condizione di Bohr-Sommerfeld per U è, essendo U pari,

$$\frac{1}{\hbar} \int_{-b(E_n)}^{b(E_n)} \sqrt{2m(E_n - U(x))} dx = \pi \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

D'altra parte, $U(x) = V(|x|)$ sicché

$$\frac{2}{\hbar} \int_0^{b(E_n)} \sqrt{2m(E_n - V(x))} dx = \pi \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

per V dobbiamo prendere gli autovalori dispari cioè $n = 2m + 1$, al variare di $m \in \mathbb{N}$, cioè

$$\frac{1}{\hbar} \int_0^{b(E_m)} \sqrt{2m(E_m - V(x))} dx = \pi \left(m + \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \right) = \pi \left(m + \frac{3}{4} \right)$$

Da cui la condizione di quantizzazione cercata è

$$\frac{1}{\hbar} \int_0^{b(E_m)} \sqrt{2m(E_m - V(x))} dx = \pi \left(m + \frac{3}{4} \right), \quad m \in \mathbb{N}$$

Esercizio I.10 Il campo $U(x)$ è costituito da due buche di potenziale identiche separate da una barriera simmetrica (si veda figura 1). Se la barriera è invalicabile per la particella soggetta al campo detto, esisteranno livelli energetici rispondenti al moto della particella solamente entro una

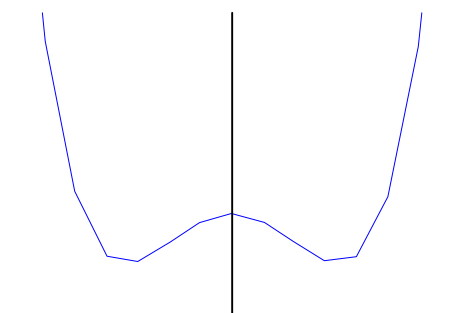


Figura 1. Due buche separate

delle due buche (la prima o la seconda). I livelli saranno gli stessi per le due buche, di modo che l'hamiltoniana risulterà costituita da livelli globalmente doppiamente degeneri. Ora, la possibilità di valicare la barriera (esistente, per esempio, per la buca di figura) conduce alla rottura della degenerazione e alla fissione di ciascun livello in due livelli vicini corrispondenti a stati in cui la particella può occupare, per effetto tunnel, entrambe le buche. Determinare, usando l'approssimazione semiclassica, la ampiezza della fissione dei due livelli.

Risoluzione

Il problema ci invita a considerare energie comprese tra U_{\min} e $U(0)$ (massimo relativo). Fissiamo allora E_n tra i due limiti detti e chiamiamo le intersezioni positive di E_n con il profilo $U(x)$, b e a con $b < a$. Ne viene che si hanno due regioni in cui il moto classico è consentito, $-a \leq x \leq -b$, $b \leq x \leq a$, e tre regioni, $x < -a$, $-b < x < b$, $x > b$, in cui il moto è classicamente interdetto.

Dalla teoria del WKB, la più generale funzione d'onda in una regione classicamente proibita è

$$\psi(x) = \frac{c_1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int^x |p(x')| dx'\right) + \frac{c_2}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int^x |p(x')| dx'\right)$$

Osserviamo che U è pari e le regioni all'infinito sono classicamente proibite, ne ricaviamo che (a) i livelli sono non degeneri, (b) possiamo assumere che le nostre autosoluzioni siano reali, (c) le nostre autosoluzioni hanno parità definita. (a), (b) e (c) sono affermazioni esatte, prescindono dall'approssimazione semiclassica. Imporremo allora che le nostre approssimanti semiclassiche soddisfino le tre condizioni dettate dalla forma di U in modo del tutto generale.

Chiaramente, allora, possiamo dire che a cavallo della barriera di potenziale, cioè per $-b < x < b$, la soluzione quasiclassica sarà del tipo

$$\psi_{\pm}(x) = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \left[\exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_0^x |p(x')| dx'\right) \pm \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^x |p(x')| dx'\right) \right] \quad (\text{I.1})$$

la soluzione + essendo quella pari, la -, quella dispari.

Ancora, dalla teoria del WKB, sappiamo che la più generale funzione d'onda in una regione classicamente consentita è del tipo

$$\psi_{\pm}(x) = \frac{c_1}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int^x p(x') dx' + \alpha\right)$$

Nella regione compresa tra $-a$ e $-b$, avremo allora

$$\psi_{\pm}(x) = \frac{C'}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{-b} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} + \gamma_{\pm}\right) \quad (\text{I.2})$$

la quale andrà raccordata alla (IV.1), nonché alla soluzione nella regione proibita $x < -a$.

Quest'ultima va scelta in modo che non scoppi a $-\infty$, cioè

$$\psi_{\pm}(x) = \frac{C''}{2\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^x |p(x')| dx'\right) \quad (\text{I.3})$$

Dalla teoria, sappiamo che il raccordo tra la (IV.2) e la (I.3), comporta che nella regione tra $-a$ e $-b$ la soluzione sia

$$\psi_{\pm}(x) = \frac{C''}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) \quad (\text{I.4})$$

Ne viene che dobbiamo eguagliare (IV.2) e (IV.5). Riscriviamo

$$\frac{1}{\hbar} \int_x^{-b} p(x') dx' = -\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^x p(x') dx' + \frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{-b} p(x') dx'$$

sicché

$$C'' \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) = C' \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^x p(x') dx' - \frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{-b} p(x') dx' - \frac{\pi}{4} - \gamma_{\pm}\right)$$

da cui, derivando, quadrando e sommando, troviamo $C'^2 = C''^2$, cioè $C' = \pm C''$, da cui i due sfasamenti devono differire per un multiplo di π , ossia, se $m \in \mathbb{Z}$,

$$\frac{\pi}{4} + \frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{-b} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} + \gamma_{\pm} = m\pi$$

da cui

$$\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{-b} p(x') dx' = \left(m - \frac{1}{2}\right) \pi - \gamma_{\pm}$$

siccome il primo membro è positivo, $m \geq 1$, poniamo pure $m = n + 1$, $n \in \mathbb{N}$,

$$\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{-b} p(x') dx' = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi - \gamma_{\pm}$$

Quello che è rimasto da fare (per simmetria poi avremo finito) è raccordare la soluzione in $-a < x < -b$ a quella in $-b < x < b$, la qual cosa ci consentirà di determinare γ_{\pm} .

Ora, due soluzioni indipendenti in $-a < x < -b$ sono

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{p}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{-b} p dx + \frac{\pi}{4}\right); \quad \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{p}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{-b} p dx + \frac{\pi}{4}\right);$$

alla prima, per $x > b$ corrisponde la

$$\psi_1 = \frac{1}{2\sqrt{|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{-b}^x |p| dx\right)$$

alla seconda

$$\psi_2 = \frac{C_2}{\sqrt{|p|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_{-b}^x |p| dx + \frac{\pi}{4}\right)$$

Imponendo la costanza del wronskiano di ψ_1 e ψ_2 otteniamo

$$w(x < -b) = -\frac{1}{\hbar} = w(x > -b) = -\frac{C_2}{\hbar}$$

da cui $C_2 = 1$.

Visto che la (IV.2) può essere riscritta come

$$\psi_{\pm}(x) = \frac{C'}{\sqrt{p(x)}} \left[\cos \gamma_{\pm} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{-b} p dx' + \frac{\pi}{4}\right) + \sin \gamma_{\pm} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{-b} p dx' + \frac{\pi}{4}\right) \right]$$

e la (IV.1) come

$$\psi_{\pm}(x) = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \left[R \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_{-b}^x |p| dx'\right) \pm \frac{1}{R} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{-b}^x |p| dx'\right) \right]$$

dove

$$R = \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{-b}^0 \sqrt{2m(E_{\pm} - U)} dx'\right)$$

allora abbiamo

$$C' \cos \gamma_{\pm} = 2\frac{C}{R}, \quad C' \sin \gamma_{\pm} = CR$$

perciò

$$\tan \gamma_{\pm} = \pm \frac{R^2}{2}$$

Se la barriera fosse completamente invalicabile, $R = 0$, perciò $\gamma_{\pm} = 0$ e allora l'energia dei livelli pari sarebbe eguale a quella dei livelli dispari, cioè eguale all'energia di singola buca E_{n0} .

Per calcolare la differenza tra E_{n+} ed E_{n-} , mettiamoci nella situazione semplificata $R \ll 1$, allora, posto $\Delta E_{n\pm} = E_{n\pm} - E_{n0}$, abbiamo

$$\begin{aligned} \int p dx &= \int \sqrt{2m(E_{n0} - U(x) + \Delta E_{n\pm})} dx \approx \int \sqrt{2m(E_{n0} - U(x))} dx + \\ &+ \int \frac{\Delta E_{n\pm}}{\sqrt{2/m(E_{n0} - U)}} dx \\ &= \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{T \Delta E_{n\pm}}{2} \end{aligned}$$

dove

$$T = 2 \int_{-a}^{-b} \frac{1}{\sqrt{2/m(E_{n0} - U)}} dx$$

è il periodo classico nella buca di sinistra.

In definitiva,

$$\gamma_{\pm} = -\frac{T \Delta E_{n\pm}}{2\hbar} \approx \pm \frac{R^2}{2} \implies \Delta E_{n\pm} \approx \mp \frac{\hbar R^2}{T}$$

- La fissione cercata è $\delta E_n = 2\Delta E_{n+}$.

Esercizio I.11 Calcolare, in approssimazione semiclassica, il coefficiente di trasparenza di una barriera parabolica della forma

$$\begin{cases} U_0 (1 - x^2/a^2), & |x| < a \\ 0, & |x| > a \end{cases}$$

Discutere il caso $E \rightarrow 0$.

Risoluzione Dalla teoria dello scattering semiclassico, sappiamo che

$$T = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{-b(E)}^{b(E)} \sqrt{2m(E - U(x))} dx\right)$$

perciò si tratta di calcolare l'integrale

$$\int_{-b(E)}^{b(E)} \sqrt{2m(E - U(x))} dx$$

dove $b(E)$ è tale che $U(b(E)) = E$, allora

$$U_0 \left(1 - \frac{b^2}{a^2}\right) = E$$

dunque,

$$\int_{-b(E)}^{b(E)} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx = \int_{-b}^b \sqrt{2mU_0(b^2/a^2 - x^2/a^2)} dx =$$

$$\begin{aligned}
&= \sqrt{2mU_0} \frac{b}{a} \int_{-b}^b \sqrt{1 - x^2/b^2} dx = \\
&= \sqrt{2mU_0} \frac{b^2}{a} \int_{-1}^1 \sqrt{1 - t^2} dt = \\
&= \frac{\pi}{2} \sqrt{2mU_0} \frac{b^2}{a} = \frac{\pi}{2} \sqrt{2mU_0} \left(1 - \frac{E}{U_0}\right) a
\end{aligned}$$

perciò

$$T = \exp\left(-\frac{\pi}{\hbar} \sqrt{2mU_0} \left(1 - \frac{E}{U_0}\right) a\right)$$

Veniamo a discutere il caso $E = 0$. Qui bisogna stare molto attenti: una applicazione cieca del risultato trovato sopra porta a un T piccolo ma finito. D'altra parte, se $E = 0$, la soluzione dell'equazione di Schrödinger è identicamente nulla, essendo $\psi'' = 0$, la soluzione sarebbe

- lineare e perciò esplodente e dunque non accettabile. Si conclude che, in questo caso, $T = 0$.

Esercizio I.12 Si consideri un profilo di potenziale $U(x)$ talché $U(x) \rightarrow 0$ per $x \rightarrow -\infty$ e $U(x) \rightarrow U_0$ per $x \rightarrow +\infty$. Cercare la dipendenza dall'energia del coefficiente di penetrazione, in particolare nel caso $E \rightarrow U_0$.

Risoluzione Prendiamo $E > U_0$. Per $x \rightarrow -\infty$ l'equazione di Schrödinger diventa

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

perciò la soluzione asintotica è

$$\psi_{-\infty}(x) = \exp(i\kappa x) + A \exp(-i\kappa x)$$

con

$$\kappa \doteq \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Per $x \rightarrow +\infty$

$$\psi''(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E) \psi(x)$$

da cui

$$\psi_{+\infty}(x) = B \exp(ikx)$$

dove

$$k \doteq \sqrt{\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}}$$

La corrente entrante è

$$j_{\text{in}} = \frac{\hbar}{m} \kappa$$

quella uscente

$$j_{\text{out}} = \frac{\hbar}{m} k |B|^2$$

perciò il coefficiente di penetrazione è

$$T = \frac{j_{\text{out}}}{j_{\text{in}}} = \frac{k}{\kappa} |B|^2.$$

- Nel caso in cui $E \rightarrow U_0$ allora $k \rightarrow 0$, $B(k) \rightarrow B(0) \neq 0$ perciò $T \rightarrow 0$.

Esercizio I.13
(problema 1,
18.10.1996)

Una particella di massa m ed energia E , in una dimensione, viene riflessa da un potenziale $V(x)$ che ha la seguente forma: per $x < 0$, $V(x) = m\omega^2 x^2/2$, per $x > 0$, $V(x) = 0$.

(i) Nell'approssimazione semiclassica, si calcoli lo sfasamento di scattering $\delta(E)$ per energie arbitrarie $E > 0$ ricordando che $\delta(E)$ è definito dalla funzione d'onda per $x > 0$, $\psi(x) = A \sin(kx + \delta(E))$, $E = \hbar^2 k^2 / 2m$.

Risoluzione

(ii) Si verifichi che per $E = \hbar\omega(n + 1/2)$ gli sfasamenti ottenuti sono esatti, modulo π .

L'esercizio è molto semplice. Il profilo di potenziale è tale che per ogni energia $E > 0$, l'asse delle x è diviso in una regione classicamente consentita (a destra) e una classicamente proibita (a sinistra). Ne viene che, se con $-a$, indichiamo l'ascissa per cui $V(-a) = E$,

$$\begin{cases} \psi(x > -a) = \frac{c}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) \\ \psi(x < -a) = \frac{c}{2\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^x |p(x')| dx'\right) \end{cases}$$

dunque, per $x > 0$ l'argomento del seno è

$$\frac{1}{\hbar} \left(\int_{-a}^0 p(x') dx' + \sqrt{2mEx} \right) + \frac{\pi}{4}$$

perciò si tratta di calcolare

$$\int_{-a}^0 \sqrt{2m \left(E - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right)} dx$$

ora,

$$\frac{1}{2} m \omega^2 a^2 = E$$

perciò

$$\begin{aligned} \int_{-a}^0 \sqrt{2m \left(E - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right)} dx &= \int_{-a}^0 \sqrt{m^2 \omega^2 (a^2 - x^2)} dx = m\omega a \int_{-a}^0 \sqrt{1 - \frac{x^2}{a^2}} dx = \\ &= m\omega a^2 \int_{-1}^0 \sqrt{1 - t^2} dt = \frac{m\omega a^2}{2} \int_{-1}^1 \sqrt{1 - t^2} dt = \\ &= \frac{m\omega a^2}{4} \end{aligned}$$

Infine, l'argomento del seno è

$$kx + \frac{m\omega a^2}{4\hbar} + \frac{\pi}{4}$$

e la fase vale

$$\delta(E) = \frac{m\omega a^2}{4\hbar} + \frac{\pi}{4} = \frac{E}{2\hbar\omega} + \frac{\pi}{4} = \frac{\pi}{4} \left(1 + \frac{2E}{\hbar\omega} \right).$$

Passiamo al punto (ii). Noi conosciamo la soluzione esatta per $x < 0$, essendo gli E_n dati proprio gli autovalori dell'oscillatore armonico. D'altra parte, la soluzione esatta in $x > 0$ è del tipo

$$\sin(kx + \delta'(E_n))$$

si tratta di verificare che $\delta'(E_n) = \delta(E_n)$. Siccome la soluzione esatta è di classe \mathcal{C}^2 , possiamo trovare la fase δ' imponendo la continuità della autosoluzione o della sua derivata. Nel caso in cui l'indice n è dispari, conviene usare la continuità della funzione, perché dal teorema di oscillazione, sappiamo che la nostra soluzione per $x \rightarrow 0^-$ (dovendo essere dispari

nell'oscillatore armonico) andrà a 0, perciò, se n è dispari

$$\delta'(E_n) = 0 \pmod{\pi}$$

Se, invece, n è pari, allora la nostra soluzione dovrà avere derivata che tende a 0 per $x \rightarrow 0^-$ (la soluzione dell'oscillatore dovrebbe essere pari), perciò

$$\delta'(E_n) = \frac{\pi}{2} \pmod{\pi}.$$

Ma

$$\delta(E_n) = \frac{\pi}{4} (2 + 2n) = (n + 1) \frac{\pi}{2}$$

perciò, per n dispari

$$\delta(E_n) = 0 \pmod{\pi}$$

per n pari

$$\delta(E_n) = \frac{\pi}{2} \pmod{\pi}.$$

■

Esercizio I.14
(problema 1,
22.10.1994)

Una particella di massa m è soggetta al potenziale $V(x) = V_0 (x/a)^k$ con k pari e $V_0 > 0$.

- (i) Si dica che tipo di spettro (continuo, discreto o misto) ha l'hamiltoniana associata a $V(x)$.
- (ii) Si calcoli come dipendono da n, a, V_0, m i livelli energetici calcolati nell'approssimazione semiclassica.
- (iii) Si prenda, nel risultato trovato, il limite per $k \rightarrow +\infty$ e si discuta il risultato trovato.
- (iv) Si consideri lo stesso problema ma con $V(x) = V_0 \cosh(x/a)$ e sempre nell'approssimazione semiclassica si determini una relazione per i livelli energetici a n grande.

Risoluzione

Il profilo di potenziale è continuo e infinito all'infinito. Ammette come minimo assoluto 0, perciò lo spettro dell'hamiltoniana è puramente discreto e non degenera, contenuto nel semiasse reale positivo.

Per valutare i livelli energetici dobbiamo utilizzare la regola di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld:

$$\int_{-b}^b \sqrt{2m(E - V(x))} dx = \hbar\pi \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

dove $b > 0$ è il punto in cui $V(b) = E$. Calcoliamo l'integrale

$$\int_{-b}^b \sqrt{\frac{2mV_0}{a} (b^k - x^k)} dx = \sqrt{\frac{2mV_0}{a}} b^{1+k/2} \int_{-1}^1 \sqrt{1 - t^k} dt$$

Ora, poniamo

$$C_k = \int_{-1}^1 \sqrt{1 - t^k} dt$$

da cui

$$\sqrt{\frac{2mV_0}{a}} b^{1+k/2} C_k = \hbar\pi \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

siccome

$$b = \left(\frac{E_n}{V_0} \right)^{1/k} a$$

si ha

$$\sqrt{2mV_0 a} \left(\frac{E_n}{V_0} \right)^{(2+k)/2k} C_k = \hbar\pi \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

$$E_n = \left[\hbar\pi \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{1}{C_k \sqrt{2ma}} \right]^{2k/(2+k)} V_0^{2/(2+k)}$$

Vediamo che succede se $k \rightarrow +\infty$, abbiamo che

$$V_k(x) = V_0 \left(\frac{x}{a} \right)^k$$

tende alla buca infinita centrata nell'origine e di ampiezza $2a$. Quest'ultima ha come livelli energetici esatti

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} (n+1)^2$$

Calcoliamo il limite degli E_n semiclassici di sopra. $C_k \rightarrow 2$, e dunque

$$E_n = \left[\hbar\pi \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{1}{2\sqrt{2ma}} \right]^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2$$

Si noti che approssimazione semiclassica e formula esatta coincidono per n molto grande.

Passiamo alla buca di profilo $V(x) = V_0 \cosh(x/a)$. Essa ha spettro discreto non degenere con $E_n > V_0$. Applichiamo ancora la regola di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld e troviamo

$$\int_{-b}^b \sqrt{2m[E - V_0 \cosh(x/a)]} dx = \hbar\pi \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

poniamo $y = V_0/E \exp(x/a)$ e andiamo a calcolare l'integrale, nell'ipotesi $V_0 \ll E$, perciò $V \approx V_0 \exp(x/a)/2$,

$$2 \int_0^b \sqrt{2m[E - V_0 \cosh(x/a)]} dx \approx 2a\sqrt{2mE} \int_{V_0/E}^2 \sqrt{1 - \frac{y}{2}} \frac{dy}{y} \approx 2a\sqrt{2mE} \log \frac{2E}{V_0}$$

sicché

$$2a\sqrt{2mE} \log \frac{2E}{V_0} = \hbar\pi \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Esercizio I.15
(problema
1, 27.3.1993)

Si trovi la soluzione dell'equazione di Schrödinger unidimensionale che descrive particelle che provengono da $-\infty$ con impulso $p > 0$ e vengono riflesse da una barriera di potenziale infinita che si muove con velocità v ($v < 0$).

Risoluzione

L'equazione di Schrödinger che dobbiamo risolvere è la

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x, t) = i\hbar \dot{\psi}(x, t)$$

con dato iniziale che **contenga** (evidentemente dovrà essere pure presente un termine di riflessione, non stiamo mimando una *comparsa improvvisa* a $t = 0$ della barriera, ma supponiamo che a $t = 0$ la barriera sia giunta in $x = 0$) un termine descrivente particelle in moto da $-\infty$ con impulso p , ossia $e^{ipx/\hbar}$ e con la condizione al bordo

$$\psi(vt, t) = 0.$$

che tiene conto del fatto che all'istante t la barriera ha ascissa vt .

Come noto una soluzione della equazione è data dalle sovrapposizioni di onde del tipo $e^{i(px-Et)/\hbar}$ come si può verificare semplicemente sostituendo e ricordando che

$$E = \frac{p^2}{2m}.$$

La soluzione $e^{i(px-Et)/\hbar}$ non soddisfa la condizione al contorno. Per ottenere questo, sovrapponiamola (è solo un tentativo!) con un'altra soluzione del tipo $e^{i(p'x-E't)/\hbar}$. Se poniamo

$$\psi(x, t) = e^{i(px-Et)/\hbar} - e^{i(p'x-E't)/\hbar}$$

si tratta poi di imporre

$$pv - E = p'v - E'$$

$$pv - \frac{p^2}{2m} = p'v - \frac{p'^2}{2m} \implies (p' - p)(p' + p) = 2mv(p' - p)$$

perciò, basta scegliere $p' = 2mv - p$. La soluzione che otteniamo contiene un termine descrivente particelle da $-\infty$ con impulso positivo e soddisfa la condizione al contorno, perciò è la soluzione cercata. ■

Esercizio I.16 Si consideri un profilo di potenziale $V_1(x)$ asintotizzante a 0 per $x \rightarrow \infty$. Esso ammetta almeno uno stato legato corrispondente all'energia $E_1^{(0)}$. Sia ora $V_2(x)$ un secondo profilo, più basso del primo, $V_2 \leq V_1$, asintotizzante a 0, per $x \rightarrow \infty$. Si dimostri che V_2 ammette almeno uno stato legato e che, se $E_2^{(0)}$ è la sua energia, allora $E_2^{(0)} \leq E_1^{(0)}$.

Risoluzione Siccome i due profili asintotizzano a 0, i loro (eventuali) stati legati devono avere energia minore di 0, affinché le regioni all'infinito siano classicamente proibite. Ricordiamo che dal criterio di Rayleigh-Ritz, in queste ipotesi, condizione necessaria e sufficiente affinché esista uno stato legato è che esista uno stato per il quale $(\psi, H\psi) < 0$.

Sia ψ_0 lo stato fondamentale a energia $E_1^{(0)}$ per H_1 , abbiamo

$$(\psi_0, H_2\psi_0) = (\psi_0, H_1\psi_0) + (\psi_0, (V_2 - V_1)\psi_0) = E_1^{(0)} + (\psi_0, (V_2 - V_1)\psi_0)$$

siccome $V_2 - V_1 \leq 0$, il secondo addendo è il valor medio di un operatore negativo, sicché

$$(\psi_0, H_2\psi_0) \leq E_1^{(0)}$$

Ora, siccome ψ_0 è uno stato legato, $E_1^{(0)} < 0$, perciò dal criterio di Rayleigh-Ritz concludiamo che H_2 ammette uno stato legato. Inoltre,

$$E_2^{(0)} \leq (\psi_0, H_2\psi_0) \leq E_1^{(0)}.$$

■

Esercizio I.17 Ci si serva dell'equazione integrale di Schrödinger per mostrare che condizione necessaria all'esistenza di uno stato legato nel campo $U(x)$, infinito per $x < 0$ e infinitesimo per $x \rightarrow +\infty$, è

$$\int_0^{+\infty} x |U(x)| dx \geq \frac{\hbar^2}{2m}.$$

Risoluzione La forma integrale per un generico potenziale $V(x)$ dell'equazione di Schrödinger è

$$\psi(x) = -\frac{m}{\hbar\sqrt{2m|E_n|}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\sqrt{2m|E_n||x-x'|/\hbar}} V(x') \psi(x') dx'$$

Posto $V(x) = U(|x|)$ e ammesso che ψ sia lo stato fondamentale per $U(x)$, abbiamo che ψ è il primo eccitato per V . Sia E l'autovalore relativo a ψ , abbiamo

$$\psi(x) = -\frac{m}{\hbar\sqrt{2m|E|}} \left[\int_0^{+\infty} e^{-\sqrt{2m|E||x-x'|/\hbar}} U(x') \psi(x') dx' + \int_{-\infty}^0 e^{-\sqrt{2m|E||x-x'|/\hbar}} U(-x') \psi(x') dx' \right]$$

Cambiamo variabile nel secondo integrale, $y = -x'$, tenendo conto che ψ è dispari, otteniamo

$$-\int_{+\infty}^0 e^{-\sqrt{2m|E||x+y|/\hbar}} U(y) \psi(-y) dy = -\int_0^{+\infty} e^{-\sqrt{2m|E||x+y|/\hbar}} U(y) \psi(y) dy$$

allora

$$\psi(x) = -\frac{m}{\hbar\sqrt{2m|E|}} \int_0^{+\infty} \left(e^{-\sqrt{2m|E||x-x'|/\hbar}} - e^{-\sqrt{2m|E||x+x'|/\hbar}} \right) U(x') \psi(x') dx'$$

Come sappiamo $\psi(x)$ descrivendo uno stato legato, può essere scelta reale. Essa, come fondamentale di U (o primo eccitato di V) non si annulla mai a parte che in 0 e all'infinito. Scelta opportunamente la fase, è poi sempre possibile, ottenere $\psi(x) \geq 0$ per ogni $x \geq 0$. Essendo ψ continua, per il teorema di Weierstraß ammette massimo assoluto in $x_0 \in]0, +\infty[$.

Dunque,

$$\psi(x_0) = -\frac{m}{\hbar\sqrt{2m|E|}} \int_0^{+\infty} \left(e^{-\sqrt{2m|E||x_0-x'|/\hbar}} - e^{-\sqrt{2m|E||x_0+x'|/\hbar}} \right) U(x') \psi(x') dx'$$

sicché,

$$\psi(x_0) \leq \frac{m}{\hbar\sqrt{2m|E|}} \int_0^{+\infty} \left(e^{-\sqrt{2m|E||x_0-x'|/\hbar}} - e^{-\sqrt{2m|E||x_0+x'|/\hbar}} \right) |U(x')| |\psi(x')| dx'$$

visto che ψ è non negativa e tale è

$$e^{-\sqrt{2m|E||x_0-x'|/\hbar}} - e^{-\sqrt{2m|E||x_0+x'|/\hbar}}$$

essendo $|x_0 - x'| \leq |x_0 + x'|$.

Vediamo come sia possibile dominare l'integranda. Abbiamo $\psi(x') \leq \psi(x_0)$

$$\begin{aligned} e^{-\kappa|x_0-x'|} - e^{-\kappa|x_0+x'|} &= e^{-\kappa|x_0-x'|} \left(1 - e^{-\kappa|x_0+x'|+\kappa|x_0-x'|} \right) \leq \\ &\leq e^{-\kappa|x_0-x'|} \left(1 - e^{-2\kappa x'} \right) \leq 2\kappa x' \end{aligned}$$

visto che $|x_0 + x'| - |x_0 - x'| \leq 2x'$ (come si ottiene subito notando che $x_0, x' \geq 0$ e distinguendo i casi $x_0 \leq x'$).

Dunque,

$$\begin{aligned} \psi(x_0) &\leq \psi(x_0) \frac{m}{\hbar\sqrt{2m|E|}} \int_0^{+\infty} 2\kappa x' |U(x')| dx' \\ 1 &\leq \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^{+\infty} x' |U(x')| dx' \end{aligned}$$

da cui

$$\int_0^{+\infty} x |U(x)| dx \geq \frac{\hbar^2}{2m}.$$

Esercizio I.18 Si studino le buche di potenziale di profilo $U(x)$ diverso, ma tutte soddisfacenti le condizioni

$$U(x) \leq 0; \quad \lim_{x \rightarrow \infty} U(x) = 0; \quad \int_{-\infty}^{+\infty} U(x) dx = \alpha = \text{const.}$$

- (i) Si determini il profilo tale che sia massima la profondità $|E_0|$ del livello fondamentale;
 (ii) Si determini il profilo tale da ammettere il maggior numero possibile di stati legati.

Risoluzione In base al risultato dell'esercizio I.7, si ha la seguente maggiorazione per i livelli degli stati legati

$$|E| \leq \frac{m}{2\hbar^2} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} U(x) dx \right)^2 = \frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$$

Se fosse possibile determinare una U talché valga l'eguaglianza, avremmo concluso (i). Ricordiamo che la maggiorazione discende dall'equazione integrale

$$\psi(x_0) = -\frac{m}{\hbar\sqrt{2m|E|}} \int_0^{+\infty} e^{-\sqrt{2m|E||x_0-x'|/\hbar}} U(x') \psi(x') dx'$$

dove x_0 è il punto di massimo (che esiste per ψ è continuo e infinitesimo all'infinito) di ψ . Come nell'esercizio precedente si domina il secondo membro con

$$\psi(x_0) \leq \frac{m}{\hbar\sqrt{2m|E|}} e^{-\sqrt{2m|E||x_0-x_0|/\hbar}} \psi(x_0) \left(\int_0^{+\infty} |U(x')| dx' \right)^2$$

e l'eguaglianza vale senz'altro se U è deltiforme, cioè se

$$U(x) = \alpha \delta(x - x_0).$$

- Veniamo a (ii). Il massimo numero di stati legati sarebbe infinito. Un tale numero di stati, ■ come noto, si ottiene per potenziali che all'infinito asintotizzano a zero come $-1/x^\nu$, $1 < \nu < 2$.

Esercizio I.19 *Mostrare che il valor medio di una forza applicata a una particella in uno stato stazionario dello spettro discreto, vale 0.*

Risoluzione L'operatore forza per una particella soggetta al campo V è il moltiplicatore per la funzione $-dV/dx$. Dal postulato di quantizzazione

$$-i\hbar \frac{dV}{dx} = [p, V] \implies -\frac{dV}{dx} = \frac{1}{i\hbar} [p, V]$$

Dunque, dobbiamo calcolare

$$\begin{aligned} \left(\psi, -\frac{dV}{dx} \psi \right) &= \frac{1}{i\hbar} (\psi, [p, V] \psi) = \frac{1}{i\hbar} (\psi, pV\psi) - \frac{1}{i\hbar} (\psi, Vp\psi) = \\ &= \frac{1}{i\hbar} (\psi, pV\psi) - \frac{1}{i\hbar} (\psi, pV\psi)^* = \frac{1}{i\hbar} (\psi, pV\psi) + \left[\frac{1}{i\hbar} (\psi, pV\psi) \right]^* = \\ &= 2 \operatorname{Re} \left[\frac{1}{i\hbar} (\psi, pV\psi) \right] \end{aligned}$$

dove si è usato il fatto che, p e V essendo simmetrici,

$$(\psi, Vp\psi) = (Vp\psi, \psi)^* = (\psi, (Vp)^+ \psi)^* = (\psi, pV\psi)^*$$

Ora,

$$(\psi, pV\psi) = -\frac{1}{2m} (\psi, p^3\psi) + E (\psi, p\psi)$$

avendo usato

$$V\psi = E\psi - \frac{p^2}{2m}\psi.$$

I due addendi sono separatamente nulli. Infatti, gli operatori p, p^3 sono simmetrici e come tali devono ammettere valori medi reali. D'altra parte se ψ è uno stato legato, possiamo assumere che ψ sia reale, dunque, dalla

$$(\psi, p\psi) = -i\hbar \int \psi\psi' dx$$

otteniamo

$$0 = \operatorname{Im} (\psi, p\psi) = -\hbar \int \psi\psi' dx$$

- perciò $(\psi, p\psi) = 0$. Analogamente si procede per p^3 (nel quale compare i^3 che è ancora puramente immaginario). ■

Esercizio I.20 *Una particella si trova in uno stato stazionario dello spettro discreto di una buca di larghezza $2a$ e di profondità U_0 . Calcolare la forza media che ciascuna parete esercita sulla particella. Dal risultato ottenuto, ottenere l'espressione per la forza media esercitata dalle due pareti di una buca infinita. Confrontare quanto trovato con l'espressione dell'analogia classica.*

Risoluzione L'operatore forza, in rappresentazione delle coordinate è

$$F(x) = -\frac{dU}{dx} = -[-U_0\delta(x-a) + U_0\delta(x+a)] = -U_0[\delta(x+a) - \delta(x-a)]$$

La forza che la particella esercita sulla parete destra è dunque

$$F_d(x) = -U_0\delta(x-a) = \frac{\partial U}{\partial a}$$

Si tratta allora di calcolare

$$\langle F_d \rangle = \left(\psi_n, \frac{\partial U}{\partial a} \psi_n \right) = \left(\psi_n, \frac{\partial H}{\partial a} \psi_n \right) = \frac{\partial E_n}{\partial a}$$

La buca infinita si ottiene dalla buca di altezza U_0 al limite per $U_0 \rightarrow +\infty$. In quel limite, i livelli E_n sono quelli della buca infinita, perciò

$$\langle F_d \rangle = \frac{\partial E_n}{\partial a} = \frac{\partial}{\partial a} \left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} n^2 \right) = -\frac{2}{a} E_n$$

- Espressione identica si ottiene nel caso classico.

Esercizio I.21
(a cura di
Alberto Maggi)

Si consideri un profilo di potenziale $V(x)$ che sia supersimmetrico, cioè tale che esista una funzione $A(x)$ per cui

$$V(x) = \frac{9}{16} A'^2(x) - \frac{3}{4} \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} A''$$

- (i) Mostrare che l'hamiltoniana associata a $V(x)$ è semidefinita positiva.
- (ii) La (i) suggerisce di indagare se o meno l'energia $E = 0$ è associata a uno stato legato. Dimostrare che se all'infinito V è positivo, allora lo stato a energia 0 è normalizzabile, mentre se V all'infinito è negativo, allora lo stato a energia 0 non è normalizzabile.
- (iii) Il caso, però, più interessante nello studio degli stati legati a energia nulla, si ha quando il potenziale asintotizza a 0. Determinare l'autostato a energia nulla ψ_0 . Far vedere che se ψ_0 va come $x^{-\alpha}$, $\alpha > 1/2$, allora V va come $\alpha(\alpha+1)/x^2$; viceversa, se il potenziale va come $|x|^{-2\beta}$, allora ψ_0 decade come $\exp(-c/|x|^{\beta-1})$, da cui se $\beta < 1$, ψ_0 non è normalizzabile.
- (iv) Studiamo il caso $\beta = 1$, per il volcano potential dato da

$$A(x) = \frac{2\alpha}{3} \log(k^2 x^2 + 1).$$

Determinare ψ_0 e un valore di α per cui ψ_0 non è normalizzabile. Per l' α trovato, avremo un potenziale asintotizzante a 0, che assume anche valori negativi, ma che non ammette stati legati.

Risoluzione La hamiltoniana associata a V è

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{9}{16} A'^2 - \frac{3}{4} \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} A''$$

essa si fattorizza come

$$H = \left(-\frac{i}{\sqrt{2m}} p + \frac{3}{4} A' \right) \left(\frac{i}{\sqrt{2m}} p + \frac{3}{4} A' \right)$$

Infatti,

$$\begin{aligned} \left(-\frac{i}{\sqrt{2m}} p + \frac{3}{4} A' \right) \left(\frac{i}{\sqrt{2m}} p + \frac{3}{4} A' \right) &= \frac{p^2}{2m} - \frac{3i}{4\sqrt{2m}} [p, A'] + \frac{9}{16} A'^2 = \\ &= \frac{p^2}{2m} - \frac{3i}{4\sqrt{2m}} \frac{\hbar}{i} A'' + \frac{9}{16} A'^2 = H \end{aligned}$$

Ora, posto

$$Q \doteq \frac{i}{\sqrt{2m}} p + \frac{3}{4} A'$$

si ha

$$Q^+ = -\frac{i}{\sqrt{2m}} p + \frac{3}{4} A'$$

da cui $H = Q^+ Q$, cioè H è un operatore semidefinito **positivo**. L'unico autovalore non

positivo è, eventualmente lo 0 che si ottiene per $\psi_0 \in \ker Q$, cioè

$$Q\psi_0 = 0 \iff \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\psi'_0 + \frac{3}{4}A'\psi_0 = 0 \iff \psi'_0 = -\frac{3}{4}\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}A'\psi_0$$

se ne ricava

$$\psi_0(x) = \exp\left(-\frac{3}{4}\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}A(x)\right).$$

Ora, se all'infinito V risulta positivo, per $E = 0$, le regioni all'infinito sono classicamente proibite, perciò ψ_0 è normalizzabile, viceversa, nel caso in cui V è negativo all'infinito.

Resta il caso in cui V asintotizza a 0. Se ψ_0 va come x^α all'infinito, allora $A(x) \sim \alpha \log x$, da cui $V(x) \sim \alpha^2/x^2 + \alpha/x^2 = \alpha(\alpha+1)/x^2$. Se $V(x)$ va come $|x|^{-2\beta}$, allora $A' \sim |x|^{-\beta}$, cioè $A \sim |x|^{-\beta+1}$, da cui $\psi \sim \exp(-c/|x|^{\beta-1})$ e se $\beta < 1$ il nostro stato non è normalizzabile.

Con il punto (iv) studiamo un caso particolare in cui $\beta = 1$. Abbiamo

$$A(x) = \frac{2\alpha}{3} \log(k^2x^2 + 1)$$

perciò

$$\begin{aligned} A'(x) &= \frac{2\alpha}{3} \frac{2xk^2}{k^2x^2 + 1} \\ A''(x) &= 2k^2 \frac{2\alpha}{3} \frac{1 - k^2x^2}{(k^2x^2 + 1)^2} \end{aligned}$$

dunque, se $w \doteq \hbar/\sqrt{2m}$

$$\begin{aligned} V(x) &= \frac{9}{16}A'^2 - \frac{3}{4}wA'' = \alpha k^4 \frac{1}{(k^2x^2 + 1)^2} - \alpha w k^2 \frac{1 - k^2x^2}{(k^2x^2 + 1)^2} = \\ &= \alpha^2 k^4 \frac{x^2}{(k^2x^2 + 1)^2} - \alpha w k^2 \frac{1 - k^2x^2}{(k^2x^2 + 1)^2} = \alpha k^2 \frac{\alpha k^2 x^2 - w + w k^2 x^2}{(k^2x^2 + 1)^2} = \\ &= \alpha k^2 \frac{k^2(\alpha + w)x^2 - w}{(k^2x^2 + 1)^2} \end{aligned}$$

da cui l'autostato a energia 0 vale

$$\psi_0(x) = \exp\left(-\frac{3}{4w} \frac{2\alpha}{3} \log(k^2x^2 + 1)\right) = \frac{1}{(k^2x^2 + 1)^{\alpha/2w}}$$

L'andamento asintotico di ψ_0 è del tipo $|x|^{-\alpha/w}$, perciò, se per esempio $\alpha = 1/2w$ ψ_0 non è normalizzabile. ■

Esercizio I.22
(problema
3, 18.3.1989,
esistenza di un
bound state per
buca qualsiasi)

Si consideri un potenziale $V(x)$ unidimensionale generico della forma data in figura 2. Come è noto una buca rettangolare attrattiva di potenziale ammette sempre almeno uno stato legato. Che cosa si può dire sulla esistenza di stati legati nel potenziale $V(x)$ nel caso in cui la buca rettangolare iscritta nella parte attrattiva di $V(x)$ ammette

- (i) un solo stato legato?
- (ii) due stati legati?

Risoluzione

Si tratta di un problema davvero difficile. Non conviene tener conto dell'ordine in cui le domande sono formulate, ma cercare, semmai, cercare di dire qualcosa nel modo più generale possibile.

Consideriamo la buca rettangolare iscritta nel nostro profilo. Siano a la sua larghezza e $-U_0$ la sua profondità. Sia la buca che $V(x)$ sono dominate da una buca infinita larga a e con base in $-U_0$. La buca infinita ha come stato fondamentale un vettore ψ_0 a supporto nell'intervallo di larghezza a , nullo agli estremi dell'intervallo detto. Se denotiamo con H_∞ l'hamiltoniana

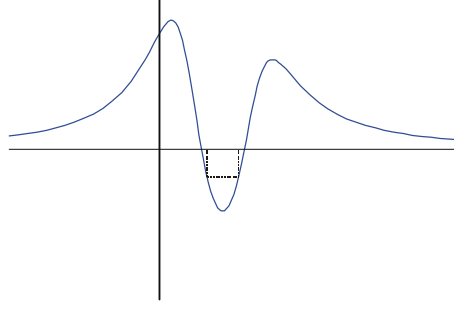


Figura 2. Esistenza di un *bound state* per buca qualsiasi

associata alla buca infinita, abbiamo che, come noto,

$$H_{\infty}\psi_0 = \left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} - U_0 \right) \psi_0$$

Volendo usare la funzione ψ_0 come funzione prova per la hamiltoniana H associata a $V(x)$ dobbiamo prolungarla nulla fuori dal supporto della buca rettangolare. Questo comporta che $p^2\psi_0$ presenta un contributo δ -forme negli estremi della buca rettangolare, visto che ψ_0 è continua, derivabile, ma ammette una discontinuità a salto nella derivata seconda. Ne viene che

$$(\psi_0, p^2\psi_0) = -\hbar^2 \left(\psi_0, \frac{d^2}{dx^2}\psi_0 \right) = -\hbar^2 (\psi_0, \psi_0'') - \alpha\hbar^2 [(\psi_0, \delta(x-b)) - (\psi_0, \delta(x-c))]$$

dove b e c sono le ascisse che individuano l'intersezione di $V(x)$ con $-U_0$. Perciò

$$(\psi_0, p^2\psi_0) = (\psi_0, p_{\infty}^2\psi_0) - \alpha\hbar^2 [\psi_0(b) - \psi_0(c)]$$

Ma $\psi_0(b) = \psi_0(c) = 0$, perciò

$$(\psi_0, p^2\psi_0) = (\psi_0, p_{\infty}^2\psi_0)$$

Tenendo conto di questo, abbiamo

$$(\psi_0, H\psi_0) = (\psi_0, H_{\infty}\psi_0) + (\psi_0, (V(x) + U_0)\psi_0)$$

dove $V(x)$ si considera solo nell'intervallo in cui è definita la buca e δ_+ e δ_- . Siccome il secondo addendo è negativo,

$$(\psi_0, H\psi_0) \leq \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} - U_0$$

e se il secondo membro è negativo, allora H deve ammettere un autovalore negativo e perciò un *bound state*, dal momento che V è non negativo all'infinito. Ma la condizione

$$\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} - U_0 \leq 0$$

si verifica se e solo se la buca rettangolare iscritta ammette due stati legati. Dunque, la risposta alla (ii) è che V ammette almeno un *bound state*.

Ragionevolmente la condizione (i) è troppo debole per assicurare l'esistenza di un *bound state*: dimostriamolo. A questo consideriamo il potenziale a forma di vulcano di cui nell'esercizio precedente. Esso dà luogo a una hamiltoniana priva di stati legati. Facciamo vedere che nella parte attrattiva di tale profilo non è possibile iscrivere una buca che ammetta due stati legati. Il potenziale è

$$V(x) = V_0 \frac{3/2(x/a)^2 - 1}{\left((x/a)^2 + 1 \right)^2}$$

e ha parte attrattiva in $|x/a| \leq \sqrt{2/3}$. Se b è l'ascissa di intersezione della buca rettangolare

iscritta si ha che essa ha profondità U_0 pari a

$$U_0 = -V_0 \frac{3/2 (b/a)^2 - 1}{((b/a)^2 + 1)^2}$$

Noi dobbiamo verificare che

$$U_0 - \frac{\hbar^2 \pi^2}{8mb^2} \leq 0$$

cioè

$$V_0 \frac{3/2 (b/a)^2 - 1}{((b/a)^2 + 1)^2} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{8mb^2} \geq 0$$

Ora, costruiamo la quantità adimensionale

$$v \doteq \frac{\hbar^2}{ma^2 V_0}$$

sicchè la nostra tesi diviene

$$\frac{3/2 (b/a)^2 - 1}{((b/a)^2 + 1)^2} + \frac{\pi^2}{8} v \frac{a^2}{b^2} \geq 0$$

Se chiamiamo $x \doteq b/a$, abbiamo

$$\frac{3/2 x^2 - 1}{(x^2 + 1)^2} + \frac{\pi^2}{8} \frac{v}{x^2} \geq 0$$

Siccome il secondo addendo nell'origine scoppia, mentre il secondo è ivi negativo, abbiamo che esiste un intorno dell'origine di raggio δ in cui la quantità è effettivamente positiva. Si tratta di vedere se $\delta \geq \sqrt{2/3}$. Agendo su v , variando massa e V_0 sarà sempre possibile aumentare v in modo che δ risulti come chiesto. Perciò $V(x)$ circoscrive una buca che ammette un solo stato legato, ma V non ammette stati legati. Come volevamo.

Nella risposta alla parte (i) abbiamo voluto utilizzare un potenziale che andasse a 0 all'infinito. D'altra parte tutto l'esercizio resta valido per qualunque andamento non negativo all'infinito. Allora, come controesempio avremmo potuto utilizzare, molto più semplicemente una buca semi-infinita che non ammettesse alcuno stato legato. Se denotiamo con U_0 la profondità della buca semi-infinita e con b la sua larghezza, essa non ammette stati legati se

$$\frac{\hbar^2 \pi^2}{8mb^2} \geq U_0$$

La buca rettangolare iscritta (larghezza b e profondità U_0) è allora tale che

$$\frac{\hbar^2 \pi^2}{2mb^2} \geq \frac{\hbar^2 \pi^2}{8mb^2} \geq U_0$$

- perciò ammette un solo stato legato.

Esercizio I.23
(problema 1,
13.07.2001)

Le autofunzioni relative alla hamiltoniana di una particella di massa m in una dimensione soddisfano l'equazione di Schrödinger

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right) \psi(x) = \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x), \quad U(x) \doteq \frac{2m}{\hbar^2} V(x)$$

con $V(x)$ non noto. Si sa invece che le funzioni

$$\psi_k(x) = \frac{ika - \tanh(x/a)}{ika + 1} \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}}, \quad k > 0, \quad a > 0$$

sono autofunzioni della hamiltoniana H della particella.

- (i) Determinare i comportamenti asintotici di $\psi_k(x)$ per $x \rightarrow \pm\infty$, calcolare i coefficienti di riflessione e di trasmissione.

- (ii) Determinare il potenziale $V(x)$ e dire se ammette stati legati.
 (iii) Mostrare che $\psi_{-k}(x)$ è autofunzione di H relativa al medesimo autovalore di $\psi_k(x)$.
 (iv) Mostrare che

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dk \psi_k(x) \psi_k^*(y) = \delta(x-y) - \mathcal{E}(x,y)$$

dove $\mathcal{E}(x,y) \neq 0$. Cosa se ne deduce circa la completezza del set $\{\psi_k | k \in \mathbb{R}\}$?

- (v) Determinare la forma esplicita di $\mathcal{E}(x,y)$ ed inferire il numero esatto di stati legati ammessi da H .

Per eseguire gli ultimi due punti si usino le seguenti formule

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{2\pi} e^{ip\xi} \frac{\alpha + \beta p}{p^2 + 1} &= \frac{1}{2} [\theta(\xi) e^{-\xi} (\alpha + i\beta) + \theta(-\xi) e^{\xi} (\alpha - i\beta)] \\ \cosh(x \pm y) &= \cosh x \cosh y \pm \sinh x \sinh y \\ \sinh(x \pm y) &= \sinh x \cosh y \pm \cosh x \sinh y \end{aligned}$$

Risoluzione

Ancora un esercizio molto difficile. Stavolta, però, conviene attenersi scrupolosamente al testo perché è guidato.

Per $x \rightarrow \pm\infty$ si ha, rispettivamente

$$\begin{aligned} \psi_k(x) &\rightarrow \frac{ika - 1}{ika + 1} \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}} \\ \psi_k(x) &\rightarrow \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}} \end{aligned}$$

da cui il coefficiente di trasmissione vale 1 e quello di riflessione 0, perciò si ha trasmissione assoluta per ogni k .

Siccome a $-\infty$ la funzione d'onda ha l'aspetto di una e^{ikx} , posto $V(-\infty) = 0$, si ha $2mE/\hbar^2 = k^2$.

Cominciamo col calcolare la derivata seconda dello stato ψ_k :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \psi_k(x) &= ik\psi_k(x) - \frac{e^{ikx}}{(ika + 1)a\sqrt{2\pi}} (1 - \tanh^2(x/a)) \\ \frac{d^2}{dx^2} \psi_k(x) &= ik \left[ik\psi_k(x) - \frac{e^{ikx}}{(ika + 1)a\sqrt{2\pi}} (1 - \tanh^2(x/a)) \right] + \\ &\quad - ik \frac{e^{ikx}}{(ika + 1)a\sqrt{2\pi}} (1 - \tanh^2(x/a)) + \\ &\quad + \frac{2e^{ikx}}{(ika + 1)a^2\sqrt{2\pi}} \tanh(x/a) (1 - \tanh^2(x/a)) \end{aligned}$$

sviluppando il secondo membro troviamo

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2} \psi_k(x) &= -k^2 \psi_k(x) + \frac{2e^{ikx}}{(ika + 1)a\sqrt{2\pi}} (1 - \tanh^2(x/a)) \left[ik - \frac{1}{a} \tanh(x/a) \right] = \\ &= -k^2 \psi_k(x) - \frac{2e^{ikx}}{(ika + 1)a^2\sqrt{2\pi}} (1 - \tanh^2(x/a)) [ika - \tanh(x/a)] = \\ &= -k^2 \psi_k(x) - \frac{2}{a^2} (1 - \tanh^2(x/a)) \psi_k(x) \end{aligned}$$

Sostituendo nell'equazione di Schrödinger

$$k^2 \psi_k(x) + \frac{2}{a^2} (1 - \tanh^2(x/a)) \psi_k(x) + U(x) \psi_k(x) = k^2 \psi_k(x)$$

sicché

$$U(x) = -\frac{2}{a^2} (1 - \tanh^2(x/a)) = -\frac{2}{a^2} \frac{1}{\cosh^2(x/a)}$$

Dunque,

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{ma^2} \frac{1}{\cosh^2(x/a)}$$

Il potenziale è negativo e infinitesimo all'infinito (come doveva, viste le forme asintotiche delle autofunzioni a energia positiva), perciò ammette almeno uno stato legato.

Vediamo adesso che ψ_{-k} è autosoluzione all'autovalore $\hbar^2 k^2/2m$. Come mostrato

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_{-k} = -k^2 \psi_{-k}(x) - \frac{2}{a^2} (1 - \tanh^2(x/a)) \psi_{-k}(x)$$

Perciò, posto $k \doteq -k$, abbiamo

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_{-k} = -k^2 \psi_{-k}(x) - \frac{2}{a^2} (1 - \tanh^2(x/a)) \psi_{-k}(x)$$

e dunque sostituendo nell'equazione di Schrödinger

$$-\frac{d^2}{dx^2} \psi_{-k} + U(x) \psi_{-k} = k^2 \psi_{-k}(x)$$

come si voleva.

Siccome ψ_k e ψ_{-k} sono linearmente indipendenti, esse generano l'autospazio $E(\hbar^2 k^2/2m, H)$ visto che esso è due volte degenere.

Se il sistema non ammettesse autovalori discreti, il sistema $\{\psi_k | k \in \mathbb{R}\}$ sarebbe completo come set di autofunzioni per una osservabile. Se invece questo non fosse vero, allora al sistema di prima dovremmo aggiungere n funzioni $|1\rangle, \dots, |n\rangle$ in L^2 autovettori di H ad energie negative. Se $|x\rangle$ è autovettore della posizione all'autovalore $x \in \mathbb{R}$ deve risultare

$$\langle x | y \rangle = \delta(x - y)$$

Sfruttando la completezza del set $\{|k\rangle\} \cup \{|n\rangle\}$ abbiamo

$$\langle x | y \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dk \langle x | k \rangle \langle k | y \rangle + \sum_{i=1}^n \langle x | n_i \rangle \langle n_i | y \rangle = \delta(x - y)$$

D'altra parte

$$\langle x | k \rangle = \psi_k(x); \quad \langle k | y \rangle = \psi_k^*(y);$$

e posto

$$\sum_{i=1}^n \langle x | n_i \rangle \langle n_i | y \rangle \doteq \mathcal{E}(x, y)$$

abbiamo

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dk \psi_k(x) \psi_k^*(y) = \delta(x - y) - \mathcal{E}(x, y).$$

Perciò dal fatto che $\mathcal{E} \neq 0$ si deduce che il set $\{|k\rangle\}$ non è completo.

Si tratta ora di calcolare

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dk \psi_k(x) \psi_k^*(y) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ik(x-y)} \frac{ika - \tanh(x/a)}{ika + 1} \frac{-ika - \tanh(y/a)}{-ika + 1}$$

d'altronde

$$\frac{ika - \tanh(x/a)}{ika + 1} \frac{ika + \tanh(y/a)}{-ika + 1} = \frac{k^2 a^2 + ika [\tanh(x/a) - \tanh(y/a)] + \tanh(x/a) \tanh(y/a)}{1 + k^2 a^2}$$

riscrivendo il tutto in termini di seni e coseni iperbolici troviamo

$$\frac{k^2 a^2 \cosh(x/a) \cosh(y/a) + ika [\sinh(x/a) \cosh(y/a) - \sinh(y/a) \cosh(x/a)] + \sinh(x/a) \sinh(y/a)}{\cosh(x/a) \cosh(y/a) 1 + k^2 a^2}$$

usando le formule di addizione e un po' di algebra

$$\frac{(1 + k^2 a^2) \cosh(x/a) \cosh(y/a) + ika \sinh \xi - \cosh \xi}{\cosh(x/a) \cosh(y/a) (1 + k^2 a^2)} = 1 + \frac{ika \sinh \xi - \cosh \xi}{\cosh(x/a) \cosh(y/a) (1 + k^2 a^2)},$$

dove $\xi \doteq x - y/a$. Ne segue che l'integrale si spezza in due termini

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ik(x-y)} + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ik(x-y)} \frac{ika \sinh \xi - \cosh \xi}{\cosh(x/a) \cosh(y/a) (1 + k^2 a^2)}$$

Il primo addendo reca la $\delta(x - y)$ mentre il secondo addendo si calcola in termini dell'integrale notevole del testo. Abbiamo, posto $p \doteq ka$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ik(x-y)} \frac{ika \sinh \xi - \cosh \xi}{\cosh(x/a) \cosh(y/a) (1 + k^2 a^2)} = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{2\pi} e^{ip\xi} \frac{pi \sinh \xi - \cosh \xi}{\cosh(x/a) \cosh(y/a) (1 + p^2)}$$

che porta, a parte il fattore $1/(2a)$

$$\begin{aligned} & -\theta(\xi) e^{-\xi} \left(\frac{\cosh(\xi)}{\cosh(x/a) \cosh(y/a)} + \frac{\sinh(\xi)}{\cosh(x/a) \cosh(y/a)} \right) + \\ & +\theta(-\xi) e^{\xi} \left(-\frac{\cosh(\xi)}{\cosh(x/a) \cosh(y/a)} + \frac{\sinh(\xi)}{\cosh(x/a) \cosh(y/a)} \right) \end{aligned}$$

Quando $\xi > 0$ abbiamo

$$e^{-\xi} \left(\frac{\cosh(\xi)}{\cosh(x/a) \cosh(y/a)} + \frac{\sinh(\xi)}{\cosh(x/a) \cosh(y/a)} \right) = \frac{1}{\cosh(x/a) \cosh(y/a)}$$

e analogamente quando $\xi < 0$. In definitiva

$$\mathcal{E}(x, y) = \frac{1}{\cosh(x/a) \cosh(y/a)} = \sum_{i=1}^n \langle x | n \rangle \langle n | y \rangle$$

se chiamiamo $\varphi_n(x) = \langle x | n \rangle$ la funzione d'onda in RS dello stato legato n -esimo, abbiamo

$$\frac{1}{\cosh(x/a) \cosh(y/a)} = \sum_{i=1}^n \varphi_n(x) \varphi_n(y)$$

da cui $n = 1$ e

$$\varphi_1(x) = \frac{1}{\cosh(x/a)}.$$

Sostituendo nell'equazione di Schrödinger (il testo comunque non lo richiede) si trova

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{2ma^2}.$$

■

Momento angolare e moto in campo centrale

In questo capitolo si affrontano problemi relativi al formalismo del momento angolare nella meccanica quantistica. Si richiede la conoscenza della teoria del momento angolare e delle simmetrie.

Esercizio II.1 Si consideri $\psi_{\ell m}$, autostato simultaneo di L^2 , all'autovalore $\ell(\ell+1)$, e di L_z all'autovalore m . Calcolare valor medio e fluttuazione media della proiezione del momento angolare sul versore \mathbf{n} sullo stato $\psi_{\ell m}$, se questo forma un angolo pari ad α con l'asse z .

Risoluzione Si tratta di calcolare

$$\langle \psi_{\ell m}, \mathbf{L} \cdot \mathbf{n} \psi_{\ell m} \rangle = \sum_{i=1}^3 n_i \langle \psi_{\ell m}, L_i \psi_{\ell m} \rangle$$

D'altra parte

$$\langle \psi_{\ell m}, L_3 \psi_{\ell m} \rangle = m$$

mentre per $i = 1$ o $i = 2$ si può scrivere L_i come combinazione lineare di L_+ ed L_- di modo che,

$$\langle \psi_{\ell m}, L_i \psi_{\ell m} \rangle = a \langle \psi_{\ell m}, L_+ \psi_{\ell m} \rangle + b \langle \psi_{\ell m}, L_- \psi_{\ell m} \rangle = 0$$

perché, in ogni caso $L_{\pm} \psi_{\ell m}$ è ortogonale a $\psi_{\ell m}$. Infine,

$$\langle L_n \rangle = \langle \psi_{\ell m}, \mathbf{L} \cdot \mathbf{n} \psi_{\ell m} \rangle = m \cos \alpha$$

Andiamo a calcolare la fluttuazione

$$\langle L_n^2 \rangle = n_i n_j \langle \psi_{\ell m}, L_i L_j \psi_{\ell m} \rangle = n_i n_j \langle L_i \psi_{\ell m}, L_j \psi_{\ell m} \rangle$$

I termini in cui compaiono L_3 e L_1 o L_2 recano una combinazione di L_+ ed L_- applicati a $\psi_{\ell m}$ e moltiplicati scalarmente per $\psi_{\ell m}$ e quindi portano contributo nullo. I termini in cui compaiono contemporaneamente L_1 ed L_2 si annullano, come si verifica facilmente facendo ancora uso degli operatori di salita e discesa. Vediamo i termini "diagonali", per $i = 1$ o 2

$$\begin{aligned} \langle (aL_+ + bL_-) \psi_{\ell m}, (aL_+ + bL_-) \psi_{\ell m} \rangle &= |a|^2 (\ell(\ell+1) - m^2 - m) + |b|^2 (\ell(\ell+1) - m^2 + m) = \\ &= \frac{1}{2} [\ell(\ell+1) - m^2] \end{aligned}$$

se $|m| \neq \ell$, altrimenti il contributo è $1/4$.

Infine,

$$\langle L_3 \psi_{\ell m}, L_3 \psi_{\ell m} \rangle = m^2$$

Il risultato è

$$\langle L_n^2 \rangle = m^2 \cos^2 \theta + \frac{1}{2} [\ell(\ell+1) - m^2] \sin^2 \theta$$

infine

$$(\Delta L_n)^2 = \frac{1}{2} [\ell(\ell + 1) - m^2] \sin^2 \theta$$

■

Spin. Particelle identiche

I requisiti per gli esercizi raccolti in questo capitolo sono il momento angolare, il formalismo dello spin $1/2$, il postulato di spin e statistica e le sue conseguenze.

Esercizio III.1 Per una particella di spin $s = 1/2$ cercare le funzioni di spin ψ_{s_i} ($i \in J_3$) descrittive gli stati della particella aventi una determinata proiezione dello spin sugli assi x, y, z del sistema coordinato.

Risoluzione Si tratta di determinare, in rappresentazione delle coordinate, gli autostati di s_1, s_2 e s_3 . Si tratta di operatori su \mathbb{C}^2 aventi come autovalori $1/2$ e $-1/2$ (che corrispondono alle due possibili proiezioni determinate dello spin sull'asse i). Preso s_i e detti $\chi_{i,+}$ e $\chi_{i,-}$ i suoi autovettori, si ha

$$\psi_{s_i, \pm 1/2} = \psi(\mathbf{q}) \otimes \chi_{i, \pm}$$

Dobbiamo perciò soltanto calcolare gli autovettori degli operatori s_i :

$$s_i \chi_{i, \pm} = \pm \frac{1}{2} \chi_{i, \pm} \iff \sigma_i \chi_{i, \pm} = \pm \chi_{i, \pm}$$

dove σ_i sono le ben note matrici di Pauli.

Asse x . Abbiamo

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \iff \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

da cui

$$b = \pm a$$

perciò, normalizzando

$$\chi_{1, \pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}$$

Asse y . Abbiamo

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \iff \begin{pmatrix} -ib \\ ia \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

da cui

$$b = \pm ia$$

perciò, normalizzando

$$\chi_{2, \pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix}$$

Asse z . Abbiamo

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

da cui si ha subito che

$$\chi_{3,+} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \chi_{3,-} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

■

Esercizio III.2 Determinare l'operatore s_n di proiezione dello spin lungo la direzione individuata dal versore \mathbf{n} . Calcolare, inoltre, il valore medio di s_n sugli autostati di s_z e la probabilità di ottenere i valori $\pm 1/2$ misurando s_n sugli autostati di s_z .

Risoluzione Consideriamo la rotazione γ che porta l'asse z a coincidere con il versore \mathbf{n} . Per effetto della rotazione γ l'osservabile \mathbf{s}' (avente come terza componente s_n), diventa $\mathbf{s} = (s_1, s_2, s_3)$ secondo la legge

$$\mathbf{s} = U^+(\gamma) \mathbf{s}' U(\gamma) = \gamma \mathbf{s}'$$

perciò

$$\mathbf{s}' = \gamma^{-1} \mathbf{s} = \gamma^t \mathbf{s}$$

Perciò

$$s_n = \gamma_{3i}^t s_i = \gamma_{i3} s_i$$

La colonna 3 di γ rappresenta il trasformato del versore dell'asse z , cioè \mathbf{n} , perciò

$$s_n = \mathbf{s} \cdot \mathbf{n} = n_1 s_1 + n_2 s_2 + n_3 s_3$$

Se \mathbf{n} è individuato dall'azimuth φ e dalla colatitudine θ , si ha

$$\begin{aligned} s_n &= \frac{1}{2} [\sin \theta \cos \varphi \sigma_1 + \sin \theta \sin \varphi \sigma_2 + \cos \theta \sigma_3] = \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta (\cos \varphi - i \sin \varphi) \\ \sin \theta (\cos \varphi + i \sin \varphi) & -\cos \theta \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Andiamo a calcolare il valore medio di s_n su $\chi_{3,+}$ e $\chi_{3,-}$. Su $\chi_{3,+}$, abbiamo

$$\begin{aligned} \langle s_n \rangle &= (\chi_{3,+}, s_n \chi_{3,+}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta e^{i\varphi} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \cos \theta \end{aligned}$$

Su $\chi_{3,-}$, abbiamo

$$\begin{aligned} \langle s_n \rangle &= (\chi_{3,-}, s_n \chi_{3,-}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sin \theta e^{-i\varphi} \\ -\cos \theta \end{pmatrix} = -\frac{1}{2} \cos \theta \end{aligned}$$

Infine, andiamo a calcolare la probabilità di ottenere $\pm 1/2$ per la misura di s_n su un autostato di s_z . Data una qualsiasi osservabile avente gli autovettori ψ_n agli autovalori a_n si ha

$$\langle A \rangle = (\psi, A\psi) = \sum_n P_{a_n}^A(\psi) a_n = \sum_n |(\psi_n, \psi)|^2 a_n$$

perciò

$$\begin{aligned} \langle s_n \rangle &= \frac{1}{2} P_{1/2}^{s_n}(\chi_{3,+}) - \frac{1}{2} (1 - P_{1/2}^{s_n}(\chi_{3,+})) = \\ &= P_{1/2}^{s_n}(\chi_{3,+}) - \frac{1}{2} \end{aligned}$$

dunque

$$\begin{aligned} P_{1/2}^{s_n}(\chi_{3,+}) &= \frac{1}{2}(1 + \cos \theta) = \cos^2 \theta \\ P_{1/2}^{s_n}(\chi_{3,-}) &= \frac{1}{2}(1 - \cos \theta) = \sin^2 \theta \end{aligned}$$

Esercizio III.3 Si consideri un sistema formato da due particelle identiche di spin s

- (i) si dimostri che lo spazio \mathcal{H} si decompone nella somma diretta dell'insieme dei vettori simmetrici per scambio delle particelle e dell'insieme dei vettori antisimmetrici;
- (ii) si dimostri che uno stato con spin totale, S^2 , definito è o simmetrico o antisimmetrico;
- (iii) considerando un autovettore all'autovalore $S(S+1)$ dello spin totale S^2 , si indichi la relazione tra le proprietà di simmetria di tale autovettore e il numero quantico S .

Risoluzione Dimostriamo (i). In primo luogo, il gruppo delle permutazioni delle due particelle, \mathcal{S}_2 , si riduce all'insieme $\{\mathbb{I}, P\}$ dove P è l'operatore che scambia le due particelle. Si ha che P è unitario e involutivo, cioè $P^2 = \mathbb{I}$. In particolare, $PP^+ = P^+P = P^2$, da cui $P = P^+$. Il fatto che P sia un'involuzione implica che i soli possibili autovalori di P sono ± 1 .

Fissiamo un s.o.n.c. simmetrico in $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, cioè un insieme di vettori del tipo

$$\psi_{a_1} \otimes \psi_{a_2}$$

dove A è un set completo di osservabili compatibili in \mathcal{H}_i e $a_i \in \text{Sp } A$. Allora

$$P\psi_{a_1} \otimes \psi_{a_2} = \psi_{a_2} \otimes \psi_{a_1}$$

perciò, si ha

$$\psi_{a_1 a_2 \pm} \doteq \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{a_1} \otimes \psi_{a_2} \pm \psi_{a_2} \otimes \psi_{a_1}) \in E(\pm 1, P)$$

e dunque gli autospazi di P sono non vuoti. Siccome P è autoaggiunto, $E(1, P)$ e $E(-1, P)$ sono sottospazi ortogonali. Ora, banalmente vale

$$E(1, P) \oplus E(-1, P) \supset \text{Span} \langle \psi_{a_1 a_2 +} \rangle \cup \text{Span} \langle \psi_{a_1 a_2 -} \rangle = \text{Span} \langle \psi_{a_1 a_2} \rangle = \mathcal{H}$$

da cui \mathcal{H} è somma diretta dello spazio dei vettori simmetrici e dello spazio dei vettori antisimmetrici.

Rispondiamo a (ii) e (iii). A questo scopo blocchiamo una volta per tutte la parte orbitale dei nostri vettori, di modo da considerare soltanto $\mathcal{H}_{\text{spin}}$.

Ora, P commuta con \mathbf{S} , perciò commuta con S_+ ed S_- dunque, se un autovettore di S^2 ha parità per scambio definita, tutti i vettori del relativo autospazio, $E(S, S^2)$, hanno la stessa parità dell'autovettore di partenza. Per completare la dimostrazione, basta dimostrare che in ogni $E(S, S^2)$ c'è un vettore a parità definita. Sia infatti $\psi \in E(S, S^2)$ un vettore normalizzato, allora, per (i),

$$\psi = \psi_+ + \psi_-$$

dove ψ_+ è simmetrico e ψ_- è antisimmetrico. Per assurdo, ψ_+ e ψ_- siano entrambi non nulli. Allora

$$\begin{aligned} S^2(\psi_+ + \psi_-) &= S(S+1)(\psi_+ + \psi_-) \\ S^2 P\psi &= S^2(\psi_+ - \psi_-) = PS^2\psi = S(S+1)(\psi_+ - \psi_-) \end{aligned}$$

Ne viene che

$$\begin{aligned} S^2\psi_+ &= S(S+1)\psi_+ \\ S^2\psi_- &= S(S+1)\psi_- \end{aligned}$$

Ma, allora, visto che $\psi_+, \psi_- \in E(S, S^2)$, $E(S, S^2)$ deve essere composto da vettori simultaneamente simmetrici ed antisimmetrici, il che è assurdo.

Resta da mostrare (iii). Date due particelle di spin totale s , per il teorema di composizione

dei momenti angolari, è possibile costruire stati di spin totale $S = 0, \dots, 2s$. Dato che le permutazioni commutano con \mathbf{S} , commutano con S_+ e S_- , perciò le proprietà di simmetria di uno stato non dipendono da S_z , perciò, se uno stato appartenente all'autospazio di S^2 relativo a S è simmetrico (risp. antisimmetrico), si avrà che l'intero autospazio è simmetrico (risp. antisimmetrico),

Fissiamo s pari. Lo stato di spin $S = 2s$ è caratterizzato dal vettore $|s s\rangle$ e quindi è simmetrico. I vettori $|s-1 s\rangle$ e $|s s-1\rangle$ hanno $S'_z = 2s-1$ e, nello spazio da loro generato, troviamo

$$S_- |s s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|s-1 s\rangle + |s s-1\rangle]$$

che è banalmente simmetrico. Il vettore ad esso ortogonale nello spazio dei vettori con $S'_z = 2s-1$ ha, come noto dalla teoria della composizione dei momenti angolare, spin totale $S = 2s-1$, visto che esso è

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [|s-1 s\rangle - |s s-1\rangle]$$

abbiamo che gli stati con $S = 2s-1$ sono antisimmetrici.

Una base per lo spazio dei vettori con $S'_z = 2s-2$ è

$$|s-2 s\rangle, |s-1 s-1\rangle, |s s-2\rangle$$

Il vettore con $S = 2s$ è

$$\frac{1}{\sqrt{6}} [|s-2 s\rangle + 2|s-1 s-1\rangle + |s s-2\rangle]$$

il vettore con $S = 2s-1$ è

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [|s-2 s\rangle - |s s-2\rangle]$$

il vettore ad essi ortogonale, che ha dunque $S = 2s-2$, è

$$\frac{1}{\sqrt{3}} [|s-2 s\rangle - |s-1 s-1\rangle + |s s-2\rangle]$$

e risulta simmetrico.

Appare allora evidente la congettura che se S è pari allora l'autospazio è simmetrico, altrimenti antisimmetrico. Mostriamolo per induzione su $2s-S$. In generale, a ogni passo dell'algoritmo accennato sopra, ci troviamo a determinare un vettore in uno spazio n -dimensionale ortogonale a $n-1$ altri vettori di simmetria ben definita: nel passare, infatti, nel passare da S a $S-1$, ci muoviamo nell'autospazio di $S'_z = S-1$ che è $n \doteq 2s-S+1$ -dimensionale. Se S è pari, allora $n = 2k+1$ e gli $n-1 = 2k$ vettori dati sono suddivisi in k vettori simmetrici e k antisimmetrici, dal momento che il vettore corrispondente a $S = 2s$ è simmetrico. A questo punto, nella base

$$|s-n-1, s\rangle; |s-n, s-1\rangle; \dots; |s, s-n-1\rangle$$

abbiamo k vettori a n componenti con le componenti a due a due eguali, (a, b, \dots, b, a) e k con le componenti a due a due opposte $(a, b, \dots, -b, -a)$. Dobbiamo trovare il vettore ortogonale a ciascuno di essi. Da un semplice conteggio, abbiamo che lo spazio n -dimensionale è generato da $k+1$ vettori simmetrici e k antisimmetrici indipendenti, perciò, inevitabilmente il vettore cercato è simmetrico e S pari è formato da stati simmetrici.

Si procede analogamente se S è dispari: in questo caso, $n = 2k$ e si hanno a disposizione k vettori simmetrici e $k-1$ antisimmetrici. Passando alla scrittura delle componenti nella base di sopra, e notando che lo spazio n -dimensionale è generato da k vettori simmetrici e k antisimmetrici, abbiamo che il vettore cercato è antisimmetrico.

In definitiva, la parità per scambio delle variabili di spin dello stato $|S S'_z\rangle$ è $(-1)^S$, se s è intero. Se s è dispari, invece, al passo iniziale, $S = 2s$, troviamo che la parità è $(-1)^{S+1}$, e ragionando come prima, si trova che la parità è proprio $(-1)^S$.

Un esercizio del tutto simile è risolto nel seguito (problema di Menotti, 17.7.95) in maniera ■ leggermente diversa.

Esercizio III.4 Siano $\psi_{f_i}(\mathbf{x})$ le funzioni d'onda orbitali stazionarie di una particella in un campo esterno (agente solo sulle variabili orbitali). Si considerino ora due delle particelle di sopra immerse nel campo esterno detto e non interagenti. Esse abbiano entrambe spin s e si trovino in stati orbitali ai numeri quantici f_1 e f_2 .

Determinare il numero di stati indipendenti, tenuto conto dello spin, nel caso in cui le due particelle siano bosoni o fermioni. Distinguere i casi in cui f_1 e f_2 sono eguali oppure diversi.

Risoluzione Lo stato delle due particelle è descritto da vettori del tipo $\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)\chi$ dove χ è un vettore in $\mathcal{H}_{\text{spin}}$. Siccome le due particelle non interagiscono, la parte orbitale è fattorizzata e, per ipotesi, è descritta dalla sovrapposizione degli stati $\psi_{f_1}(\mathbf{x}_1)\psi_{f_2}(\mathbf{x}_2)$ e $\psi_{f_2}(\mathbf{x}_1)\psi_{f_1}(\mathbf{x}_2)$. Se $f_1 \neq f_2$ è possibile costruire due stati orbitali indipendenti, l'uno simmetrico e l'altro antisimmetrico:

$$\psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{f_1}(\mathbf{x}_1)\psi_{f_2}(\mathbf{x}_2) \pm \psi_{f_2}(\mathbf{x}_1)\psi_{f_1}(\mathbf{x}_2))$$

Se le particelle sono bosoni, allora ψ_+ si accoppia a stati di spin simmetrici, mentre ψ_- a stati di spin antisimmetrici. Viceversa, nel caso di fermioni.

Si tratta allora di calcolare il numero di stati di spin simmetrici (resp. antisimmetrici) indipendenti. In questo senso è possibile, per esempio, sfruttare i risultati dell'esercizio precedente. In quella sede abbiamo stabilito una base ortonormale per $\mathcal{H}_{\text{spin}}$ di vettori di spin totale e simmetria definiti. I vettori simmetrici sono $2(2s - 2i) + 1$ al variare di i tra 0 e s :

$$n_+ = 4 \sum_{i=0}^s (s - i) + s + 1 = 4s(s + 1) - 2s(s + 1) + (s + 1) = (2s + 1)(s + 1)$$

gli stati antisimmetrici sono, evidentemente,

$$\begin{aligned} n_- &= \dim \mathcal{H}_{\text{spin}} - n_+ = \dim \mathbb{C}^{2s+1} \otimes \mathbb{C}^{2s+1} - n_+ = (2s + 1)^2 - (2s + 1)(s + 1) = \\ &= (2s + 1)(2s + 1 - s - 1) = (2s + 1)s \end{aligned}$$

e, altrettanto ovviamente,

$$n_- = \sum_{i=0}^{s-1} 2(2s - 2i - 1) + 1 = 4s^2 - 2s(s - 1) - 2s + s = 2s^2 + s = (2s + 1)s$$

In ogni caso, tutti i $(2s + 1)^2$ stati di spin simmetrici e antisimmetrici trovati possono essere opportunamente accoppiati per ottenere stati globali simmetrici (bosoni) o antisimmetrici (fermioni), perciò in entrambi i casi (bosoni o fermioni) se $f_1 \neq f_2$, allora gli stati indipendenti sono $(2s + 1)^2$.

Se invece $f_1 = f_2$, le cose cambiano radicalmente. Infatti lo stato orbitale è giocoforza simmetrico. Perciò, se le particelle sono bosoni, si deve accoppiare lo stato orbitale agli stati simmetrici che sono $(2s + 1)(s + 1)$, mentre se le particelle sono fermioni, lo stato orbitale deve essere accoppiato a stati di spin antisimmetrici, perciò il numero di stati indipendenti che si ottengono è pari a $s(2s + 1)$.

Un altro modo per dirimere la questione senza far appello all'esercizio precedente è notare che i seguenti vettori formano una base di $\mathcal{H}_{\text{spin}}$

$$\begin{aligned} \chi_{s_z s_z}^{(+)} &= |s_z s_z\rangle \\ \chi_{s_z s'_z}^{(+)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|s_z s'_z\rangle + |s'_z s_z\rangle), \quad s_z \neq s'_z \\ \chi_{s_z s'_z}^{(-)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|s_z s'_z\rangle - |s'_z s_z\rangle), \quad s_z \neq s'_z \end{aligned}$$

i vettori con la soprascritta + sono simmetrici e i vettori con la soprascritta - sono antisimmetrici. Evidentemente essi formano una base (sono combinazioni opportune dei vettori di una base).

Contiamo i vettori della seconda o della terza riga (sono in numero eguale). Fissiamo $s_z = s$ ora, per formare vettori distinti, possiamo scegliere $s'_z < s_z$, perciò sono possibili $2s$ scelte.

Procedendo così i vettori sono

$$2s + (2s - 1) + \dots + 1 = \frac{2s(2s + 1)}{2} = s(2s + 1)$$

perciò i vettori antisimmetrici indipendenti sono $n_- = 2s(s + 1)$ e quelli simmetrici sono $n_+ = (2s + 1)^2 - s(s + 1) = (s + 1)(2s + 1)$, oppure

$$n_+ = 2s + 1 + s(2s + 1) = (s + 1)(2s + 1).$$

■

Esercizio III.5
(operatore $\sigma \cdot \mathbf{n}$)

Determinare autovalori e autovettori dell'operatore $\sigma \cdot \mathbf{n}$, dove \mathbf{n} è un versore e σ rappresenta il vettore delle matrici di Pauli per particelle di spin $1/2$.

Risoluzione Cominciamo con il vedere che $\sigma \cdot \mathbf{n}$ ammette gli autovalori ± 1 . Abbiamo

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\sigma \cdot \mathbf{n}) &= 0 \\ \det(\sigma \cdot \mathbf{n}) &= -|\mathbf{n}|^2 = -1 \end{aligned}$$

sicché l'equazione secolare per gli autovalori di $\sigma \cdot \mathbf{n}$ risulta

$$\begin{aligned} -\lambda^2 + \text{Tr}(\sigma \cdot \mathbf{n})\lambda - \det(\sigma \cdot \mathbf{n}) &= 0 \\ -\lambda^2 + 1 &= 0 \end{aligned}$$

■ da cui $\lambda = \pm 1$.

Dimostrazione Passiamo agli autovettori. Anzitutto i due autospazi, $E(\pm 1, \sigma \cdot \mathbf{n})$ sono non degeneri, ortogonali e danno l'intero spazio in somma diretta. Perciò se χ_+ e χ_- sono i rispettivi autovettori normalizzati, per ogni spinore χ si ha

$$\chi = (\chi_+, \chi) \chi_+ + (\chi_-, \chi) \chi_- = P_+ \chi + P_- \chi$$

Calcoliamo i due proiettori P_+ e P_- . Abbiamo

$$\begin{aligned} (\sigma \cdot \mathbf{n}) \chi &= P_+ \chi - P_- \chi \\ \chi &= P_+ \chi + P_- \chi \end{aligned}$$

da cui

$$P_{\pm} = \frac{\mathbb{I} \pm \sigma \cdot \mathbf{n}}{2}$$

Ne viene che per ottenere gli autovettori χ_{\pm} basta applicare P_{\pm} a un vettore qualsiasi e normalizzare.

$$P_{\pm} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \pm n_z & \pm(n_x - in_y) \\ \pm(n_x + in_y) & 1 \mp n_z \end{pmatrix}$$

Se applichiamo P_{\pm} allo spinore $(1, 0)$ abbiamo

$$P_{\pm}(1, 0) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \pm n_z \\ \pm(n_x + in_y) \end{pmatrix}$$

che ha norma

$$\sqrt{\frac{(1 \pm n_z)^2 + n_x^2 + n_y^2}{4}} = \sqrt{\frac{2 \pm 2n_z}{4}} = \sqrt{\frac{1 \pm n_z}{2}}$$

In definitiva,

$$(c.v.d.) \quad \chi_{\pm} = \frac{1}{2\sqrt{(1 \pm n_z)/2}} \begin{pmatrix} 1 \pm n_z \\ \pm(n_x + in_y) \end{pmatrix}$$

Esercizio III.6 Le funzioni d'onda normalizzate $\psi_{f_i}(\xi)$ descrivono gli stati indipendenti di una particella in un campo esterno. Siano $\xi = (\mathbf{q}, \sigma)$ e f_i la collezione dei numeri quantici di un sistema completo di osservabili compatibili. Si considerino tre bosoni nel campo esterno detto in uno

stato descritto dai numeri quantici f_1, f_2, f_3 . Si scrivano le funzioni d'onda normalizzate del sistema in queste ipotesi.

Risoluzione Siccome le particelle non interagiscono, lo stato del sistema sarà descritto da una sovrapposizione dei vettori $\psi_{f_i}(\xi_1) \psi_{f_j}(\xi_2) \psi_{f_k}(\xi_3)$, $i, j, k \in J_3$. Lo stato ottenuto dovrà risultare simmetrico, dal momento che si ha a che fare con dei bosoni.

Se i numeri quantici f_1, f_2 e f_3 sono tutti uguali, l'unico stato che si ha è automaticamente simmetrico. Nel caso in cui due siano uguali, per fissare le idee sia $f_1 = f_2 \doteq f$, si deve simmetrizzare lo stato

$$\alpha \psi_f(\xi_1) \psi_f(\xi_2) \psi_{f_3}(\xi_3) + \beta \psi_f(\xi_1) \psi_{f_3}(\xi_2) \psi_f(\xi_3) + \gamma \psi_{f_3}(\xi_1) \psi_f(\xi_2) \psi_f(\xi_3)$$

affinché lo stato sia invariante per ognuna delle $3!$ permutazioni di \mathcal{S}_3 si deve scegliere $\alpha = \beta = \gamma$ e lo stato risultante è

$$\frac{1}{\sqrt{3}} (\psi_f(\xi_1) \psi_f(\xi_2) \psi_{f_3}(\xi_3) + \psi_f(\xi_1) \psi_{f_3}(\xi_2) \psi_f(\xi_3) + \psi_{f_3}(\xi_1) \psi_f(\xi_2) \psi_f(\xi_3))$$

Infine, nel caso in cui i tre numeri quantici siano distinti si ha, con ovvie notazioni,

$$\frac{1}{\sqrt{6}} ((f_1 f_2 f_3) + (f_1 f_3 f_2) + (f_2 f_1 f_3) + (f_2 f_3 f_1) + (f_3 f_1 f_2) + (f_3 f_2 f_1)).$$

Esercizio III.7 Tre bosoni identici di spin $s = 0$ non interagenti si trovano immersi in un campo esterno centrale. Come è noto, le variabili orbitali di singola particella ammettono come set completo di osservabili compatibili l'energia, il momento angolare e il suo quadrato.

(i) Si consideri lo stato in cui le tre particelle hanno tutte gli stessi numeri quantici orbitali con $l = 1$. Calcolare il numero di stati indipendenti del sistema nelle condizioni descritte.

(ii) Si mostri che il sistema non potrà mai trovarsi in uno stato caratterizzato da $L = 0$.

Risoluzione Siccome lo spin delle tre particelle è nullo, un set completo di numeri quantici è dato da n , l ed m . Fissati n e l , ciascuna particella occuperà stati appartenenti all'autospazio $E(n, l)$, cioè dati dalla sovrapposizione dei vettori con m diversi, $m = -l, \dots, l$. Il sistema si troverà dunque a descrivere lo spazio $E(n, l) \otimes E(n, l) \otimes E(n, l)$. Una base di questo spazio è data da

$$|n l m\rangle_1 |n l m'\rangle_2 |n l m''\rangle_3 \doteq |m m' m''\rangle$$

con $m, m', m'' = -l, \dots, l$. Nel caso $l = 1$ lo spazio considerato è 27-dimensionale. In tale spazio dobbiamo isolare tutti i vettori simmetrici indipendenti. Si tratta di calcolare le diverse combinazioni di (m, m', m'') che, per simmetrizzazione, danno luogo a vettori indipendenti. Il numero di tali combinazioni è pari al numero di aggruppamenti a meno di permutazioni di 3 oggetti distinti, nei quali siano consentite le ripetizioni. Tale numero è, posto $n = k = 3$, il numero delle combinazioni con ripetizione di n elementi a k a k :

$$\binom{n+k-1}{k} = \frac{(n+k-1)!}{k!(n-1)!} = \frac{5!}{3!2!} = \frac{5 \cdot 4}{2} = 10$$

Rispondiamo al quesito (ii). Le dieci combinazioni sono

$$(1, 1, 1) \quad (1, 1, 0) \quad (1, 1, -1) \quad (1, 0, 0) \quad (1, 0, -1) \quad (1, -1, -1) \\ (0, 0, 0) \quad (0, 0, -1) \quad (0, -1, -1) \quad (-1, -1, -1)$$

I nostri stati sono allora i simmetrizzati di quelli nella lista di sopra e, nell'autospazio considerato, il sottospazio S cercato dei vettori simmetrici è 10-dimensionale e ha per base i simmetrizzati dei vettori detti (si noti che tali vettori simmetrizzati sono tutti ortogonali). Ora, nel comporre i tre momenti angolari $l = 1$, possiamo ottenere un momento angolare totale $L = 3, 2, 1, 0$. Nel sottospazio dei vettori simmetrici definito sopra, l'autospazio $L = 3$ è presente, infatti, il simmetrizzato di $(1, 1, 1)$ ha $M = 3$ e L_+ si annulla su di esso. Perciò, visto che se un autovettore di L^2 appartiene a una determinata classe di simmetria, tutto l'autospazio all'autovalore corrispondente è contenuto nella classe di

simmetria dell'autovettore, in S è contenuto tutto $L = 3$ (fissati gli altri autovalori delle osservabili compatibili). Perciò in S sono presenti dei vettori con $M = 0$, $M = 1$ e $M = 2$ che provengono dall'autospazio a $L = 3$. D'altra parte, dato che in S c'è solo un vettore indipendente con $M = 2$, questo significa che $L = 2$ non appartiene a S , altrimenti, nella base di S avremmo dovuto trovare due vettori indipendenti con $M = 2$. Con $M = 1$, abbiamo due stati indipendenti, perciò anche l'autospazio a $L = 1$ è contenuto in S . Infatti, se così non fosse, i due vettori con $M = 1$ dovrebbero provenire entrambi dall'autospazio con $L = 3$ che ne contiene solo uno indipendente.

Infine, si hanno due stati con $M = 0$ nella base di S . Questo implica che l'autospazio $L = 0$ non è contenuto in S , altrimenti avremmo dovuto trovare tre vettori con $M = 0$ in una base di S , visto che i vettori a $M = 0$ in $L = 3, 1, 0$ sono ortogonali. ■

Esercizio III.8 Si considerino due particelle identiche. Se $\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \langle \mathbf{x}_2 \mathbf{x}_1 | A \rangle$ è la funzione d'onda orbitale del sistema delle due particelle e se P è l'operatore di scambio orbitale, dimostrare che, in rappresentazione di Schrödinger,

$$P\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1)$$

Risoluzione Un set completo di osservabili compatibili per il nostro sistema è dato da $\{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2\}$. Ne viene che, per definizione,

$$P|\mathbf{x}_1 \mathbf{x}_2\rangle = |\mathbf{x}_2 \mathbf{x}_1\rangle$$

La traduzione di P in rappresentazione è l'operatore unitariamente equivalente $P' \doteq \Omega^+ P \Omega$ tale che

$$\begin{aligned} (P'\psi)(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) &= \Omega^+ P \Omega \langle \mathbf{x}'_2 \mathbf{x}'_1 | A \rangle = \Omega^+ P |A\rangle = \Omega^+ P \int |\mathbf{x}'_1 \mathbf{x}'_2\rangle \langle \mathbf{x}'_2 \mathbf{x}'_1 | A \rangle d^3 \mathbf{x}'_1 d^3 \mathbf{x}'_2 = \\ &= \Omega^+ \int \psi(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2) |\mathbf{x}'_2 \mathbf{x}'_1\rangle d^3 \mathbf{x}'_1 d^3 \mathbf{x}'_2 = \int \psi(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2) \langle \mathbf{x}_2 \mathbf{x}_1 | \mathbf{x}'_2 \mathbf{x}'_1 \rangle d^3 \mathbf{x}'_1 d^3 \mathbf{x}'_2 = \\ &= \int \psi(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2) \delta(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}'_1) \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_2) d^3 \mathbf{x}'_1 d^3 \mathbf{x}'_2 = \psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) \end{aligned}$$

Esercizio III.9 Dire quali valori può assumere lo spin totale S di due bosoni identici di spin s su stati a momento orbitale relativo definito e pari a L . Si studi in particolare il caso in cui $s = 0$. Ripetere l'esercizio per due fermioni identici.

Risoluzione Un sistema di due particelle interagenti è separabile in modo che, in rappresentazione delle coordinate, ogni funzione d'onda orbitale è il prodotto di una funzione del centro di massa e di una del vettore relativo:

$$\Psi(\mathbf{R}_C, \mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{R}_C) \psi(\mathbf{r})$$

dove

$$\mathbf{R}_C = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2} = \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2},$$

l'ultimo passaggio discende dal fatto che le due particelle sono identiche, e

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2.$$

Sotto scambio orbitale, si ha

$$\mathbf{R}_C \mapsto \mathbf{R}_C; \mathbf{r} \mapsto -\mathbf{r}$$

perciò le proprietà di simmetria di Ψ sono confinate nella funzione ψ .

Siccome, per ipotesi, Ψ rappresenta uno stato di momento angolare relativo definito, L , si ha

$$\psi(\mathbf{r}) = R(r) \sum_{-L}^L Y_{LM}(\theta, \varphi)$$

e, visto che $P\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r})$, si ha che Ψ è simmetrico (risp. antisimmetrico) se ψ è pari (risp. dispari) per inversione spaziale.

In definitiva, la parte orbitale dello stato ha simmetria $(-1)^L$. Per quanto visto nell'esercizio III.3, la simmetria della parte di spin è invece $(-1)^S$, perciò lo stato

$${}^{2S+1}L$$

ha simmetria $(-1)^{S+L}$. Prendendo in esame dei bosoni, si ha che gli stati consentiti sono quelli per cui $S+L$ è pari. Dunque, se L è pari, gli S consentiti sono $2s, 2s-2, \dots, 0$; se L è dispari, $S = 2s-1, 2s-3, \dots, 1$.

Nel caso in cui $s = 0$, solo gli stati con L pari sono realizzabili (è un fatto importante: per esempio, una particella di spin 1 non può scindersi in due particelle con spin 0).

Per due fermioni non cambia nulla, infatti, la parità di spin è stavolta $(-1)^{S+1}$. Dunque, la parità globale è $(-1)^{L+S+1}$. $L+S+1$ deve essere dispari, perciò se L è pari, S deve essere pari, se L è dispari, S deve essere dispari. ■

Esercizio III.10
(problema
1, 17.7.1995)

Si consideri un sistema composto da due particelle non identiche di eguale spin s intero in onda $l = 0$.

- (i) Si dica quali sono i valori possibili della terza componente del momento angolare totale.
- (ii) Si consideri il sottospazio degli stati con terza componente dello spin totale pari a S'_z . Si mostri come questo sottospazio è dato dalla somma diretta di un sottospazio simmetrico e di uno antisimmetrico sotto lo scambio delle due particelle.
- (iii) Fissato S'_z , calcolare le dimensionalità dei due sottospazi (simmetrico e antisimmetrico) trovati al punto precedente.
- (iv) Si dimostri, usando il teorema di composizione dei momenti angolari, che uno stato di spin totale definito S , ha parità definita sotto scambio delle due particelle.
- (v) Si mostri iterativamente come

$$P|S S'_z\rangle = (-1)^S |S S'_z\rangle$$

- (vi) Si dica cosa cambia se s è semidispari, anziché intero.

Risoluzione

Il problema è del tutto simile all'esercizio III.3, lo risolviamo nuovamente visto che stavolta il testo è guidato. Vediamo (i). Le due particelle hanno entrambe $l = 0$, perciò, se L è il momento angolare orbitale totale, si ha $L = 0$. Adesso dobbiamo comporre 0 con due momenti s . Cioè, con ovvie notazioni,

$$0 \otimes s \otimes s = s \otimes s = 2s \oplus 2s-1 \oplus \dots \oplus 0$$

ne viene che i possibili valori che J'_z può assumere sono $-2s, -2s+1, \dots, 2s-1, 2s$.

(ii) Fissiamo S'_z e blocchiamo la parte dipendente da r della funzione d'onda orbitale. Ci si riduce a considerare l'autospazio $E(S'_z, S_z)$ in $\mathcal{H}_{\text{spin}}$. Come dimostrato nell'esercizio III.3, \mathcal{H} e $\mathcal{H}_{\text{spin}}$ si decompongono nella somma diretta di uno spazio simmetrico e di uno antisimmetrico, perciò la stessa cosa deve accadere a ogni loro sottospazio, in particolare a $E(S'_z, S_z)$.

(iii) Siccome $\mathcal{H}_{\text{spin}}$ è dato dalla somma diretta degli autospazi simultanei di S^2 e S_z , abbiamo che una base dello spazio $E(S'_z, S_z)$ è data dai vettori

$$|S = 2s S'_z\rangle, |S = 2s-1 S'_z\rangle, \dots, |S = |S'_z| S'_z\rangle$$

o, equivalentemente, dai vettori

$$|s_{1z} = s'_z, s_{2z} = s''_z\rangle$$

al variare di s'_z, s''_z tra $-2s$ e $2s$ e con $s'_z + s''_z = S'_z$. Consideriamo la seconda base che è utile per determinare la simmetria dei vettori di $E(S'_z, S_z)$. Se S'_z è dispari, allora $s'_z \neq s''_z$ e

possiamo riarrangiare la base come

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|s'_z s''_z\rangle + |s''_z s'_z\rangle)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|s'_z s''_z\rangle - |s''_z s'_z\rangle)$$

Se S'_z è pari, si devono aggiungere i vettori $|s'_z s'_z\rangle$. Questo mostra che $E(S'_z, S_z)$, come visto in (ii), si decompone in somma diretta di uno spazio simmetrico e uno antisimmetrico e che, se S'_z è pari, allora lo spazio simmetrico ha dimensione pari a quella dello spazio simmetrico più 1, $n_+ = n_- + 1$. Invece, se S'_z è dispari, allora $n_+ = n_-$.

Calcoliamo $\dim E(S'_z, S_z)$. Usiamo la prima base trovata per $E(S'_z)$, abbiamo allora che

$$\dim(E(S'_z, S_z)) = 2s - |S'_z| + 1$$

se S'_z è pari, allora

$$n_+ = s - \frac{|S'_z|}{2} + 1$$

$$n_- = s - \frac{|S'_z|}{2}$$

se S'_z è dispari, allora

$$n_+ = n_- = \frac{2s - |S'_z| + 1}{2}.$$

(iv) La parità orbitale è fissata e positiva, sicché dobbiamo concentrarci solo sullo spin. Per il teorema di composizione dei momenti angolari, in $\mathcal{H}_{\text{spin}}$ uno stato che abbia sia S^2 che S_z definiti è completamente individuato. Siccome P commuta con S^2, S_z , si ha che anche $P|S S'_z\rangle$ è ancora autovettore di S^2 e S'_z al medesimo autovalore, perciò

$$P|S S'_z\rangle = e^{i\varphi}|S S'_z\rangle$$

ma P ammette solo gli autovalori ± 1 , perciò $\varphi = 0$ o π e lo stato $|S S'_z\rangle$ è a parità definita. Adesso, visto che P commuta con gli operatori di discesa e di salita, visto che $|S S\rangle$ ha parità definita, tutti i vettori di $E(S, S^2)$ hanno la stessa parità, come si voleva dimostrare.

(v) La costruzione del vettore $|S S\rangle$ a partire dai vettori della base $|s'_z s''_z\rangle$ avviene determinando il vettore nello spazio $E(S, S_z)$ che è ortogonale ai vettori $|S' S'\rangle$ con $S' > S$. Distinguiamo i casi, S pari e S dispari.

Cominciamo da S pari. Lo spazio $E(S, S_z)$ ha dimensione $2s - S + 1$. Lo spazio dei vettori simmetrici ha dimensione $s - S/2 + 1$. Il vettore che cerchiamo $|S S\rangle$ è simmetrico o antisimmetrico ed è ortogonale ai vettori $|S' S'\rangle$ con $S' > S$, perciò li completa a una base di $E(S, S_z)$. Dunque, in base al numero degli $|S' S'\rangle$ e a n_{\pm} in $E(S, S_z)$, possiamo dire se il nostro vettore è simmetrico o meno.

Se S è pari, i vettori già trovati sono $2s - S$, quelli simmetrici sono $s - S/2$, visto che $|2s 2s\rangle$ è evidentemente simmetrico (primo passo induttivo ovvio), perciò il nostro vettore è simmetrico.

Si procede analogamente se S è dispari: i vettori simmetrici sono $(2s - S + 1)/2$, quelli trovati sono $2s - S$, quelli simmetrici sono proprio $(2s - S + 1)/2$, perciò $|S S\rangle$ è antisimmetrico.

Visto (iv), concludiamo

$$P|S S'_z\rangle = (-1)^S |S S'_z\rangle$$

(vi) Nel caso in cui s sia semidispari, cambia la risposta alla (iii) e di conseguenza alla (v). Infatti, gli stati $|s'_z s'_z\rangle$ sono possibili solo se S'_z è dispari. Dunque, si devono invertire simmetria e antisimmetria, in definitiva

$$P|S S'_z\rangle = (-1)^{S+1} |S S'_z\rangle$$

come accade, ad esempio, per due elettroni, $S = 0$ (singoletto) antisimmetrico, $S = 1$ (tripletto) simmetrico. ■

Esercizio III.11 Determinare lo spettro energetico per due bosoni identici di spin $s = 0$, interagenti secondo il potenziale $U = k(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2/2$.

Risoluzione Posto $\omega = k/m$, l'hamiltoniana del sistema è

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} + \frac{1}{2}k|\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2|^2$$

se andiamo a separare il moto relativo dal moto del centro di massa, l'hamiltoniana del moto relativo, che è quello che ci interessa, è

$$H_{\text{rel}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2|\mathbf{q}|^2$$

dove \mathbf{p} e \mathbf{q} sono le variabili canoniche relative coniugate e $\omega^2 = k/\mu = 2k/m$. Dunque,

$$H_{\text{rel}} = \sum_{i=1}^3 \frac{p_i^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 q_i^2,$$

gli autovalori sono allora

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \hbar\omega \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right)$$

e le autofunzioni sono

$$\Psi(\mathbf{q}) = \psi_{\text{osc}, n_1}(q_1) \psi_{\text{osc}, n_2}(q_2) \psi_{\text{osc}, n_3}(q_3)$$

L'operazione di scambio, manda \mathbf{q} in $-\mathbf{q}$ perciò la parità per scambio coincide con quella per inversione spaziale. La parità di Ψ è allora $(-1)^{n_1+n_2+n_3}$. Siccome Ψ deve essere simmetrica, si ha che $n_1 + n_2 + n_3$ deve essere pari. Infine, lo spettro dell'energia è dato da $\hbar\omega(N + 3/2)$,
 ■ con N intero pari non negativo.

Esercizio III.12 Si consideri una particella di spin s interagente con un campo magnetico esterno uniforme e costante \mathbf{B} tramite l'hamiltoniana

$$H = \mu\mathbf{B} \cdot \mathbf{s}.$$

- (i) Si scriva l'equazione di evoluzione temporale per l'operatore di spin \mathbf{s} nello schema di Heseinberg.
- (ii) Denotando con \mathbf{w} il valor medio di \mathbf{s} su un generico stato del sistema, trovare, usando (i), l'equazione del moto per \mathbf{w} e risolverla nel caso in cui \mathbf{B} è diretto lungo l'asse z e si hanno le condizioni iniziali $\mathbf{w}(0) = (w, 0, 0)$.
- (iii) Senza risolvere le equazioni del moto, dimostrare che le quantità $|\mathbf{w}|^2$, $\mathbf{B} \cdot \mathbf{w}$ e $|\dot{\mathbf{w}}|^2$ sono indipendenti dal tempo.
- (iv) Qual è il significato fisico della quantità

$$\sqrt{\frac{|\dot{\mathbf{w}}|^2}{|\mathbf{w}|^2 - (\mathbf{B} \cdot \mathbf{w})/|\mathbf{B}|^2}}$$

Risoluzione Vediamo (i). Nello schema di Heseinberg, visto che H è indipendente dal tempo, come noto vale

$$\dot{\mathbf{s}}_{\text{H}}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{s}_{\text{H}}, H]$$

dove

$$\mathbf{s}_{\text{H}}(t) = U^+(t, t_0) \mathbf{s} U(t, t_0)$$

e $U(t, t_0)$ è l'operatore di evoluzione temporale,

$$U(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(t - t_0)H\right).$$

Nel nostro problema specifico, abbiamo

$$[s_k, H] = [s_k, \mu B_l s_l] = i\hbar\mu B_l \varepsilon_{jkl} s_j = i\hbar\mu \varepsilon_{klj} B_l s_j = i\hbar\mu [\mathbf{B} \times \mathbf{s}]_k$$

cioè

$$[\mathbf{s}, H] = i\hbar\mu \mathbf{B} \times \mathbf{s}$$

dunque,

$$\dot{\mathbf{s}}_H(t) = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{s}_H, H] = \frac{1}{i\hbar} U^\dagger [\mathbf{s}, H] U = \mu U^\dagger \mathbf{B} \times \mathbf{s} U$$

Ne viene che

$$\dot{s}_{kH}(t) = \mu U^\dagger \varepsilon_{klj} B_l s_j U = \mu \varepsilon_{klj} B_l U^\dagger s_j U = \mu \varepsilon_{klj} B_l s_{jH}$$

infine,

$$\dot{\mathbf{s}}_H(t) = \mu \mathbf{B} \times \mathbf{s}_H(t)$$

ne viene che $\mathbf{s}_H(t)$ precece attorno a \mathbf{B} , con velocità angolare pari a $\omega = \mu |\mathbf{B}|$.

Passiamo a (ii). Si ha

$$\mathbf{w}(t) = (\psi(t), \mathbf{s}\psi(t)) = (\psi, \mathbf{s}_H(t)\psi)$$

perciò

$$\dot{\mathbf{w}}(t) = \frac{d}{dt} (\psi, \mathbf{s}_H(t)\psi) = (\psi, \dot{\mathbf{s}}_H(t)\psi) = \mu \mathbf{B} \times (\psi, \mathbf{s}_H(t)\psi) = \mu \mathbf{B} \times \mathbf{w}(t)$$

La soluzione generale dell'equazione scritta è

$$\mathbf{w}(t) = \exp(t\mu \mathbf{B} \cdot \mathbf{L}) \mathbf{w}(0)$$

dove \mathbf{L} è la tripletta delle matrici antisimmetriche L_i tali che

$$(L_i)_{jk} = \varepsilon_{ikj}$$

Nel caso particolare considerato, abbiamo

$$\mathbf{w}(t) = \exp(t\mu B L_3) \mathbf{w}(0)$$

l'esponenziale coincide con la rotazione di angolo $t\mu B$ del vettore $\mathbf{w}(0)$ attorno all'asse z , dunque,

$$\begin{aligned} w_x(t) &= w \cos(t\mu B) \\ w_y(t) &= w \sin(t\mu B) \end{aligned}$$

Passiamo a (iii). Abbiamo

$$\frac{d}{dt} |\mathbf{w}|^2 = 2\mathbf{w} \cdot \frac{d\mathbf{w}}{dt} = 0$$

poiché $\dot{\mathbf{w}}$ e \mathbf{w} sono ortogonali. Poi

$$\frac{d}{dt} \mathbf{B} \cdot \mathbf{w} = \mathbf{B} \cdot \dot{\mathbf{w}} = 0$$

ancora perché $\dot{\mathbf{w}}$ e \mathbf{B} sono ortogonali. Infine,

$$\frac{d}{dt} |\dot{\mathbf{w}}|^2 = \frac{d}{dt} |\dot{\mathbf{w}}|^2 = 2\dot{\mathbf{w}} \cdot \frac{d^2\mathbf{w}}{dt^2} = 2\mu \dot{\mathbf{w}} \cdot (\mathbf{B} \times \dot{\mathbf{w}}) = 0$$

Passiamo a (iv). Abbiamo

$$|\dot{\mathbf{w}}|^2 = |\mu \mathbf{B} \times \mathbf{w}|^2 = \mu^2 \left[|\mathbf{B}|^2 |\mathbf{w}|^2 - (\mathbf{B} \cdot \mathbf{w})^2 \right] = \mu^2 |\mathbf{B}|^2 \left[|\mathbf{w}|^2 - (\mathbf{B} \cdot \mathbf{w}) / |\mathbf{B}|^2 \right]$$

e se ne conclude che

$$\sqrt{\frac{|\dot{\mathbf{w}}|^2}{|\mathbf{w}|^2 - (\mathbf{B} \cdot \mathbf{w}) / |\mathbf{B}|^2}} = \mu |\mathbf{B}|$$

- cioè la quantità di sopra è la pulsazione di **precessione di Larmor**.

Esercizio III.13 Un deutone (uno stato legato composto da un protone e da un neutrone) nello stato fondamentale possiede un momento di quadrupolo elettrico piccolo ma non nullo,

$$\langle Q \rangle = \langle e (2z^2 - x^2 - y^2) \rangle \approx 0.0027 \times 10^{-24} \text{ecm}^2$$

[(i)]

- (i) Dimostrare che il dato sperimentale implica che lo stato fondamentale non può essere uno stato di pura onda S , cioè $L = 0$.

Supponiamo che l'hamiltoniana del moto relativo tra i due nucleoni sia

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H' \\ H_0 &= \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + U_0(|\mathbf{r}|) + U_1(|\mathbf{r}|) \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \\ H' &= U_2(|\mathbf{r}|) \left[3(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{r}) - (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2) |\mathbf{r}|^2 \right] \end{aligned}$$

dove U_0, U_1, U_2 sono potenziali a simmetria centrale e attrattivi.

[(ii)]

- (ii) Determinare autostati e autovettori dell'operatore $\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2$ e dire quale valore ha lo spin totale nello stato fondamentale del deutone trascurando H' .
- (iii) Dimostrare che H' può essere riscritto come

$$H' = 2U_2(|\mathbf{r}|) \left[3(\mathbf{S} \cdot \mathbf{r})^2 - |\mathbf{S}|^2 |\mathbf{r}|^2 \right]$$

dire quali tra i seguenti operatori sono conservati per l'evoluzione dettata da H tra $|\mathbf{S}|^2, |\mathbf{L}|^2, |\mathbf{J}|^2, S_i, L_i, J_i$ e I (inversione spaziale).

- (iv) Mostrare che lo stato fondamentale di H ottenuto perturbando H_0 con H' può avere effettivamente momento di quadrupolo non nullo.

Risoluzione Per rispondere al quesito (i) basta usare il teorema di Wigner-Eckart. La quantità

$$2z^2 - x^2 - y^2 = -\sqrt{6}T_0^{(2)}$$

dove $T^{(2)}$ è un tensore sferico di rango 2.

Allora, dal teorema di Wigner-Eckart si ha che se $L' \neq L + 2, \dots, |L - 2|$ allora

$$\langle L' | T_0^{(2)} | L \rangle = 0$$

Ne viene che se $L = 0$, se $L' \neq 2$ allora $\langle L' | T_0^{(2)} | L = 0 \rangle = 0$. In definitiva, lo stato fondamentale non può avere $L = 0$, altrimenti avrebbe quadrupolo nullo.

Veniamo a (ii). Dobbiamo determinare gli autovalori e gli autovettori di $\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2$, abbiamo

$$\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 = 4\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 = 2(\mathbf{S}^2 - \mathbf{s}_1^2 - \mathbf{s}_2^2) = 2\mathbf{S}^2 - 3\mathbb{I}$$

gli autovettori sono dunque gli autovettori di $\mathbf{S}^2, |S S'_z\rangle$, agli autovalori $2S(S+1) - 3$. D'altra parte, S può assumere solo i valori 0 (singoletto) e 1 (tripletto), perciò gli autovalori cercati sono -3 e 1 .

Consideriamo adesso lo stato fondamentale dell'hamiltoniana

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + U_0(|\mathbf{r}|) + U_1(|\mathbf{r}|) \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + U_0(|\mathbf{r}|) + U_1(|\mathbf{r}|) (2\mathbf{S}^2 - 3\mathbb{I})$$

dobbiamo calcolarne lo spin totale. Come si vede H_0 e \mathbf{S}^2 commutano, perciò ha senso cercare autovettori simultanei di H_0 e \mathbf{S}^2 . Per gli stati di spin totale $S = 0$, l'hamiltoniana per la parte orbitale è

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + U_0(|\mathbf{r}|) - 3U_1(|\mathbf{r}|)$$

mentre per $S = 1$

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + U_0(|\mathbf{r}|) + U_1(|\mathbf{r}|)$$

siccome i due potenziali U_0 e U_1 sono attrattivi, l'energia inferiore compete agli stati di tripletto, cioè lo stato fondamentale avrà $S = 1$.

Veniamo a (iii). Abbiamo

$$H' = U_2(|\mathbf{r}|) \left[3(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{r}) - (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2) |\mathbf{r}|^2 \right]$$

Calcoliamo

$$\begin{aligned} 3(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{r}) - (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2) |\mathbf{r}|^2 &= 3(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{r}) - 2\mathbf{S}^2 |\mathbf{r}|^2 + 3|\mathbf{r}|^2 = \\ &= 3 \left[(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{r}) + |\mathbf{r}|^2 \right] - 2\mathbf{S}^2 |\mathbf{r}|^2 \end{aligned}$$

Ora,

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{r}) &= \frac{1}{2} [(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{r}) + (\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{r})]^2 - \frac{1}{2} (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{r})^2 - \frac{1}{2} (\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{r})^2 = \\ &= 2(\mathbf{S} \cdot \mathbf{r})^2 - \frac{1}{2} (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{r})^2 - \frac{1}{2} (\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{r})^2 \end{aligned}$$

d'altra parte,

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{r})^2 &= \sum_{i,j=1}^3 \sigma_{1i} r_i \sigma_{1j} r_j = \sum_{i,j=1}^3 \sigma_{1i} \sigma_{1j} r_i r_j = \sum_{i \leq j} (\sigma_{1i} \sigma_{1j} + \sigma_{1j} \sigma_{1i}) r_i r_j = \\ &= \sum_{i \leq j} \delta_{ij} r_i r_j = |\mathbf{r}|^2 \end{aligned}$$

perciò

$$(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{r}) = 2(\mathbf{S} \cdot \mathbf{r})^2 - |\mathbf{r}|^2$$

cioè

$$H' = 2U_2(|\mathbf{r}|) \left[3(\mathbf{S} \cdot \mathbf{r})^2 - |\mathbf{S}|^2 |\mathbf{r}|^2 \right]$$

Riassumendo, la nostra hamiltoniana è divenuta

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + U_0(|\mathbf{r}|) + U_1(|\mathbf{r}|) \left(2|\mathbf{S}|^2 - 3\mathbb{I} \right) + 2U_2(|\mathbf{r}|) \left[3(\mathbf{S} \cdot \mathbf{r})^2 - |\mathbf{S}|^2 |\mathbf{r}|^2 \right]$$

Sono costanti del moto $|\mathbf{J}|^2$ e le componenti J_i , nonché la parità. A causa di H' il momento angolare orbitale non è conservato, viceversa $|\mathbf{S}|^2$ è conservato poiché commuta con ogni componente di \mathbf{S} .

Trascurando H' abbiamo che lo stato fondamentale ha $L = 0$ e $S = 1$, con ciò, $J = 1$. La perturbazione H' è un tensore sferico di rango 2 sotto \mathbf{L} (lo si vede considerando H' come funzione di \mathbf{r}), perciò accoppia lo stato $L = 0$ solo con lo stato $L = 2$. Ecco spiegato, considerando la risposta (i), perché lo stato fondamentale manifesta un momento di quadrupolo

■ non nullo.

Esercizio III.14
(problema
2, 31.3.1990)

Una particella di spin 1/2 è descritta dallo stato

$$|s\rangle \doteq a|+\rangle + b|-\rangle$$

Fissati a e b si dica se e esiste una direzione nello spazio, caratterizzata dal versore \mathbf{n} , tale che $|s\rangle$ è autostato di $1/2\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$ relativo all'autovalore 1/2.

In base alla risposta precedente, si dimostri che lo spazio degli stati puri di spin di una particella di spin $1/2$ è in corrispondenza biunivoca con la sfera unitaria in tre dimensioni, \mathbb{S}^2 .

Risoluzione Si tratta di vedere se è vero o meno che le particelle di spin $1/2$ puntano sempre in una fissata direzione dello spazio. Sia χ il vettore fissato che in rappresentazione diviene (a, b) . Ora, χ è sicuramente autovettore della matrice

$$Q \doteq \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

espressa nella base formata da χ e dal suo ortogonale $\chi_{\perp} = (b, -a)$. Il passaggio dalla base $\{\chi, \chi_{\perp}\}$ alla $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ si ottiene tramite un operatore $U \in U(2)$ visto che ambedue le basi sono ortonormali (si suppone $|a|^2 + |b|^2 = 1$). Ne viene che

$$U^+QU = c_0 + \mathbf{c} \cdot \boldsymbol{\sigma}$$

Ora, la traccia e il determinante sono invariante per trasformazione unitaria, sicché

$$\begin{aligned} 0 &= \text{Tr}(c_0 + \mathbf{c} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = c_0 \\ -1 &= \det(c_0 + \mathbf{c} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = c_0^2 - |\mathbf{c}|^2 \end{aligned}$$

da cui

$$|\mathbf{c}|^2 = 1$$

posto allora $\mathbf{n} = \mathbf{c}$, si ha $U^+QU = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ e

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \chi = U^+QU\chi = U^+Q(1, 0) = U^+(1, 0) = \chi.$$

Abbiamo visto che a ogni stato puro χ corrisponde un versore $\mathbf{n} \in \mathbb{S}^2$ talché $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \chi = \chi$. Viceversa, ad ogni versore è associato uno e solo un χ (a meno di una fase!) talché $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \chi = \chi$ visto che $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ è hermitiana e perciò diagonalizzabile e ha due autovalori distinti in uno spazio di dimensione 2.

- Se ne conclude che la corrispondenza tra versori e stati puri è biunivoca e che, come detto,
 - ogni stato puro punta in una determinata direzione nello spazio.

Esercizio III.15
(problema
2, 31.3.1990)

Si consideri una particella di spin 0 avente funzione d'onda

$$\psi(\mathbf{x}) = (a_1x + a_2y + a_3z) \phi(r),$$

si dimostri che tale particella ha momento angolare totale 1.

Si faccia vedere che esistono scelte degli a_i tali che non è possibile trovare alcun \mathbf{n} per cui $\psi(\mathbf{x})$ è autostato di $\mathbf{n} \cdot \mathbf{L}$ all'autovalore 1. Si dica, poi, per quali a_i un tale versore può essere ottenuto e lo si determini.

Si confronti il risultato con quello dell'esercizio precedente.

Risoluzione Sappiamo che

$$Y_1^1 = \frac{x + iy}{\sqrt{2}r}, \quad Y_1^0 = \frac{z}{r}, \quad Y_1^{-1} = \frac{x - iy}{\sqrt{2}r}$$

perciò

$$\begin{aligned} x &= r \frac{Y_1^1 + Y_1^{-1}}{\sqrt{2}} \\ y &= r \frac{Y_1^1 - Y_1^{-1}}{\sqrt{2}i} \end{aligned}$$

dunque,

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{x}) &= \left[a_1 (Y_1^1 + Y_1^{-1}) + a_2 (Y_1^1 + iY_1^{-1}) + a_3 \sqrt{2}Y_1^0 \right] \frac{r\phi(r)}{\sqrt{2}} = \\ &= \left[(a_1 + a_2) Y_1^1 + (a_1 + ia_2) Y_1^{-1} + a_3 \sqrt{2}Y_1^0 \right] \frac{r\phi(r)}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

da cui

$$\begin{aligned} L^2\psi(\mathbf{x}) &= L^2 \left[(a_1 + a_2) Y_1^1 + (a_1 + ia_2) Y_1^{-1} + a_3 \sqrt{2} Y_1^0 \right] \frac{r\phi(r)}{\sqrt{2}} = \\ &= 2\psi(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

da cui $L = 1$.

Notiamo subito che nel caso $a_1 = a_2 = 0$, allora $\psi(\mathbf{x})$ è autovettore (all'autovalore 0) di L_3 . Vediamo cosa si può dire in generale. Vogliamo calcolare termini del tipo

$$L_j x_i \phi(r) = x_i L_j \phi(r) + [L_j, x_i] \phi(r) = [L_j, x_i] \phi(r) = i\varepsilon_{jik} x_k \phi(r)$$

sicch 

$$n_j L_j a_i x_i \phi(r) = ia_i n_j \varepsilon_{jik} x_k \phi(r) = ia_i \varepsilon_{ikj} x_k n_j \phi(r) = i\mathbf{a} \cdot (\mathbf{x} \times \mathbf{n}) \phi(r)$$

Ne viene che, se fosse

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{L}\psi(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x})$$

dovremmo avere

$$i\mathbf{a} \cdot (\mathbf{x} \times \mathbf{n}) \phi(r) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{x} \phi(r)$$

cio 

$$i\mathbf{a} \cdot (\mathbf{x} \times \mathbf{n}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{x}$$

notiamo che, se scegliamo \mathbf{a} reale (o immaginario puro) l'equazione non   risolvibile, visto che il secondo membro   reale.

Se denotiamo con $\mathbf{a}' = \text{Re } \mathbf{a}$ e con $\mathbf{a}'' = \text{Im } \mathbf{a}$, troviamo

$$\begin{cases} -\mathbf{a}'' \cdot (\mathbf{x} \times \mathbf{n}) = \mathbf{a}' \cdot \mathbf{x} \\ \mathbf{a}' \cdot (\mathbf{x} \times \mathbf{n}) = \mathbf{a}'' \cdot \mathbf{x} \end{cases}$$

Quando \mathbf{x}   lungo \mathbf{n} , allora \mathbf{x}   ortogonale sia ad \mathbf{a}' che a \mathbf{a}'' , perci 

$$\mathbf{n} \propto \mathbf{a}' \times \mathbf{a}''$$

e perci  \mathbf{a}' e \mathbf{a}'' non devono essere paralleli affin  \mathbf{n} esista.

Prendiamo adesso \mathbf{x} lungo \mathbf{a}' , nel primo membro della seconda equazione troviamo 0, cio  \mathbf{x}   ortogonale ad \mathbf{a}'' . Concludiamo che, affin  \mathbf{n} esista \mathbf{a}' e \mathbf{a}'' devono essere ortogonali. Poniamo

$$\mathbf{n} \doteq \frac{\mathbf{a}' \times \mathbf{a}''}{|\mathbf{a}'| |\mathbf{a}''|}$$

allora,

$$\begin{aligned} \mathbf{a}'' \cdot \left(\frac{\mathbf{a}' \times \mathbf{a}''}{|\mathbf{a}'| |\mathbf{a}''|} \times \mathbf{x} \right) &= \frac{\mathbf{a}''}{|\mathbf{a}'| |\mathbf{a}''|} \cdot ((\mathbf{a}' \cdot \mathbf{x}) \mathbf{a}'' - (\mathbf{a}'' \cdot \mathbf{x}) \mathbf{a}') = \frac{|\mathbf{a}''|}{|\mathbf{a}'|} \cdot (\mathbf{a}' \cdot \mathbf{x}) \\ -\mathbf{a}' \cdot \left(\frac{\mathbf{a}' \times \mathbf{a}''}{|\mathbf{a}'| |\mathbf{a}''|} \times \mathbf{x} \right) &= -\frac{\mathbf{a}'}{|\mathbf{a}'| |\mathbf{a}''|} \cdot ((\mathbf{a}' \cdot \mathbf{x}) \mathbf{a}'' - (\mathbf{a}'' \cdot \mathbf{x}) \mathbf{a}') = \frac{|\mathbf{a}'|}{|\mathbf{a}''|} \cdot (\mathbf{a}'' \cdot \mathbf{x}) \end{aligned}$$

In definitiva, $\mathbf{a} = \mathbf{a}' + i\mathbf{a}''$ deve essere tale che \mathbf{a}' e \mathbf{a}'' sono vettori (non nulli) ortogonali di eguale norma, allora

$$\mathbf{n} \doteq \frac{\mathbf{a}' \times \mathbf{a}''}{|\mathbf{a}'|^2}$$

- Una particella di momento angolare 1 non punta sempre nella stessa direzione come accade per lo spin 1/2 (esercizio precedente).

Esercizio III.16 Un elettrone   soggetto a un campo magnetico uniforme variabile nel tempo $\mathbf{B}(t) = (B \sin \alpha(t), 0, B \cos \alpha(t))$. Si trascuri l'energia cinetica del sistema e, in pratica, si prendano in considerazione solo le variabili di spin.

- (i) Si scriva l'hamiltoniana $H(t)$ e si calcolino gli autostati $|1t\rangle$ e $|2t\rangle$ di $H(t)$ al variare di t . Si mostri che   possibile assumere una convenzione sulla scelta della fase di modo

che $\langle n t | (d/dt) | n t \rangle = 0$.

- (ii) Si scriva l'equazione di Schrödinger esatta per l'evoluzione del sistema e se ne scrivano le proiezioni sui due stati $|n t\rangle$.
- (iii) Si risolvano le equazioni così trovate al primo ordine in teoria delle perturbazioni, considerando come una perturbazione $\langle 2 t | (d/dt) | 1 t \rangle$.
- (iv) Sia ora $\alpha = f(t/T)$ con T grande. Cioè α vari lentamente nel tempo. Supponiamo che lo spin sia allineato con il campo magnetico all'istante $t = 0$, cosa si può dire circa la probabilità che all'istante T lo spin sia opposto al campo? Rispondere tenendo conto del risultato di cui al punto precedente.

Risoluzione La hamiltoniana è

$$H(t) = -\boldsymbol{\mu}_e \cdot \mathbf{B}(t) = \frac{e\hbar}{2mc} 2\mathbf{s} \cdot \mathbf{B}(t) = \mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}$$

Ora, $|\mathbf{B}| = B$ perciò

$$H(t) = \mu_B B (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b})$$

dove $\mathbf{b} = (\sin \alpha(t), 0, \cos \alpha(t))$ è il versore lungo il campo magnetico.

In base all'esercizio III.5, gli autovalori della hamiltoniana sono $\pm \mu_B B$, mentre gli autovettori sono

$$\begin{aligned} \chi_+ &= \frac{1}{\sqrt{(1+\cos\alpha)/2}} \begin{pmatrix} (1+\cos\alpha)/2 \\ (\sin\alpha)/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2) \\ \sin(\alpha/2) \end{pmatrix} = \\ \chi_- &= \frac{1}{\sqrt{(1-\cos\alpha)/2}} \begin{pmatrix} (1-\cos\alpha)/2 \\ -(\sin\alpha)/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin(\alpha/2) \\ -\cos(\alpha/2) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Per quanto concerne le derivate

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \chi_+ &= -\frac{\dot{\alpha}}{2} \chi_- \\ \frac{d}{dt} \chi_- &= \frac{\dot{\alpha}}{2} \chi_+ \end{aligned}$$

da cui, con la corrente scelta delle fasi,

$$\begin{aligned} (\chi_{\pm}, \dot{\chi}_{\pm}) &= 0 \\ (\chi_{\mp}, \dot{\chi}_{\pm}) &= \mp \frac{\dot{\alpha}}{2} \end{aligned}$$

Veniamo all'evoluzione temporale

$$\dot{\chi} = \frac{H(t)}{i\hbar} \chi$$

da cui

$$\begin{aligned} (\chi_+(t), \dot{\chi}) &= \left(\chi_+(t), \frac{H(t)}{i\hbar} \chi \right) = \frac{1}{i\hbar} (H(t) \chi_+, \chi) = \frac{\mu_B B}{i\hbar} (\chi_+(t), \chi) \\ (\chi_-(t), \dot{\chi}) &= \left(\chi_-(t), \frac{H(t)}{i\hbar} \chi \right) = \frac{1}{i\hbar} (H(t) \chi_-, \chi) = -\frac{\mu_B B}{i\hbar} (\chi_-(t), \chi) \end{aligned}$$

D'altra parte

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (\chi_+(t), \chi) &= (\dot{\chi}_+(t), \chi) + (\chi_+(t), \dot{\chi}) = -\frac{\dot{\alpha}}{2} (\chi_-(t), \chi) + (\chi_+(t), \dot{\chi}) \\ \frac{d}{dt} (\chi_-(t), \chi) &= (\dot{\chi}_-(t), \chi) + (\chi_-(t), \dot{\chi}) = \frac{\dot{\alpha}}{2} (\chi_+(t), \chi) + (\chi_-(t), \dot{\chi}) \end{aligned}$$

sicché

$$\begin{aligned} \dot{w}_+ &= -\frac{\dot{\alpha}}{2} w_- + \frac{\mu_B B}{i\hbar} w_+ \\ \dot{w}_- &= \frac{\dot{\alpha}}{2} w_+ - \frac{\mu_B B}{i\hbar} w_- \end{aligned}$$

Operiamo le seguenti posizioni

$$w_+ = W_+ e^{-iCt}; \quad w_- = W_- e^{iCt};$$

dove $C = \mu_B B / \hbar$. Allora

$$\begin{aligned} \dot{w}_+ &= \dot{W}_+ e^{-iCt} - iC W_+ e^{-iCt} \\ \dot{w}_- &= \dot{W}_- e^{iCt} + iC W_- e^{iCt} \end{aligned}$$

sicché

$$\begin{aligned} \dot{W}_+ &= iC W_+ - \frac{\dot{\alpha}}{2} W_- e^{2iCt} - iC W_+ = -\frac{\dot{\alpha}}{2} W_- e^{2iCt} \\ \dot{W}_- &= -iC W_- + \frac{\dot{\alpha}}{2} W_+ e^{-2iCt} + iC W_- = \frac{\dot{\alpha}}{2} W_+ e^{-2iCt} \end{aligned}$$

dunque,

$$\begin{aligned} W_+(t) &= W_+(0) - \frac{1}{2} \int_0^t \dot{\alpha}(t') W_-(t') e^{2iCt'} dt' \\ W_-(t) &= W_-(0) + \frac{1}{2} \int_0^t \dot{\alpha}(t') W_+(t') e^{-2iCt'} dt' \end{aligned}$$

Al primo ordine in teoria delle perturbazioni rispetto ad $\dot{\alpha}$ troviamo

$$\begin{aligned} W_+(t) &= W_+(0) - \frac{W_-(0)}{2} \int_0^t \dot{\alpha}(t') e^{2iCt'} dt' \\ W_-(t) &= W_-(0) + \frac{W_+(0)}{2} \int_0^t \dot{\alpha}(t') e^{-2iCt'} dt' \end{aligned}$$

All'istante $t = 0$ si ha $W_+(0) = 1$ e $W_-(0) = 0$, perciò

$$\begin{aligned} W_+(t) &= 1 \\ W_-(t) &= \frac{1}{2} \int_0^t \dot{f}(t'/T) e^{-2iCt'} dt' \end{aligned}$$

Sicché

$$\begin{aligned} W_+(T) &= 1 \\ W_-(T) &= \frac{1}{2} \int_0^1 f'(u) e^{-2iCTu} du \end{aligned}$$

- La probabilità cercata è $|w_-(T)|^2$. Se f' e $f'' \in L^1(0,1)$ per $T \rightarrow \infty$, $W_- = O(1/T) \rightarrow 0$,
 ■ perciò la probabilità è nulla: lo spin segue il campo magnetico.

Transizioni elettromagnetiche e fisica atomica

In questo capitolo ci occupiamo delle applicazioni dell'apparato teorico della meccanica quantistica. Requisiti fondamentali sono la teoria delle perturbazioni dipendenti e indipendenti dal tempo, le transizioni elettromagnetiche, particelle identiche e assioma di spin-statistica, cenni di fisica atomica.

Esercizio IV.1
(problema 2,
13.06.1997)

È noto che le correzioni relativistiche ai livelli dell'energia dell'atomo di idrogeno sono ben descritte dalla formula

$$\delta E_{nj} = -R \frac{\alpha^2}{n^4} \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \quad (\text{IV.1})$$

dove $R \approx 13.6\text{eV}$, $\alpha \approx 1/137$, n e j sono, ordinatamente, il numero quantico principale e il momento angolare totale. Secondo l'equazione scritta i livelli $2s_{1/2}$ e $2p_{1/2}$ sono degeneri in energia, in contrasto con il dato sperimentale, Lamb shift, seguente

$$E_{2p_{1/2}} - E_{2s_{1/2}} = -4 \times 10^{-6} \text{eV} \quad (\text{IV.2})$$

Si consideri adesso l'atomo di elio mesico (${}^4\text{He}^{++}$) $e^- \mu^-$, in cui un elettrone è sostituito da un muone che è una particella del tutto identica all'elettrone, ma presenta una massa $m_\mu \approx 207m_e$.

[(i)]

- (i) Si diano le energie in eV degli stati con $n = 2$ dell'elettrone, avendo cura di stimare se le correzioni di resto atomico imperfetto sono più o meno rilevanti di quelle relativistiche.
- (ii) Si diano le energie in eV degli stati con $n = 2$ del muone, inclusive delle correzioni relativistiche. Confrontare i risultati ottenuti con i seguenti dati sperimentali

$$E_{2p_{1/2}} - E_{2s_{1/2}} = (1381.3 \pm 0.5) \times 10^{-3} \text{eV} \quad (\text{IV.3})$$

$$E_{2p_{3/2}} - E_{2s_{1/2}} = (1527.5 \pm 0.3) \times 10^{-3} \text{eV} \quad (\text{IV.4})$$

si noti la differenza nel segno tra (IV.2) e (IV.3).

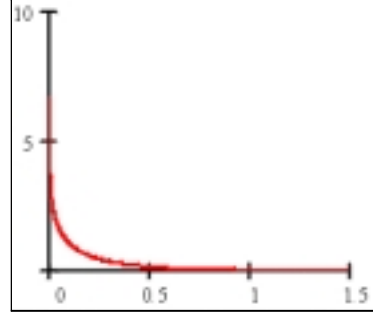
L'elettrodinamica quantistica prevede una correzione al potenziale coulombiano di una carica Ze della forma

$$\frac{Ze}{r} \rightsquigarrow \frac{Ze}{r} \left(1 + \frac{2\alpha}{3\pi} f\left(\frac{r}{\lambda}\right) \right) \quad (\text{IV.5})$$

dove $\lambda = \hbar/mc$ è la lunghezza d'onda Compton dell'elettrone e il grafico di f è riportato in figura 1.

[(iii)]

- (iii) Si confrontino i grafici di $R_{20}^2(r)$ e $R_{21}^2(r)$ relativi all'elettrone e al muone. Si dica se la correzione dovuta alla (IV.5) è più efficace sugli stati s o sugli stati p .
- (iv) Si chiede se la modificazione introdotta dalla (IV.5), da sola, renda conto del dato (IV.2)

Figura 1. Forma della funzione $f(r/\lambda)$

o (IV.3). Rispondere qualitativamente sapendo che l'azione della perturbazione reca gli ordini di grandezza giusti.

Si ricorda che, se $x = r/a$, a essendo il raggio di Bohr,

$$R_{20}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-x/2} \left(1 - \frac{x}{2}\right); \quad R_{21}(x) = \frac{1}{2\sqrt{6}} e^{-x/2} x;$$

Risoluzione Vediamo il primo quesito. Ci viene chiesto di stimare i livelli energetici per $n = 2$ dell'elettrone nell'approssimazione di campo centrale. Si suppone quindi che il muone costituisca una distribuzione di carica sferica. Quando l'elettrone si trova sufficientemente lontano, $r \gg a_\mu$ (a_μ sia il raggio di Bohr del muone) dal muone, per il teorema di Gauss, si ha che l'elettrone vede una carica puntiforme con $Z_{\text{eff}} = 1$. In definitiva, l'elettrone si comporta come l'elettrone nell'atomo di idrogeno, perciò

$$E_n = -\frac{R}{n^2}.$$

In queste condizioni l'elettrone si trova a una distanza pari al raggio di Bohr, a , dal nucleo. D'altra parte, se l'elettrone può penetrare all'interno di a_μ , risentirà di una attrazione maggiore e l'energia tenderà a decrescere (a crescere in valore assoluto: l'energia di legame aumenta!). L'elettrone potrà penetrare nella distribuzione mesica per valori del momento angolare l piccoli, poiché $R_{nl} \sim r^l$ per $r \rightarrow 0$. In generale, se $g(r/a_\mu)$ è una funzione che è 0 per $r \gg a_\mu$ e 1 per $r \ll a_\mu$, la correzione all'approssimazione di campo centrale è, al primo ordine nella teoria delle perturbazioni,

$$\begin{aligned} \delta E_{nl}^{\text{r.a.}} &= \int_0^{+\infty} \frac{dr r^2}{a^3} R_{nl}^2(r/a) \frac{-e^2 g(r/a_\mu)}{r} \approx \int_0^{a_\mu} \frac{dr r^2}{a^3} \frac{-e^2}{r} c_{nl} \left(\frac{r}{a}\right)^{2l} = -c_{nl} \frac{e^2}{a^{3+2l}} \frac{a_\mu^{2l+2}}{2l+2} = \\ &= -\frac{c_{nl}}{l+1} \frac{e^2}{2a} \left(\frac{a_\mu}{a}\right)^{2l+2} = -\frac{c_{nl}}{l+1} R \left(\frac{a_\mu}{a}\right)^{2l+2} \end{aligned}$$

dove

$$c_{20} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 = \frac{1}{2}, \quad c_{21} = \left(\frac{1}{2\sqrt{6}}\right)^2 = \frac{1}{24}.$$

Ora,

$$a_\mu = \frac{\hbar^2}{m_\mu e^2} \approx \frac{1}{207} a$$

sicché

$$\begin{aligned} \delta E_{20}^{\text{r.a.}} &\approx 1.6 \times 10^{-4} eV \\ \delta E_{21}^{\text{r.a.}} &\approx 1.5 \times 10^{-10} eV \end{aligned}$$

Per s la correzione che si ottiene è più grande del Lamb shift, ma paragonabile con le correzioni relativistiche. Per lo stato p la correzione di resto atomico imperfetto è trascurabile sia rispetto al Lamb shift, sia rispetto agli aggiustamenti relativistici.

Il mesone risentirà sempre dell'attrazione dell'intera carica nucleare, perciò, a parte le correzioni relativistiche

$$E_n = -\frac{Z^2 \mu e^4}{2n^2 \hbar^2} = -\frac{\mu}{m_e} \frac{Z^2 R}{n^2} = -\frac{m_\mu}{m_e} \left(\frac{4m_p}{m_\mu + 4m_p} \right) \frac{Z^2 R}{n^2}$$

D'altra parte

$$\frac{4m_p}{m_\mu + 4m_p} = \frac{1}{1 + \frac{m_\mu}{4m_p}} \approx 1 - \frac{m_\mu}{4m_p}$$

Con le correzioni relativistiche,

$$E_n = -\frac{m_\mu}{m_e} \left(1 - \frac{m_\mu}{4m_p} \right) \frac{Z^2 R}{n^2} \left[1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j + 1/2} - \frac{3}{4} \right) \right]$$

con $Z = 2$. Calcoliamo

$$\begin{aligned} E_{2p_{3/2}} - E_{2p_{1/2}} &= \frac{m_\mu}{m_e} \left(1 - \frac{m_\mu}{4m_p} \right) \frac{Z^2 R}{n^2} \frac{Z^2 \alpha^2}{n^2} = \frac{m_\mu}{m_e} \left(1 - \frac{m_\mu}{4m_p} \right) \frac{Z^4 \alpha^2 R}{n^4} \\ &\approx 0.1455 eV \end{aligned}$$

contro il dato sperimentale

$$E_{2p_{3/2}} - E_{2p_{1/2}} = (0.146 \pm 0.001) eV$$

Lo spostamento del livello s non si spiega nei termini delle correzioni relativistiche.

Il grafico di f è riportato in funzione di r/λ , laddove R_{20} e R_{21} sono dati in funzione di r/a per l'elettrone e r/a_μ per il muone.

Per l'elettrone, posto $y = r/\lambda$, abbiamo $x = y\lambda/a = \alpha y$. Dovendo valutare l'andamento per $y \lesssim 1$, abbiamo

$$R_{20}^2 \approx \frac{1}{2}; R_{21}^2(\alpha y) \leq R_{21}^2(2\alpha) \approx 9 \times 10^{-6}.$$

Nel caso del muone, il rapporto vale

$$\frac{\lambda}{a_\mu} \approx \frac{207}{137} \approx 1.51$$

e la scalatura non provoca effetti drammatici, come per l'elettrone. In ogni caso, siccome per $y \rightarrow 0$ gli stati p sono praticamente nulli, la perturbazione portata dalla correzione elettrodinamica sarà più efficace sugli stati s .

Veniamo a (v). La perturbazione è definita negativa (essendo f positiva), perciò, se essa è l'unica ad agire, può spiegare un abbassamento del livello s , cioè può essere efficace nel caso ■ dell'elio, ma non (se da sola) nel caso dell'idrogeno.

Esercizio IV.2 Determinare la configurazione elettronica e i termini spettroscopici del fondamentale e dei primi eccitati per gli atomi di vanadio (V, $Z = 23$) e cobalto (Co, $Z = 27$).

Risoluzione Cominciamo dal vanadio. Esso ha configurazione elettronica

$$[\text{Ar}] 3d^3 (4s)^2$$

I termini spettroscopici sono dunque dettati da 3 elettroni equivalenti aventi, in approssimazione di elettroni indipendenti, $\ell = 2$.

Il momento angolare totale può assumere allora i valori $L = 6, 5, 4, 3, 2, 1, 0$. Lo spin totale può invece assumere i valori $S = 3/2, 1/2$. Per $S = 3/2$, lo stato di spin è simmetrico, perciò va accoppiato a uno stato orbitale antisimmetrico. Elenchiamo adesso gli stati con momento magnetico M positivo passibili di antisimmetrizzazione

$$(2, 1, 0); (2, 1, -1); (2, 1, -2); (2, 0, -1); (2, 0, -2); (1, 0, -1)$$

Il massimo M che troviamo è pari a 3, perciò non esistono stati antisimmetrici con $L = 6, 5, 4$, altrimenti avremmo trovato stati con $M > 3$. La presenza di un termine con $M = 3$, implica che $L = 3$ contiene stati antisimmetrici, perciò un $M = 2$, $M = 1$, $M = 0$ appartengono

all'autospazio $L = 3$. Con $M = 2$ troviamo un solo stato, perciò dobbiamo escludere $L = 2$. Resta $L = 1$ che spiega la presenza di due stati con $M = 0$. Perciò gli stati a $S = 3/2$ sono solo $L = 3$ e $L = 1$ che corrispondono (prima regola di Hund) agli stati con energia più bassa, 4F e 4P . Per la struttura fine, abbiamo

$${}^4F_{3/2,5/2,7/2,9/2}$$

$${}^4P_{1/2,3/2,5/2}$$

Il fondamentale, per la seconda regola di Hund, è ${}^4F_{3/2}$.

La configurazione del cobalto, Co, $Z = 27$, è

$$[\text{Ar}] 3d^7 (4s)^2$$

perciò i termini spettroscopici sono gli stessi del vanadio con l'inversione della struttura fine, dovuta alle lacune:

$${}^4F_{9/2,7/2,5/2,3/2}$$

$${}^4P_{5/2,3/2,1/2}$$

- e il fondamentale è ${}^4F_{9/2}$.

Esercizio IV.3 *Determinare la configurazione elettronica e i termini spettroscopici del fondamentale e dei primi eccitati per l'atomo di (Ni, $Z = 28$).*

Risoluzione La configurazione elettronica è

$$[\text{Ar}] 3d^8 (4s)^2$$

perciò conviene analizzare i termini spettroscopici di un atomo con configurazione

$$[\text{Ar}] 3d^2 (4s)^2$$

Quando si hanno due fermioni, come è noto dal capitolo III, essi hanno parità per scambio di spin data da $(-1)^{S+1}$ e parità per scambio orbitale $(-1)^L$. Perciò, se $S = 1$, le variabili di spin sono simmetriche, dunque dobbiamo richiedere L dispari, siccome dobbiamo comporre due $\ell = 2$, L va da 4 a 0, dunque cioè $L = 3, 1$, ossia, tenendo conto che si ha che fare con due lacune,

$${}^3F_{4,3,2}$$

$${}^3P_{2,1,0}$$

Se lo spin è nullo, invece, dobbiamo scegliere L pari, cioè $L = 4, 2, 0$, dunque

$${}^1G_4; {}^1D_2; {}^1S_0$$

e, dunque, ordinati in energia i livelli sono i seguenti

$${}^3F_{4,3,2}; {}^3P_{2,1,0}; {}^1G_4; {}^1D_2; {}^1S_0$$

■

Esercizio IV.4
(problema 2,
11.07.1997)

Nell'atomo di elio, come è ben noto, la configurazione $(1s)^2$ dà luogo a un termine spettroscopico ${}^1S_0 \doteq |0\rangle$ per lo stato fondamentale. Invece, la configurazione $(1s)(2s)$ dà luogo a un 1S_0 e a un ${}^3S_1 = |1\rangle$, più alti in energia del primo. Finché si trascurano le correzioni relativistiche, tutti gli stati sono di singoletto, $S = 0$ (paraelio), oppure di tripletto $S = 1$ (ortoelio).

1. Si dica se lo stato fondamentale di ortoelio, $|1\rangle$, può decadere allo stato fondamentale di paraelio, $|0\rangle$, in approssimazione (a) di dipolo elettrico, (b) di dipolo magnetico orbitale, (c) di quadrupolo elettrico, (d) di dipolo magnetico di spin.

Si assuma adesso che le correzioni relativistiche possano essere descritte dalla hamiltoniana perturbativa

$$H_{\text{rel}} = a [f(r_1, r_{12}) \mathbf{l}_1 \cdot \mathbf{s}_1 + f(r_2, r_{12}) \mathbf{l}_2 \cdot \mathbf{s}_2]$$

dove a ha le dimensioni dell'energia e tutte le altre quantità sono adimensionali. Inoltre, sia $f \approx 1$.

2. Si stimi il rapporto $a/(mc^2\alpha^2)$.
3. Si diano le regole di selezione di H_{rel} rispetto alla parità e alle componenti del momento angolare totale.

Si esprima H_{rel} in funzione di \mathbf{L} , $\mathbf{l} \doteq \mathbf{l}_1 - \mathbf{l}_2$, \mathbf{S} , $\mathbf{s} = \mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2$. Si ottengono in tal modo quattro termini.

4. Per ciascun termine enumerare le regole di selezione su $\mathbf{J}^2, \mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2$.
5. Si dica se H_{rel} può mescolare $|1\rangle$ con i termini spettroscopici di singoletto provenienti dalle configurazioni $ns\ mp$ con $m \geq 2$; $ns\ md$ con $m \geq 3$; mp^2 con $m \geq 2$; $np\ mp$, con $n > m \geq 2$.
6. Alla luce di quanto trovato in 2 e 5, si stimi come si modifica $|1\rangle$ e si dica cosa può concludere in generale su \mathbf{L}^2 e \mathbf{S}^2 .

Risoluzione

Vediamo 1. I due stati considerati hanno entrambi $L = 0$, perciò, finché L rimane un buon numero quantico (lo è fino al primo ordine nelle correzioni relativistiche), la transizione è rigorosamente proibita. D'altra parte, una perturbazione che commuta con lo spin non può accoppiare stati con spin totale diverso, $\Delta S = 1$, perciò anche la (d) non può connettere i due stati.

Vediamo 2. H_{rel} è una correzione relativistica (spin orbita), perciò di ordine α^2 . Dunque,

$$\frac{a}{mc^2\alpha^2} \approx \alpha^2$$

(si ricordi che $mc^2\alpha^2 = me^4/\hbar^2 = R/2$).

Passiamo a 3. Abbiamo

$$H_{\text{rel}} = a [f(r_1, r_{12}) \mathbf{l}_1 \cdot \mathbf{s}_1 + f(r_2, r_{12}) \mathbf{l}_2 \cdot \mathbf{s}_2]$$

Gli operatori $\mathbf{l}_{1,2}$ e $\mathbf{s}_{1,2}$ sono pari, perciò H_{rel} commuta con l'inversione spaziale. Ne viene che H_{rel} conetterà solo stati con parità eguale. Veniamo a \mathbf{J} . Esso commuta con ciascuno degli operatori che compongono H_{rel} . Perciò, $\Delta J_i = 0$.

Veniamo a 4. Si ha

$$\begin{aligned} \mathbf{l}_1 &= \frac{\mathbf{L} + \mathbf{l}}{2}, \quad \mathbf{s}_1 = \frac{\mathbf{S} + \mathbf{s}}{2} \\ \mathbf{l}_2 &= \frac{\mathbf{L} - \mathbf{l}}{2}, \quad \mathbf{s}_2 = \frac{\mathbf{S} - \mathbf{s}}{2} \end{aligned}$$

perciò

$$\begin{aligned} H_{\text{rel}} &= \frac{a}{4} [f(r_1, r_{12}) (\mathbf{L} + \mathbf{l}) \cdot (\mathbf{S} + \mathbf{s}) + f(r_2, r_{12}) (\mathbf{L} - \mathbf{l}) \cdot (\mathbf{S} - \mathbf{s})] = \\ &= \frac{a}{2} \left[\frac{f(r_1, r_{12}) + f(r_2, r_{12})}{2} (\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} + \mathbf{l} \cdot \mathbf{s}) + \frac{f(r_1, r_{12}) - f(r_2, r_{12})}{2} (\mathbf{L} \cdot \mathbf{s} + \mathbf{l} \cdot \mathbf{S}) \right] \end{aligned}$$

Passiamo alle regole di selezione. Per quanto riguarda \mathbf{J} , sappiamo già che $\Delta J = 0$, dalla risposta precedente. $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ commuta sia con \mathbf{L}^2 che con \mathbf{S}^2 , da cui $\Delta L = \Delta S = 0$. \mathbf{l} e \mathbf{s} sono vettori sotto \mathbf{L} e \mathbf{S} , rispettivamente, perciò, per il secondo termine $\Delta L = \pm 1, 0$ e $\Delta S = \pm 1, 0$. Per il terzo termine $\Delta L = 0$, $\Delta S = \pm 1, 0$. Per il quarto, $\Delta L = \pm 1, 0$ e $\Delta S = 0$.

Passiamo a 5. Abbiamo $np\ mp$, con $n > m \geq 2$

Lo stato $|1\rangle$ ha $J = 1$, $S = 1$ e $L = 0$ ed è pari

$ns\ mp$, $m \geq 2$: lo stato è dispari, perciò la parità impedisce il mescolamento.

$ns\ md$, $m \geq 3$: tutti gli stati presentano $J = 2$, perciò non possono essere connessi a $|1\rangle$ dalla regola di selezione su J .

mp^2 , $m \geq 2$: stavolta lo stato è pari. Calcoliamo il termine spettroscopico. Abbiamo due elettroni equivalenti con $S = 0$ e con $\ell = 1$. Perciò $L = 2, 1, 0$. Siccome la parte di spin è antisimmetrica, dobbiamo avere parte orbitale simmetrica, perciò $L = 2$ o $L = 0$. Siccome $|1\rangle$

ha $L = 0$, lo stato con $L = 2$ non è connesso a causa delle regole di selezione. Perciò dobbiamo considerare uno stato con $L = 0$, $S = 0$ e $J = 0$. Anche questo non va bene perché avremmo un $\Delta J \neq 0$.

$npmp$, $n > m \geq 2$: lo stato è ancora pari. I due elettroni non sono equivalenti, perciò tra i termini spettroscopici che abbiamo troviamo anche 1P_1 che può essere connesso a $|1\rangle$ dal termine in $\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}$.

Lo stato $|1\rangle$ dovrà dunque essere accoppiato a $2p3p {}^1P_1$ cioè

$$|1'\rangle \approx |1\rangle + \alpha^2 c |{}^1P_1\rangle$$

- alla luce di quanto detto, L ed S non saranno più buoni numeri quantici.

Esercizio IV.5
(problema 2,
24.01.1997)

Si consideri l'atomo di litio $Z = 3$.

- (i) Si stimi il potenziale di ionizzazione nell'approssimazione a elettroni indipendenti e lo si confronti con il valore sperimentale, $E_I = 5.4eV$. Si discuta brevemente l'origine di una eventuale discrepanza.
- (ii) Si dica qual è la configurazione più bassa in energia per cui lo spin totale vale $S = 3/2$.
- (iii) Si dica che momento angolare orbitale hanno gli stati derivanti da tale configurazione.
- (iv) Si dica se un atomo di litio in uno qualsiasi degli stati di cui ai punti precedenti può decadere allo stato fondamentale in approssimazione di dipolo elettrico.
- (v) Stessa domanda, ma considerando il contributo di tutti i momenti di multipolo possibili nell'ampiezza di decadimento.

Risoluzione

La configurazione elettronica per lo stato fondamentale del litio corrisponde a $(1s)^2 2s^1$. Nell'approssimazione a elettroni indipendenti gli stati sono fattorizzati, perciò l'energia dello stato fondamentale risulta

$$E_I = -\frac{Z^2 R}{4} = 30.6eV.$$

Il valore è circa 6 volte quello sperimentale. A contribuire a questa discrepanza l'estrema rozzezza dello schema di elettroni indipendenti che non tiene conto delle interazioni tra gli elettroni (schermaggio e repulsione).

Passiamo a (ii). Affinché lo spin totale sia $3/2$, non è possibile che gli elettroni chiudano un guscio s , altrimenti lo spin totale sarebbe inevitabilmente $1/2$. Allora lo stato a energia inferiore con spin totale $3/2$, si può ottenere con la configurazione $1s 2s 2p$. Il momento orbitale che una tale configurazione può avere vale $L = 1$ visto che si devono comporre due $\ell = 0$ con un $\ell = 1$: perciò abbiamo 4P .

Lo stato fondamentale per il litio è 1S . In approssimazione di dipolo, la transizione è vietata dalla regola di selezione su \mathbf{S}^2 : $\Delta S = 0$. Stessa risposta finché si considerano i momenti orbitali. Per quanto riguarda il momento magnetico di spin, esso vale

$$\boldsymbol{\mu} = \sum_{\alpha=1}^3 \frac{e\hbar}{2mc} 2\mathbf{s}_\alpha = \frac{e\hbar}{2mc} 2\mathbf{S}$$

- perciò commuta con lo spin totale e dunque, ancora, $\Delta S = 0$. In definitiva la transizione ${}^4P \rightarrow {}^1S$ è rigorosamente proibita.

Esercizio IV.6
(problema 2,
12.07.1996)

Si consideri una configurazione elettronica di k elettroni equivalenti, $n\ell^k$. Qual è il valore massimo del momento angolare orbitale per i termini spettroscopici di massima molteplicità di spin.

Risoluzione

Come al solito bisogna distinguere i casi in cui il livello sia semivuoto o semipieno. Se è semivuoto, cioè se $k \leq 2\ell + 1$, lo stato di spin massimo si ottiene allineando tutti gli spin degli elettroni, di modo da ottenere $S = k/2$. In queste condizioni lo stato di spin è totalmente

simmetrico. Allora, lo stato orbitale deve essere totalmente antisimmetrico. Dunque, deve essere l'antisimmetrizzato dello stato

$$|m_1 = \ell \ m_2 = \ell - 1 \ \dots \ m_k = \ell - k + 1\rangle$$

che ha $L = M$ come si vede applicandovi L_+ (dopo aver antisimmetrizzato!). Ma M vale

$$L = M = \sum_{i=0}^{k-1} (\ell - i) = \ell k + \frac{k(k-1)}{2} = \frac{(2\ell - k + 1)k}{2}.$$

Nel caso di guscio semipieno, non è possibile ottenere uno stato orbitale totalmente antisimmetrico. Usando il solito *trucco* delle lacune, abbiamo $\kappa = 2(2\ell + 1) - k$ lacune, perciò troviamo

$$L = \frac{(2\ell - \kappa + 1)\kappa}{2} = \frac{(4\ell + 2 - k)(k - 2\ell - 1)}{2}.$$

■

Esercizio IV.7 Si consideri l'hamiltoniana di spin-orbita di un atomo con N elettroni,

$$H_{\text{so}} = \sum_{\alpha=1}^N \xi(r_\alpha) \mathbf{l}^{(\alpha)} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(\alpha)}$$

Calcolare il valor medio di H_{so} su di un guscio chiuso.

Risoluzione Un guscio chiuso ha (una base di vettori con) $L = 0$ e $S = 0$, perciò $J = 0$, da cui, usando il teorema della proiezione di Wigner-Eckart si conclude che il valor medio dello spin-orbita è nullo.

In ogni caso, notando che

$$[l_a^{(\alpha)}, L_b] = i\varepsilon_{abc} l_c^{(\alpha)}$$

si ottiene

$$l_c^{(\alpha)} = -\frac{i}{2}\varepsilon_{abc} [l_a^{(\alpha)}, L_b]$$

perciò, se ψ è il vettore su cui vogliamo calcolare il valor medio, ricordando che

$$L^2\psi = 0 \implies L_a\psi = 0$$

per ogni $a \in J_3$ si ha

$$\begin{aligned} \sum \langle \psi | \xi(r_\alpha) l_c^{(\alpha)} \sigma_c^{(\alpha)} | \psi \rangle &= \sum -\frac{i}{2}\varepsilon_{abc} \langle \psi | \xi(r_\alpha) [l_a^{(\alpha)}, L_b] \sigma_c^{(\alpha)} | \psi \rangle = \\ &= \sum -\frac{i}{2}\varepsilon_{abc} \left(\langle \psi | \xi(r_\alpha) l_a^{(\alpha)} \sigma_c^{(\alpha)} L_b | \psi \rangle - \langle \psi | L_b \xi(r_\alpha) l_a^{(\alpha)} \sigma_c^{(\alpha)} | \psi \rangle \right) = 0 \end{aligned}$$

■ visto che L_b commuta con σ_c e con $\xi(r_\alpha)$.

Esercizio IV.8
(problema 2,
22.10.1994)

Un sistema fisico è costituito da una particella leggera di carica $-e$, spin 0 e massa m e da un nucleo pesante di carica Ze , spin 0 e massa $M \gg m$.

1. Dare una descrizione completa dello spettro e degli autovalori della hamiltoniana del sistema.

D'ora in poi si trascuri lo stato di moto del centro di massa e si consideri il solo moto relativo.

2. Si discuta se per tale sistema è possibile uno stato non normalizzabile su cui il valor medio dell'energia sia negativo.

Il sistema viene immerso ora in un campo esterno statico uniforme consistente di un campo magnetico \mathbf{B} e di un campo \mathbf{E} ad esso ortogonale. I valori delle intensità dei campi elettrico e magnetico sono tali che le energie di interazione elettrica e magnetica siano dello stesso ordine.

Si consideri l'effetto del campo sul livello fondamentale E_1 e sul primo eccitato E_2 , al primo ordine nella teoria delle perturbazioni.

3. Si discuta se nel caso del primo livello eccitato si ha completa rimozione della degenerazione.
4. Si dicano quante righe di assorbimento si osservano, irraggiando il sistema con radiazione di frequenza $h\nu \approx E_2 - E_1$, $\Delta\nu$ abbastanza grande da "vedere" tutti i sottolivelli del punto precedente, e polarizzazione nella direzione del campo magnetico.
5. Stessa domanda di cui al punto 3, nel caso in cui \mathbf{E} e \mathbf{B} siano paralleli.

Risoluzione

Si tratta di un atomo idrogenoide in cui nucleo ed elettrone non sono dotati di spin. Questo significa che non si hanno effetti di spin-orbita (le uniche correzioni relativistiche riguardano l'energia cinetica). I livelli energetici, nel sistema di centro di massa (nel sistema del laboratorio si ha pure il continuo dovuto all'energia cinetica del centro di massa), sono dunque quelli dell'idrogeno

$$E_n = -\frac{Z^2 \mu e^4}{2n^2 \hbar^2}$$

dove $\mu \doteq mM/(m+M)$ è la massa ridotta. I livelli energetici sono degeneri su ℓ : $0 \leq \ell \leq n-1$ e, fissati n, ℓ , su m : $-\ell \leq m \leq \ell$. Dunque, ciascun E_n è n^2 volte degenero.

Una base per gli autostati (nel sistema di centro di massa nel quale ci poniamo definitivamente) dell'hamiltoniana è data da $|n \ell m\rangle$ che sono tutti normalizzabili e dagli $|E \ell m\rangle$ che invece non sono normalizzabili (radialmente), cioè

$$\langle E' \ell' m' | E \ell m \rangle = \delta_{\ell \ell'} \delta_{mm'} \delta(E - E')$$

per $E, E' \geq 0$.

Prendendo una combinazione lineare di un autostato a energia maggiore di 0 con uno a energia negativa è possibile scegliere opportunamente le costanti e le energie in gioco, in modo da rendere il valor medio negativo.

In alternativa, consideriamo lo stato

$$|w\rangle \doteq \sum_{n=1}^{\infty} c |n 0 0\rangle$$

esso è certamente non normalizzabile, inoltre

$$\langle w | H | w \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |c|^2 E_n < 0.$$

Veniamo ora al problema vero e proprio: immergiamo il sistema nel campo descritto. La hamiltoniana è modificata a causa dell'interazione della particella carica con il campo elettrico e con il campo magnetico. Se poniamo il campo elettrico lungo l'asse x e il campo magnetico lungo l'asse z , abbiamo, posto $\mathcal{E} \doteq |\mathbf{E}|$

$$\begin{aligned} H_{\text{el}} &= e\mathcal{E}x \\ H_{\text{mag}} &= \frac{e}{2mc} \mathbf{L} \cdot \mathbf{B} = \frac{e}{2mc} BL_z \end{aligned}$$

perciò la nostra hamiltoniana diviene

$$H = H_0 + H_{\text{el}} + H_{\text{mag}}$$

Il problema chiede di riguardare $H' = H_{\text{el}} + H_{\text{mag}}$ come una perturbazione. Inoltre, ci chiede di valutarne gli effetti sugli stati a $n = 1$ e $n = 2$.

Vediamo le regole di selezione per i due termini perturbativi. H_{el} è la componente di un vettore, perciò $\Delta\ell = \pm 1, 0$ e $\Delta m = \pm 1$. Siccome H_{el} è dispari, essa connette solo stati con parità diverse, perciò $\Delta\ell = \pm 1$. La perturbazione magnetica è già diagonale nella base $|n \ell m\rangle$ e vale $m\mu B$. Ne viene che il fondamentale resta inalterato al primo ordine nella PT.

Detto questo, fissato $n = 2$, rispetto alla base $|11\rangle, |1-1\rangle, |00\rangle, |10\rangle$ si ha che la matrice

della perturbazione risulta

$$H' = \left(\begin{array}{ccc|c} \mu B & 0 & A_1 & 0 \\ 0 & -\mu B & A_2 & 0 \\ A_1 & A_2 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right)$$

Ora, lo stato $|210\rangle$ rimane imperturbato. Affinché la perturbazione rimuova completamente la degenerazione, ci occorre che il blocco superiore della matrice non ammetta autovalori nulli. D'altra parte, si ha subito che la traccia del blocco è nulla. Per valutarne gli autovalori, non ci resta che confrontare A_1 e A_2 :

$$A_1 = \langle 00 | H_{el} | 11 \rangle; \quad A_2 = \langle 00 | H_{el} | 1-1 \rangle$$

Per il teorema della proiezione di Wigner-Eckart, visto che

$$x = \frac{V_{-1} - V_1}{\sqrt{2}}$$

con V_{-1}, V_0, V_1 componenti di un tensore sferico di rango 1. Ricordando che

$$V_{\pm 1} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_1^{\pm 1}(\theta, \varphi)$$

abbiamo

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{e\mathcal{E}}{\sqrt{2}} \langle 00 | V_{-1} | 11 \rangle = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \frac{e\mathcal{E}}{\sqrt{2}} \int dr r^3 d\Omega Y_0^{0*} R_{20} Y_1^{-1} R_{21} Y_1^1 \\ &= \sqrt{\frac{2\pi}{3}} e\mathcal{E} \int d\Omega Y_0^{0*} Y_1^{-1} Y_1^1 \int dr r^3 R_{20} R_{21} \end{aligned}$$

ricordiamo che (teorema di Wigner-Eckart)

$$\int d\Omega Y_\ell^{m*} Y_{\ell_1}^{m_1} Y_{\ell_2}^{m_2} = \sqrt{\frac{(2\ell_1 + 1)(2\ell_2 + 1)}{4\pi(2\ell + 1)}} \langle \ell_1 m_1 \ell_2 m_2 | \ell_1 \ell_2 \ell m \rangle \langle \ell_1 0 \ell_2 0 | \ell_1 \ell_2 \ell m \rangle$$

da cui

$$\int d\Omega Y_0^{0*} Y_1^{-1} Y_1^1 = -\sqrt{\frac{9}{4\pi}} \frac{1}{3} = -\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$

Mentre

$$\begin{aligned} A_2 &= -\frac{e\mathcal{E}}{\sqrt{2}} \langle 00 | V_1 | 1-1 \rangle = -\sqrt{\frac{4\pi}{3}} \frac{e\mathcal{E}}{\sqrt{2}} \int dr r^2 d\Omega Y_0^{0*} R_{20} Y_1^1 R_{21} Y_1^{-1} \\ &= -\sqrt{\frac{2\pi}{3}} e\mathcal{E} \int d\Omega Y_0^{0*} Y_1^1 Y_1^{-1} \int dr r^2 R_{20} R_{21} = -A_1 \end{aligned}$$

Infine,

$$\begin{aligned} \int dr r^3 R_{20} R_{21} &= \frac{2}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_B} \right)^3 \int_0^\infty dr r^3 2 \left(1 - \frac{Zr}{2a_B} \right) e^{-Zr/2a_B} \frac{Zr}{2a_B} e^{-Zr/2a_B} = \\ &= \frac{4}{\sqrt{3}} \frac{2a_B}{Z} \int_0^\infty x^4 (1-x) e^{-2x} dx = -\frac{1}{2} \sqrt{3} \end{aligned}$$

Siccome

$$\int_0^\infty x^4 (1-x) e^{-2x} dx = -\frac{9}{8}$$

si conclude

$$A_1 = \frac{3}{\sqrt{2}} \frac{a_B e\mathcal{E}}{Z} = \frac{3}{\sqrt{2}} a_B e\mathcal{E} = -A_2$$

In definitiva, la matrice da diagonalizzare è la seguente

$$\begin{pmatrix} \mu B & 0 & \frac{3}{\sqrt{2}} a_B e \mathcal{E} \\ 0 & -\mu B & -\frac{3}{\sqrt{2}} a_B e \mathcal{E} \\ \frac{3}{\sqrt{2}} a_B e \mathcal{E} & -\frac{3}{\sqrt{2}} a_B e \mathcal{E} & 0 \end{pmatrix}$$

La matrice ha determinante e traccia nulli (per il determinante si ha che la somma della prima e della seconda riga è proporzionale alla terza riga), perciò ha equazione secolare $-\lambda^3 + A^2 \lambda$. Dunque, la matrice ammette tre autovalori, due opposti e uno nullo. Il fatto che si abbia un autovalore nullo, implica che la degenerazione non è completamente rimossa. Con un semplice calcolo si ha che

$$A^2 = 2 \left(\frac{3}{\sqrt{2}} a_B e \mathcal{E} \right)^2 + (\mu B)^2$$

gli autovalori opposti sono

$$\lambda = \pm A = \pm \sqrt{\frac{9}{2} a_B^2 e^2 \mathcal{E}^2 + \mu^2 B^2}.$$

La radiazione è polarizzata lungo z perciò eccita stati solo con $\Delta L = \pm 1, 0$ e $\Delta M = 0$. Perciò avremo una riga di assorbimento dal fondamentale allo stato $|2\ 1\ 0\rangle$ alla frequenza imperturbata ν . Questo perché la transizione allo stato $|2\ 0\ 0\rangle$ a partire dal fondamentale è rigorosamente proibita.

Infine, vediamo cosa accade se i campi sono paralleli. La perturbazione diventa

$$\begin{aligned} H_{\text{el}} &= e \mathcal{E} z \\ H_{\text{mag}} &= \frac{e}{2mc} \mathbf{L} \cdot \mathbf{B} = \frac{e}{2mc} B L_z \end{aligned}$$

Le regole di selezione per l'hamiltoniana associata al campo elettrico sono

$$\Delta m = 0; \Delta \ell = \pm 1, 0$$

le parità devono essere opposte. Infine, scelta la base $|1\ 0\rangle, |0\ 0\rangle, |1\ 1\rangle, |1\ -1\rangle$, la perturbazione diviene

$$\begin{pmatrix} 0 & 3ea_B \mathcal{E} & 0 & 0 \\ 3ea_B \mathcal{E} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mu B & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\mu B \end{pmatrix}$$

Gli autovalori sono tutti distinti, a parte il caso accidentale in cui

$$3ea_B \mathcal{E} = \mu B \iff \frac{|\mathbf{E}|}{|\mathbf{B}|} = \frac{\mu}{3ea_B}.$$

Esercizio IV.9
(problema 2,
29.01.1994)

Sperimentalmente si osserva che lo stato fondamentale dell'atomo di idrogeno consiste di un doppietto di livelli separati da $\Delta E \approx 6 \times 10^{-6} eV$. Vogliamo provare a spiegare questo fatto tenendo conto che protone ed elettrone hanno spin $1/2$ e corrispondenti momenti magnetici

$$\boldsymbol{\mu}_e = -\frac{e\hbar}{2mc} 2\mathbf{s}_e; \quad \boldsymbol{\mu}_p = \frac{e\hbar}{2m_p c} g_p \mathbf{s}_p;$$

che interagiscono. Nella seconda formula compare il fattore giromagnetico del protone, g_p , che assumiamo non noto.

1. Mostrare che si assume come interazione tra i momenti magnetici

$$H_1 \propto \frac{1}{a_B^3} (\boldsymbol{\mu}_e \cdot \boldsymbol{\mu}_p - 3 (\boldsymbol{\mu}_e \cdot \mathbf{n}) (\boldsymbol{\mu}_p \cdot \mathbf{n}))$$

ispirata alla fisica classica (\mathbf{n} è il versore della posizione relativa e - p), allora $\Delta E = 0$ al primo ordine in teoria delle perturbazioni.

Si assuma invece come hamiltoniana di interazione la seguente

$$H_{\text{hfs}} = \frac{8\pi}{3} \frac{e^2 \hbar^2}{4mm_p c^2} (2\mathbf{s}_e) (g_p \mathbf{s}_p) \delta(\mathbf{r})$$

che qui non tenteremo di giustificare.

2. Mostrare che H_{hfs} dà effettivamente luogo a un doppietto di livelli e darne le degenerazioni.
3. Usando il dato sperimentale, si calcoli g_p .

Un gas di atomi a temperatura ambiente è ora posto in campo magnetico esterno uniforme pulsante con frequenza ν .

4. Si scriva l'hamiltoniana relativa all'interazione atomo campo.
5. Si dica per quale valore di ν il campo induce transizioni fra gli stati dei due livelli.
6. Si dica quale stato del livello alto può essere raggiunto dal livello basso tramite tali transizioni.

Risoluzione Dal punto di vista delle variabili orbitali i momenti magnetici sono semplicemente delle costanti, perciò l'hamiltoniana diviene del tipo

$$-3 \frac{1}{|\mathbf{r}|^2} \left[(\mathbf{A} \cdot \mathbf{r}) (\mathbf{B} \cdot \mathbf{r}) - \frac{1}{3} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) (\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}) \right]$$

che è un tensore stracciato e come tale ha elementi di matrice nulli tra stati con $\Delta\ell = 0$. Se ne conclude che, essendo il fondamentale costituito da stati con $\ell = 0$, l'hamiltoniana non è in grado di spiegare, al primo ordine in PT, lo sdoppiamento dei livelli energetici.

Veniamo a 2. Siccome l'hamiltoniana di struttura iperfine comprende un termine in $\mathbf{s}_e \cdot \mathbf{s}_p$ conviene introdurre lo spin totale $\mathbf{S} = \mathbf{s}_e + \mathbf{s}_p$, ed esprimere gli autostati del fondamentale nella base

$$|n \ell m S S'_z\rangle$$

(è sottinteso che $s_e^2 = s_p^2 = 1/2$). In questa base la hamiltoniana di struttura fine si diagonalizza, essendo

$$H_{\text{hfs}} = \frac{8\pi}{3} \frac{e^2 \hbar^2}{4mm_p c^2} 2g_p \delta(\mathbf{r}) \mathbf{s}_e \mathbf{s}_p = \frac{8\pi}{3} \frac{e^2 \hbar^2}{4mm_p c^2} 2g_p \delta(\mathbf{r}) \frac{1}{2} (\mathbf{S}^2 - \mathbf{s}_e^2 - \mathbf{s}_p^2)$$

perciò gli elementi di matrice divengono

$$\begin{aligned} \frac{8\pi}{3} \frac{e^2 \hbar^2}{4mm_p c^2} 2g_p \psi^2(0) \frac{1}{2} \left(S(S+1) - \frac{3}{2} \right) &= \frac{1}{\pi a_B^3} \frac{2\pi}{3} \frac{e^2 \hbar^2}{mm_p c^2} g_p \left(S(S+1) - \frac{3}{2} \right) = \\ &= \frac{2}{3} \frac{1}{a_B^3} \frac{e^2 \hbar^2}{mm_p c^2} g_p \left(S(S+1) - \frac{3}{2} \right) \end{aligned}$$

Ora

$$\begin{aligned} a_B &= \frac{\hbar^2}{me^2} \Rightarrow \frac{m^3 e^8}{\hbar^4} \frac{1}{mm_p c^2} = 2 \frac{1}{2} mc^2 \frac{e^8}{\hbar^4 c^4} \frac{m}{m_p} = 2 \frac{1}{2} mc^2 \alpha^4 \frac{1}{mm_p} = \\ &= 2R\alpha^2 \frac{m}{m_p} \end{aligned}$$

sicchè gli elementi di matrice sono

$$\frac{4}{3} R\alpha^2 \frac{m}{m_p} g_p \left(S(S+1) - \frac{3}{2} \right)$$

Si ha dunque la separazione dei livelli in un tripletto, spin $S = 1$, e in un singoletto $S = 0$ con il tripletto più alto del singoletto:

$$E_{\text{tri}} - E_{\text{sing}} = \frac{4}{3} R\alpha^2 \frac{m}{m_p} g_p$$

da cui

$$g_p = \frac{3}{4} \frac{m_p}{m} \frac{1}{R} (137)^2 6 \times 10^{-6} \approx 5.71$$

(abbastanza buono (3%) visto che il valore sperimentale è 5.58).

L'hamiltoniana di interazione comprende l'accoppiamento del campo magnetico con gli spin di protone ed elettrone e con il moto orbitale. Quest'ultimo accoppiamento è del tipo $\mathbf{L} \cdot \mathbf{B}$, perciò non interviene sul livello fondamentale, in cui $L = 0$. D'altra parte a temperatura ambiente, l'unico livello (equamente) popolato è il fondamentale, perciò

$$H_{\text{mag}} = -(\boldsymbol{\mu}_e \cdot \mathbf{B} + \boldsymbol{\mu}_p \cdot \mathbf{B})$$

Siccome μ_p è qualche centinaio di volte inferiore a μ_e , trascuriamo il secondo addendo, allora

$$H_{\text{mag}} = \frac{e\hbar}{2mc} 2s_e \mathbf{B}_0 \cos(2\pi\nu t)$$

Scelto l'asse z lungo \mathbf{B}_0 , abbiamo

$$H_{\text{mag}} = \frac{e\hbar B_0}{mc} \cos(2\pi\nu t) s_{ze}$$

Vediamo quali sono le transizioni possibili. Siccome \mathbf{s}_e è un vettore sotto \mathbf{S} , deve risultare $\Delta S = \pm 1, 0$ e $\Delta S'_z = 0$ (visto che H_{mag} è proporzionale alla terza componente di un vettore). Le transizioni tra singoletto e tripletto sono perciò possibili se $h\nu = \Delta E \approx 6 \times 10^{-6} \text{ eV}$. L'unico stato raggiungibile dal livello basso è quello che presenta $S'_z = 0$.

Esercizio IV.10
(problema 2,
14.03.1992)

Si consideri l'atomo di idrogeno, tenendo conto del fatto che anche il protone è dotato di spin $1/2$ e ha fattore giromagnetico $g_p = 5.58$.

i. Trascurando ogni interazione fra i momenti magnetici dell'elettrone e del protone, si dica quant'è la degenerazione dei livelli energetici dell'atomo.

Si ponga un'ampolla di tali atomi a temperatura $T = 1K$ in un campo magnetico costante $B = 2 \times 10^4 G$ diretto lungo l'asse z .

ii. Si dica come viene rimossa la degenerazione degli stati $n = 1$.

iii. Si calcoli la polarizzazione

$$P = \frac{N_+ - N_-}{N_+ + N_-}$$

tanto per i protoni che per gli elettroni, N_{\pm} essendo il numero di particelle nell'autostato di s_z con autovalore $\pm 1/2$.

Il sistema viene sottoposto a un ulteriore campo magnetico oscillante, polarizzato lungo l'asse z .

iv. Si dica a quali frequenze del campo magnetico si osserva assorbimento.

Risoluzione

Per l'atomo di idrogeno le correzioni ai livelli energetici dovute alla relatività sono dell'ordine di 5×10^{-5} e perciò le trascuriamo. In questo modo si ha una degenerazione pari a n^2 considerando le variabili orbitali. Esse però commutano e un formano un set completo di osservabili compatibili con le variabili di spin s_{ze} e s_{zp} relative a elettrone e protone. In definitiva, la degenerazione dei livelli energetici è $4n^2$.

Alla temperatura di $1K$ il solo livello fondamentale è popolato in modo consistente, perciò l'interazione magnetica non accoppia il momento orbitale, ma gli spin di elettrone e protone.

$$H_{\text{mag}} = -(\boldsymbol{\mu}_e + \boldsymbol{\mu}_p) \cdot \mathbf{B}$$

siccome \mathbf{B} è diretto lungo l'asse z , troviamo

$$H_{\text{mag}} = \frac{e\hbar B_0}{2mc} \left(g_e s_{ze} - \frac{m}{m_p} g_p s_{zp} \right)$$

Siccome la perturbazione introdotta dallo spin elettronico è molto più grande di quella protonica, trattiamo la seconda come una perturbazione sulla prima.

Fissiamo una volta per tutte $n = 1$, $\ell = m = 0$. Le regole di selezione introdotte da s_{ze} sono $\Delta s'_{ze} = 0$ e $\Delta s'_{zp} = 0$, visto che gli stati sono fattorizzati. Possiamo scegliere come base per il livello fondamentale la seguente

$$|s'_{zp} = + s'_{ze} = +\rangle; |-\ +\rangle; |+\ -\rangle; |-\ -\rangle$$

di modo che la perturbazione diviene

$$\begin{pmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -a & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -a \end{pmatrix}, \quad a = \frac{1}{2} \frac{e\hbar B_0}{2mc} g_e$$

si hanno dunque due sottolivelli doppiamente degeneri separati in energia da

$$\Delta = \frac{e\hbar B_0}{2mc} g_e$$

In ciascun sottolivello la degenerazione è rimossa dalla parte protonica, per cui il livello a energia maggiore ha $s'_{zp} = -1/2$. La separazione vale stavolta

$$\delta = \frac{e\hbar B_0}{2mc} g_p \frac{m}{m_p} = \Delta \frac{g_p}{g_e} \frac{m}{m_p} \approx (1.51 \times 10^{-3}) \Delta.$$

Veniamo alla polarizzazione: se con N indichiamo il numero di elettroni, abbiamo $N_+ + N_- = N$. Gli elettroni con spin up si trovano nei due sottolivelli superiori, perciò, $\beta = 1/k_B T = 12000 eV$

$$\frac{N_+}{N_-} = e^{-\beta \Delta}$$

e dunque

$$P_e = \frac{-1 + e^{-\beta \Delta}}{1 + e^{-\beta \Delta}} = -0.88$$

Per i protoni, trascurando le esigue popolazioni nei sottolivelli a energia più alta, visto che i protoni con spin up popolano il livello a energia inferiore,

$$\frac{N_-}{N_+} = e^{-\beta \delta}$$

e dunque

$$P_p = \frac{1 - e^{-\beta \delta}}{1 + e^{-\beta \delta}} = 0.002.$$

Infine, siccome la radiazione è polarizzata lungo l'asse z possiamo assumere che il campo magnetico sia diretto lungo l'asse x . In tal modo la hamiltoniana di interazione diviene

$$H_{\text{em}} = B_x \cos(\omega t) \frac{e\hbar}{2mc} \left(g_e s_{xe} - \frac{m}{m_p} g_p s_{xp} \right)$$

Le regole di selezione sono: per la parte elettronica $\Delta s'_{ze} = \pm 1$, $\Delta s'_{zp} = 0$, per la parte protonica, $\Delta s'_{zp} = \pm 1$, $\Delta s'_{ze} = 0$.

Le transizioni dovute al termine protonico hanno lunghezza d'onda $\lambda = hc/\delta$, quelle elettroniche $\lambda = hc/\Delta$. Si individuano perciò due righe di assorbimento. ■

Esercizio IV.11
(problema 1,
26.09.1992)

Si consideri un atomo contenente N elettroni. Si calcoli la regola di commutazione tra i

seguenti operatori

$$R_i = \sum_{\alpha=1}^N r_{i\alpha}; \quad P_j = \sum_{\alpha=1}^N p_{j\alpha}$$

dove $r_{i\alpha}$ e $p_{i\alpha}$ sono le componenti i -esime della posizione e dell'impulso della α -esima particella. Usando il risultato ottenuto, si determini quanto vale in termini di N , della massa e della carica dell'elettrone, la somma eseguita su tutti gli autostati ϕ_l dell'energia

$$\sum_{\phi_l} (E_l - E_k) B(k \rightarrow l)$$

dove $B(k \rightarrow l)$ è il coefficiente di transizione indotta di Einstein in approssimazione di dipolo e dove si è ammesso che tutti gli autovalori dell'energia siano discreti (avendo, per esempio, messo l'atomo in una scatola).

Si dica come si riscrive la regola di somma nel caso in cui lo spettro sia misto (si rimuove la scatola).

Risoluzione Ciascuna $r_{i\alpha}$ commuta con ogni $p_{j\beta}$ con $\alpha \neq \beta$ o $i \neq j$. Dunque,

$$[R_i, P_j] = \sum_{\alpha=1}^N [r_{i\alpha}, p_{j\alpha}] = \sum_{\alpha=1}^N i\hbar\delta_{ij} = iN\hbar\delta_{ij}.$$

Il coefficiente di Einstein vale

$$B(k \rightarrow l) = \frac{2\pi}{3\hbar^2} \sum_{i=1}^3 |(\phi_l, eR_i\phi_k)|^2$$

Il valor medio che dobbiamo calcolare si compone allora di tre addendi del tipo

$$\sum_{\phi_l} (E_l - E_k) \frac{2\pi e^2}{3\hbar^2} |(\phi_l, R_i\phi_k)|^2$$

con $i = 1, 2, 3$.

Dovendo usare il risultato di cui al punto precedente

$$Ni\hbar = \langle k | R_j P_j | k \rangle - \langle k | P_j R_j | k \rangle = \sum_l (\langle k | R_j | l \rangle \langle l | P_j | k \rangle - \langle k | P_j | l \rangle \langle l | R_j | k \rangle)$$

Ora, essendo

$$p_{\alpha i} = \frac{m}{i\hbar} [q_{\alpha i}, H] \implies P_i = \frac{m}{i\hbar} [R_i, H],$$

abbiamo

$$\begin{aligned} -\frac{N\hbar^2}{m} &= \sum_l (\langle k | R_j | l \rangle \langle l | [R_j, H] | k \rangle - \langle k | [R_j, H] | l \rangle \langle l | R_j | k \rangle) = \\ &= 2 \sum_l (E_k - E_l) \langle k | R_j | l \rangle \langle l | R_j | k \rangle = 2 \sum_l (E_k - E_l) |(\phi_l, R_j\phi_k)|^2 \end{aligned}$$

sicché

$$\frac{N\hbar^2}{2m} = \sum_l (E_l - E_k) |(\phi_l, R_j\phi_k)|^2$$

cioè

$$\sum_{\phi_l} (E_l - E_k) B(k \rightarrow l) = 3 \frac{N\hbar^2}{2m} \frac{2\pi e^2}{3\hbar^2} = \frac{N\pi e^2}{m}.$$

Rimuovendo la scatola lo spettro diventa misto: permangono autovalori discreti negativi, ma compaiono autovalori continui per $E \geq 0$.

$$\sum_{\phi_l} (E_l - E_k) \frac{2\pi e^2}{3\hbar^2} |(\phi_l, R_i\phi_k)|^2 + \frac{2\pi e^2}{3\hbar^2} \sum_s \int_0^{+\infty} (E - E_k) |(\phi_{sE}, R_i\phi_k)|^2 dE$$

dove s sono degli indici che tengono conto della degenerazione degli autovalori continui che ammettono la seguente normalizzazione

$$(\phi_{sE}, \phi_{s'E'}) = \delta_{ss'} \delta(E - E')$$

sicché la regola di somma diviene

$$\sum_{\phi_l} (E_l - E_k) B(k \rightarrow l) + \int_0^{+\infty} (E - E_k) B_k(E) dE$$

Esercizio IV.12
(problema 1,
14.07.1992)

Si consideri l'atomo di idrogeno nel quale, per semplicità, lo spin dell'elettrone sia sistematicamente ignorato. Si assume il fatto (che non è spiegato dalla meccanica quantistica non relativistica) che i livelli energetici $2s$ e $2p$ non sono perfettamente degeneri, essendo il primo superiore in energia della quantità 1057.7 MHz (Lamb shift).

- (i) Si vuole sapere l'effetto di un campo elettrico uniforme di modulo $E \approx 10 \text{ V cm}^{-1}$ su detti livelli, all'ordine più basso in teoria delle perturbazioni.
- (ii) Rimosso il campo elettrico e immerso l'atomo in un campo magnetico uniforme di modulo B , diretto lungo l'asse z , si chiede per quali valori B_{lc} di B ci sia level crossing e quali sono gli stati che degenerano in energia.
- (iii) Fissando il modulo del campo magnetico al valore B_{lc} , si chiede di nuovo quanto al primo punto, se il campo elettrico giace ora lungo il piano xy . In particolare, si determini come dipende la distanza in energia dei livelli dalla orientazione del campo elettrico stesso.

Risoluzione

Gli autostati della hamiltoniana imperturbata si classificano tramite i numeri quantici n, l, m . Lo stato fondamentale, $n = 1$, è non degenero, mentre il primo eccitato ha degenerazione pari a 4. Tuttavia, assunto che gli stati s e gli stati p siano separati in energia, dobbiamo valutare se la perturbazione apportata dal campo elettrico è o meno trascurabile nei rispetti della separazione di Lamb shift. Quest'ultima vale

$$\Delta E_{LS} = 1057.7 \text{ MHz} = \frac{1057.7}{3 \times 10^{12}} 12400 \text{ eV} = 4.37 \times 10^{-6} \text{ eV}$$

Invece, la perturbazione è dell'ordine di qualche

$$eEa_B \approx e10 \text{ V cm}^{-1} 0.5 \times 10^{-8} \text{ cm} = 5 \times 10^{-8}$$

Dunque, possiamo applicare la perturbazione ai livelli degeneri al multipletto $2p$ e, separatamente, ai livelli non degeneri per $1s$ e $2s$.

La perturbazione è eEz , dunque è vettoriale e dispari. Perciò connette solo stati con parità opposta. Ne segue che ammette le regole di selezione $\Delta l = \pm 1$, $\Delta m = 0$ $w'w'' = -1$. Dunque, tutti i livelli considerati sono tutti imperturbati al primo ordine in PT.

La hamiltoniana di interazione con il campo magnetico (visto che si ignora lo spin) è data dal solo termine di accoppiamento orbitale e vale

$$H_{\text{mag}} = \frac{eB}{2mc} L_z.$$

Una tale hamiltoniana è già diagonalizzata nella base $|nlm\rangle$. Essa non ha alcun effetto sugli stati con $m = 0$, perciò su $1s$ e $2s$, mentre rimuove la degenerazione del $2p$, abbassando lo stato $|21-1\rangle$ della quantità $e\hbar B/2mc$. Si avrà level crossing nel momento in cui

$$\frac{e\hbar B}{2mc} = \Delta E_{LS}$$

perciò

$$B_{lc} = \frac{2mc}{e\hbar} \Delta E_{LS} = \frac{\Delta E_{LS}}{\mu_B} = 753.8 \text{ G}$$

Accendiamo adesso anche il campo elettrico lungo il piano xy . Il livello caratterizzato da $|200\rangle$ e $|211\rangle$ dista molto di più di eEa_B da $|210\rangle$. La separazione tra $|210\rangle$ e $|21-1\rangle$ è

pari a ΔE_{LS} , come prima, molto maggiore di eEa_B . Dobbiamo dunque applicare la teoria perturbativa degenerata solo al livello spannato da $|200\rangle$ e $|211\rangle$.

La perturbazione è

$$H_{el} = eE(x \cos \varphi + y \sin \varphi)$$

Essa ha le seguenti regole di selezione $\Delta l = \pm 1, \Delta m = \pm 1, w'w'' = -1$. Tutti i livelli non degeneri sono imperturbati, mentre il livello in cui vi era level crossing subisce la seguente perturbazione

$$h_{el} \doteq \begin{pmatrix} 0 & h \\ h^* & 0 \end{pmatrix}$$

dove

$$h = \langle 200 | H_{el} | 211 \rangle$$

Introduciamo gli operatori (di salita e discesa)

$$\begin{aligned} v_+ &= x + iy \\ v_- &= x - iy \end{aligned}$$

da cui $x = (v_+ + v_-)/2$, mentre $y = (v_+ - v_-)/(2i)$, perciò

$$\begin{aligned} 2h &= 2 \langle 200 | H_{el} | 211 \rangle = eE \cos \varphi \langle 200 | v_- | 211 \rangle + ieE \sin \varphi \langle 200 | v_+ | 211 \rangle = \\ h &= eE \frac{e^{i\varphi}}{2} \langle 200 | v_- | 211 \rangle \end{aligned}$$

Gli autovalori della matrice h_{el} sono $\pm |h| = \pm 3\sqrt{2}eEa_B/2$ agli autovettori

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} (|200\rangle + |211\rangle) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (|200\rangle - |211\rangle) \end{aligned}$$

- e, come doveva essere (chi l'ha deciso qual è l'asse x ?), gli autovalori non dipendono da φ .

Esercizio IV.13
(problema 2,
13.07.2001)

Il fattore giromagnetico g di un sistema di massa M è definito dalla relazione

$$g \frac{e\hbar}{2Mc} \mathbf{B} \cdot \langle s | \mathbf{J} | s \rangle = \langle s | \mathbf{H}_{int} | s \rangle$$

dove $|s\rangle$ e H_{int} sono, ordinatamente, lo stato del sistema in quiete e l'hamiltoniana dell'interazione tra il sistema e un campo magnetico costante e uniforme \mathbf{B} , nel limite per $\mathbf{B} \rightarrow 0$.

Si consideri un sistema composto dalla particella 1 di spin $1/2$, carica 0 e massa m_1 , e dalla particella 2 di spin 0 carica e (positiva) e massa m_2 . Lo stato del sistema in esame sia tale che $J = 1/2$, $J'_z = 1/2$ e la parità orbitale sia -1 .

- (i) Si dica quali sono i possibili valori del momento angolare orbitale relativo.
- (ii) Si esprima lo stato del sistema detto sopra, in termini del momento angolare orbitale relativo e dello spin della particella 1.
- (iii) Si calcoli il fattore giromagnetico del sistema, nell'ipotesi che il momento magnetico intrinseco della particella 1 sia nullo.

Risoluzione

Il sistema è descritto da un vettore d'onda orbitale fattorizzato $\Phi(\mathbf{Q})\psi(\mathbf{q})$ dove \mathbf{Q} è il vettore descrivente il centro di massa e $\mathbf{q} = \mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1$. Il sistema è in quiete, perciò $\mathbf{P} = 0$, essendo

$$\Phi(\mathbf{Q}) \propto e^{i\mathbf{P}\cdot\mathbf{Q}/\hbar} = 1$$

si ha che il sistema è completamente descritto dalla $\psi(\mathbf{r})$. Quest'ultima è data da sovrapposizioni di onde del tipo $\psi(\mathbf{q}) = R(q) Y_L^M(\theta, \varphi)$ che hanno parità $(-1)^L$.

Il valore $J = 1/2$ è allora dato dalla composizione di L , momento angolare relativo e s , spin

della particella 1. Siccome $s = 1/2$ e noi vogliamo $J = 1/2$ abbiamo che $L = 1, 0$. La parità cancella $L = 0$, perciò la risposta alla prima domanda è $L = 1$.

Dobbiamo adesso esprimere lo stato $J = 1/2, J'_z = 1/2$ in termini di M e s'_z essendo L e s fissati a 1 e $1/2$ rispettivamente.

Abbiamo subito che

$$|J = 3/2, J'_z = 3/2\rangle = |M = 1, s = 1/2\rangle$$

Applicando l'operatore di discesa troviamo

$$|J = 3/2, J'_z = 1/2\rangle \propto \sqrt{2}|M = 0, s = 1/2\rangle + |M = 1, s = -1/2\rangle$$

normalizzando

$$|J = 3/2, J'_z = 1/2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|M = 0, s = 1/2\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}|M = 1, s = -1/2\rangle$$

a questo punto lo stato $|J = 1/2, J'_z = 1/2\rangle$ è semplicemente l'ortogonale a $|J = 3/2, J'_z = 1/2\rangle$, cioè

$$|J = 1/2, J'_z = 1/2\rangle = -\sqrt{\frac{1}{3}}|M = 0, s = 1/2\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|M = 1, s = -1/2\rangle \doteq |s\rangle.$$

Adesso, determinato s , si tratta di trovare la hamiltoniana di interazione. Siccome il campo magnetico è uniforme e costante un potenziale vettore a divergenza nulla per esso è

$$\mathbf{A} = -\frac{1}{2}\mathbf{q} \times \mathbf{B}$$

L'accoppiamento diventa allora

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{1}{2m_2} \left(\mathbf{p}_2^2 - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 + V$$

siccome $\text{div } \mathbf{A} = 0$, si ha, trascurando i termini in \mathbf{B}^2 (visto che $\mathbf{B} \rightarrow 0$)

$$\begin{aligned} H &= \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} - \frac{e}{m_2 c} \mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{A} + V = \\ &= \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} + \frac{e}{2m_2 c} \mathbf{B} \cdot (\mathbf{p}_2 \times \mathbf{q}_2) + V = \\ &= \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} - \frac{e\hbar}{2m_2 c} \mathbf{B} \cdot \mathbf{l}_2 + V = H_0 - \frac{e\hbar}{2m_2 c} \mathbf{B} \cdot \mathbf{l}_2 \end{aligned}$$

Passiamo ora nelle variabili di centro di massa

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{q} = \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2 \\ \mathbf{p} = \frac{m_2 \mathbf{p}_1 - m_1 \mathbf{p}_2}{m_1 + m_2} \end{array} \right\}, \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{Q} = \frac{m_1 \mathbf{q}_1 + m_2 \mathbf{q}_2}{m_1 + m_2} \\ \mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 \end{array} \right.$$

da cui

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{q}_2 = \mathbf{Q} + \frac{m_1}{M} \mathbf{q} \\ \mathbf{p}_2 = \mathbf{p} + \frac{m_1}{M} \mathbf{P} \end{array} \right.$$

perciò

$$H_{\text{int}} = -\frac{e}{2m_2 c} \mathbf{B} \cdot \left(\mathbf{Q} + \frac{m_1}{M} \mathbf{q} \right) \times \left(\mathbf{p} + \frac{m_1}{M} \mathbf{P} \right) = -\frac{e}{2m_2 c} \mathbf{B} \cdot \left[\mathbf{Q} \times \mathbf{p} + \frac{m_1}{M} \mathbf{q} \times \mathbf{p} \right]$$

essendo $|s\rangle$ autovettore di \mathbf{P} all'autovalore 0. Dunque,

$$H_{\text{int}} = -\frac{e}{2m_2 c} \mathbf{B} \cdot \left[\mathbf{Q} \times \mathbf{p} + \frac{m_1}{M} \hbar \mathbf{L} \right]$$

Ora, \mathbf{Q} ha per valor medio un numero ben preciso, \mathbf{p} è dispari, perciò il valor medio su $|s\rangle$ del primo addendo è nullo, in definitiva, preso $\mathbf{B} = B\mathbf{z}$

$$\langle s | H_{\text{int}} | s \rangle = -\frac{e\hbar}{2Mc} \frac{m_1}{m_2} B \langle s | L_z | s \rangle = -\frac{2}{3} \frac{e\hbar}{2Mc} \frac{m_1}{m_2} B$$

$$g \frac{e\hbar}{2Mc} \mathbf{B} \cdot \langle s | \mathbf{J} | s \rangle = g \frac{e\hbar}{2Mc} B \langle s | J_z | s \rangle = \frac{1}{2} g \frac{e\hbar}{2Mc} B$$

si conclude

$$g = -\frac{4}{3} \frac{m_1}{m_2}.$$

■

Esercizio IV.14 *Determinare il termine spettroscopico per il fondamentale dell'atomo di cromo ricordando che la configurazione elettronica di quest'ultimo vale*

$$(guscio chiuso) 3d^5 4s^1$$

Risoluzione Nell'atomo abbiamo 5 elettroni equivalenti nel livello $3d$. Lo stato fondamentale è quello di spin massimo. Allineati tutti gli spin del $3d$, abbiamo che i momenti magnetici che possono essere assegnati agli elettroni del $3d$ sono univocamente $2, 1, 0, -1, -2$ affinché l'antisimmetrizzato dello stato considerato non sia nullo. Si rinviene che $M = 0$ e che L_+

■ sullo stato così costruito è nullo, perciò $L = 0$. Dunque il fondamentale è 7S_3 .