
Esercitazioni del corso di Fisica Teorica I

Per informazioni, chiarimenti o segnalazione di errori rivolgersi a:
Dr. Daniele Montanino, Università del Salento
C/O Dip. di Fisica, stanza 220,
via Arnesano, 73100 LECCE (ITALY)
Tel/FAX: +39 0832 297 447 (interno: 7447)
e-mail: daniele.montanino@le.infn.it
web: <http://www.le.infn.it/~montanin/>

Esercizi su sistemi continui unidimensionali

Nota 1: per la teoria relativa ai seguenti esercizi ci si riferisce al seguente testo: Picasso "Lezioni di Meccanica Quantistica", edizioni ETS, §8 e 9.

Nota 2: sebbene l'oscillatore armonico sia un sistema tipicamente unidimensionale, per la sua peculiarità esso verrà trattato in separata sede.

1) Scrivere gli autostati della *particella libera*

Si intende per particella libera una particella sottoposta ad un potenziale nullo (o costante) e la cui funzione d'onda è definita su tutto \mathbf{R}^2 . L'equazione di Schrödinger sarà

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dq^2} = E\psi \Rightarrow \psi'' + k^2\psi = 0 \quad (1)$$

con $k^2 = 2mE/\hbar^2$. Come è facile vedere, non esistono autofunzioni limitate non banali ($\psi \neq 0$) per $q \rightarrow \pm\infty$ se $E \leq 0$. Per $E > 0$ le autofunzioni sono $\psi_k(q) = e^{ikq}$. Queste sono autofunzioni improprie dell'impulso, nel senso che non sono di classe $L^2(\mathbf{R})$, però soddisfano la condizione di normalizzazione

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dq \psi_{k_1}(q) \psi_{k_2}(q) \propto \delta(k_1 - k_2) \quad (2)$$

2) Calcolare la corrente di probabilità (si veda l'appendice A) per le autofunzioni dell'esercizio precedente

Si ha

$$j = \frac{i\hbar}{2m} \left(e^{ikq} \frac{d}{dq} e^{-ikq} - e^{-ikq} \frac{d}{dq} e^{ikq} \right) = \frac{\hbar k}{m} \quad (3)$$

Ne consegue che se $k > 0$ ($k < 0$) la funzione d'onda $\psi_k(q)$ può essere interpretata come una particella che si muove nella direzione positiva (negativa) dell'asse delle q .

3) Calcolare autovalori ed autostati per una particella in un *pozzo di potenziale* (detto anche *potential box*), ovvero per una particella confinata nell'intervallo $q \in [-a, +a]$ ($a > 0$) con le condizioni al contorno $\psi(a) = \psi(-a) = 0$.

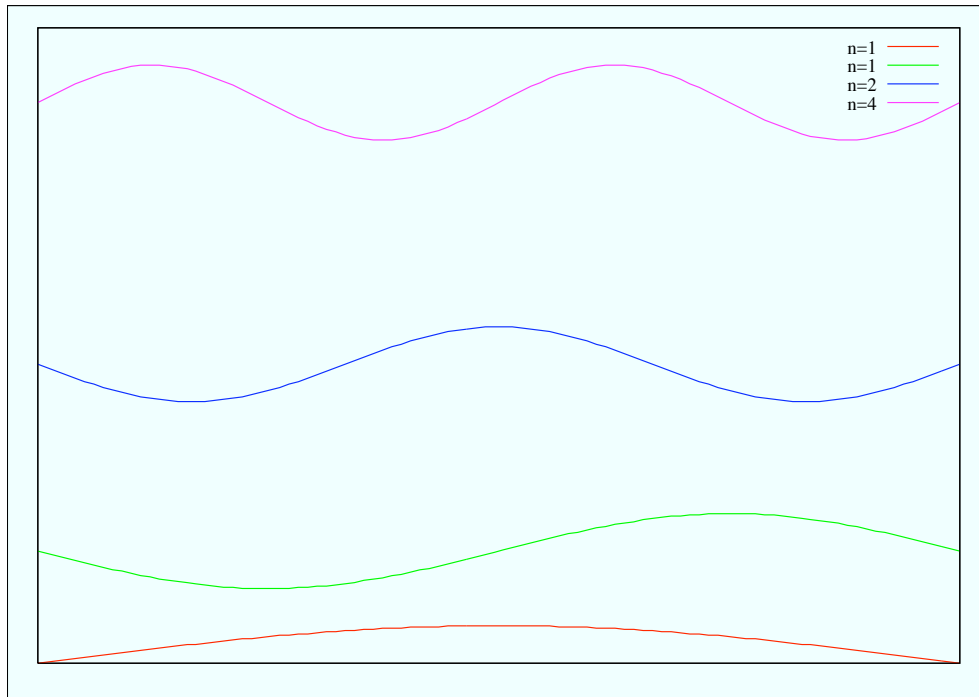


Figura 1: Autofunzioni per il pozzo di potenziale

L'equazione di Schrödinger da risolvere sarà simile alla (1) ma con le condizioni al contorno precedenti. La soluzione generale può essere scritta nella forma

$$\psi(q) = A \cos kq + B \sin kq \quad (4)$$

Imponendo le condizioni al contorno

$$\begin{aligned} \psi(a) &= A \cos ka + B \sin ka = 0 \\ \psi(-a) &= A \cos ka - B \sin ka = 0 \end{aligned} \quad (5)$$

si ha che il sistema precedente ammette soluzioni non banali ($\psi \neq 0$ solo se si annulla il determinante dei coefficienti

$$\begin{vmatrix} \cos ka & \sin ka \\ \cos ka & -\sin ka \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \sin 2ka = 0$$

Questa equazione ha soluzioni per

$$k = \frac{n\pi}{2a} \Rightarrow E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2} \quad (6)$$

con $n \in \mathbf{N}$ e $n \neq 0$ (per $n = 0$ si ha solo la soluzione banale come è facile verificare). Sostituendo nel sistema (5) è facile mostrare che le soluzioni sono le seguenti

$$\psi_n(q) = \begin{cases} C \cos \frac{n\pi q}{2a} & n \text{ dispari} \\ C \sin \frac{n\pi q}{2a} & n \text{ pari} \end{cases} \quad (7)$$

La costante C può essere determinata imponendo la condizione di normalizzazione

$$\int_{-a}^{+a} dq |\psi(q)|^2 = 1 \Rightarrow C = \frac{1}{\sqrt{a}}$$

Si noti che la costante C è determinata a meno di una fase arbitraria. Per semplicità C viene scelta in modo che le autofunzioni siano reali.

Si lascia come esercizio allo studente verificare che i) le autofunzioni relative ad autovalori distinti sono tra loro ortogonali; ii) sono validi i teoremi di non degenerazione e di oscillazione.

4) Mostrare che se nell'equazione di Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(q)}{dq^2} + V(q)\psi(q) = E\psi(q) \quad (8)$$

il potenziale è una funzione pari di q [cioè $V(q) = V(-q)$], si ha che le autofunzioni proprie (reali) hanno una parità definita.

Infatti, tramite la sostituzione $q \rightarrow -q$ si ottiene

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(-q)}{dq^2} + V(q)\psi(-q) = E\psi(-q) \quad (9)$$

Ne consegue che $\psi(-q)$ è ancora soluzione dell'equazione (8) e quindi per il teorema di non degenerazione per le autofunzioni proprie deve essere $\psi(-q) = C\psi(q)$ con C costante reale. Imponendo la condizione di normalizzazione

$$1 = \int \psi^2(q) dq = \int C^2 \psi^2(-q) dq \stackrel{q' = -q}{=} C^2 \int \psi^2(q') dq' \quad (10)$$

si ottiene $C^2 = 1$, cioè $C = \pm 1$ e quindi $\psi(-q) = \pm \psi(q)$, c.v.d. Questo teorema è molto utile in quanto permette di selezionare a priori le soluzioni con parità definita, se il potenziale è pari.

5) Determinare autovalori ed autostati propri per la *buca di potenziale* (ovvero per un potenziale definito come $V(q) = V_0[1 - \Pi_a(q)]$, $V_0 > 0$).

Questo problema è trattato sul Picasso nel §8.2, pag. 133 e segg., pertanto non verrà qui ripetuto.

6) Mostrare che nel caso dell'esercizio precedente quando $V_0 \rightarrow \infty$ le autofunzioni ed autovalori tendono a quelle dell'esercizio 2.

Questa prova è lasciata per esercizio allo studente.

7) Determinare la funzione d'onda per una particella sottoposta ad un potenziale del tipo $V(q) = V_0 > 0$ se $0 \leq q \leq a$ e 0 altrimenti).

Questo problema è trattato sul Picasso nel §8.3, pag. 138 e segg., pertanto non verrà qui ripetuto.

8) Mostrare che se in un punto q_0 il potenziale può scriversi nella forma $V(q) = V_s(q) + W\delta(q - q_0)$ con $V_s(q)$ funzione limitata in un intorno di q_0 (potenziale *deltiforme*) allora la funzione d'onda è continua in q_0 mentre la sua derivata no.

Infatti, si consideri l'equazione di Schrödinger in un intorno di q_0

$$\frac{d^2\psi(q)}{dq^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [V_s(q) + W\delta(q - q_0) - E] \psi(q) \quad (11)$$

Integrando ambo i membri della (11) in un intorno sufficientemente stretto di q_0 si ha

$$\left. \frac{d\psi(q)}{dq} \right|_{q_0+\epsilon} - \left. \frac{d\psi(q)}{dq} \right|_{q_0-\epsilon} = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{q_0-\epsilon}^{q_0+\epsilon} dq [V_s(q) - E] \psi(q) + \frac{2m}{\hbar^2} W\psi(q_0) \quad (12)$$

dove si è sfruttata la proprietà della funzione δ

$$\int dq f(q)\delta(q - q_0) = f(q_0)$$

Poiché la V_s è limitata in un intorno di q_0 (così come la ψ), per $\epsilon \rightarrow 0$ l'integrale al secondo membro si annulla, per cui

$$\psi'(q_0^+) - \psi'(q_0^-) = \frac{2m}{\hbar^2} W\psi(q_0) \quad (13)$$

La derivata della ψ ha pertanto una discontinuità di prima specie nel punto q_0 . Ne consegue che la funzione d'onda è continua in $q = q_0$

9) Trovare autovalori e autostati propri per un potenziale del tipo $V(q) = -W\delta(q)$ con $W > 0$.

Questo problema è equivalente al caso della buca di potenziale in cui $a \rightarrow 0$ e $V_0 \rightarrow \infty$ con $W = aV_0$ costante. Tuttavia, utilizzando il risultato dell'esercizio precedente è semplice risolvere direttamente il problema. Le soluzioni proprie si hanno per $E < 0$, per cui posto $k = \sqrt{2m|E|}/\hbar$ l'equazione da risolvere sarà

$$\psi'' - k^2\psi = 0 \quad (14)$$

per $q \neq 0$. Le soluzioni non divergenti saranno

$$\begin{aligned} \psi(q) &= C_- e^{+kq}, \quad q < 0 \\ \psi(q) &= C_+ e^{-kq}, \quad q > 0 \end{aligned}$$

Poiché la ψ deve essere continua in $q = 0$ deve essere $C_- = C_+ \equiv C$. Inoltre,

$$\begin{aligned} \psi'(q) &= +kC e^{+kq}, \quad q < 0 \\ \psi'(q) &= -kC e^{-kq}, \quad q > 0 \end{aligned}$$

per cui $\psi'(0^\mp) = \pm kC$. Usando la (13) si ha quindi

$$-2kC = -\frac{2mW}{\hbar^2}C \Rightarrow k = \frac{mW}{\hbar^2} \Rightarrow E_0 = -\frac{mW^2}{2\hbar^2}$$

La costante C si trova tramite la condizione di normalizzazione

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dq C^2 e^{-2k|q|} = 1 \Rightarrow C = \sqrt{k}$$

In definitiva esiste un solo stato legato con energia E_0 la cui funzione d'onda è data da

$$\psi(q) = \sqrt{\frac{mW}{\hbar^2}} \exp\left(-\frac{mW|q|}{\hbar^2}\right) \quad (15)$$

10) Calcolare i coefficienti di trasmissione e riflessione per un potenziale deltiforme del tipo $V(q) = W\delta(q)$ con $W > 0$.

Poiché le uniche soluzioni si hanno per $E > 0$ anche in questo caso posto $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ l'equazione da risolvere sarà

$$\psi'' + k^2\psi = 0 \quad (16)$$

Operando come nel caso dell'esercizio 7, si ponga

$$\begin{aligned} \psi(q) &= e^{+ikq} + Ae^{-ikq}, \quad q < 0 \\ \psi(q) &= Be^{-ikq}, \quad q > 0 \end{aligned}$$

Utilizzando la condizione di continuità in $q = 0$ e la (13) si ottiene

$$\begin{aligned} 1 + A &= B \\ -ik(B - 1 + A) &= \frac{2mW}{\hbar^2}B \end{aligned}$$

ovvero, dopo qualche semplice calcolo

$$T = |B|^2 = \left(1 + \frac{m^2W^2}{\hbar^4k^2}\right)^{-1} = \left(1 + \frac{mW^2}{\hbar^2E}\right)^{-1} \quad (17)$$

ed ovviamente $R = |A|^2 = 1 - T$.

11) Il valore di aspettazione della coordinata della particella è definita come il *centroide* della distribuzione di probabilità

$$\langle q \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dq |\psi(q, t)|^2 q = \int_{-\infty}^{+\infty} dq \psi^*(q, t) q \psi(q, t) \quad (18)$$

Mostrare che se la $\psi(q)$ è una funzione a quadrato sommabile e soddisfa l'equazione di Schrödinger, si ha

$$m \frac{d\langle q \rangle}{dt} = \int_{-\infty}^{+\infty} dq \psi^*(q, t) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q} \right) \psi(q, t) \quad (19)$$

Dall'equazione (A10) dell'appendice A si ottiene

$$\begin{aligned} m \frac{d\langle q \rangle}{dt} &= m \int_{-\infty}^{+\infty} dq \frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} q \\ &= -m \int_{-\infty}^{+\infty} dq \frac{\partial j(q, t)}{\partial q} q \end{aligned} \quad (20)$$

dove

$$j = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial q} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial q} \right) \quad (21)$$

Perché $|\psi|^2$ sia a quadrato sommabile su \mathbf{R} , $\psi(q)$ deve tendere almeno come $1/q$ per $q \rightarrow \infty$. Ne consegue che $j(q)$ tende almeno come $1/q^3$ e quindi $\lim_{q \rightarrow \infty} qj(q) = 0$. Integrando per parti si ha quindi

$$\begin{aligned} m \frac{d\langle q \rangle}{dt} &= m \int_{-\infty}^{+\infty} dq j(q, t) \\ &= \frac{i\hbar}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dq \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial q} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial q} \right) \\ &= \frac{i\hbar}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dq \left(\frac{\partial |\psi|^2}{\partial q} - 2\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial q} \right) \\ &= \frac{i\hbar}{2} \left[|\psi(+\infty)|^2 - |\psi(-\infty)|^2 - 2 \int_{-\infty}^{+\infty} dq \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial q} \right] \end{aligned} \quad (22)$$

Poiché per $q \rightarrow \infty$ $|\psi(q)|^2 \rightarrow 0$ si ha

$$m \frac{d\langle q \rangle}{dt} = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} dq \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial q} = \int_{-\infty}^{+\infty} dq \psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial q} \quad (23)$$

cioè l'asserto. L'operatore

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q} \quad (24)$$

è interpretato come *l'operatore quantità di moto*, per cui la (19) si può scrivere come

$$m \frac{d\langle q \rangle}{dt} = \langle p \rangle \quad (25)$$

dove si definisce valore di aspettazione di un operatore \hat{O} come

$$\langle \hat{O} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dq \psi^*(q, t) \hat{O} \psi(q, t) \quad (26)$$

Si lascia come esercizio allo studente dimostrare che l'operatore \hat{p} è hermitiano (sugg.: tramite una integrazione per parti si mostri che $\langle \psi_1, \hat{p} \psi_2 \rangle = \langle \hat{p} \psi_1, \psi_2 \rangle$).

12) Si mostri che se $\tilde{\psi}(k, t)$ è la trasformata di Fourier della funzione $\psi(q, t)$ si ha

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dk \tilde{\psi}^*(k, t) (\hbar k) \tilde{\psi}(k, t) \quad (27)$$

La trasformata di Fourier della funzione $\psi(q, t)$ è la seguente

$$\tilde{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dq \psi(q) e^{-ikq} \quad (28)$$

Questa equazione può essere invertita

$$\psi(q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \tilde{\psi}(k) e^{ikq} \quad (29)$$

inoltre

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d\psi(q)}{dq} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk (\hbar k) \tilde{\psi}(k) e^{ikq} \quad (30)$$

Sostituendo nella (19) si ha

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dq \int_{-\infty}^{+\infty} dk \tilde{\psi}^*(k) e^{-ikq} \int_{-\infty}^{+\infty} dk' \tilde{\psi}(k') (\hbar k') e^{ik'q} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dk \tilde{\psi}^*(k) \int_{-\infty}^{+\infty} dk' \tilde{\psi}(k') (\hbar k') \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dq e^{i(k'-k)q} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dk \tilde{\psi}^*(k) \int_{-\infty}^{+\infty} dk' \tilde{\psi}(k') (\hbar k') \delta(k - k') \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dk \tilde{\psi}^*(k) (\hbar k) \tilde{\psi}(k) \end{aligned} \quad (31)$$

La funzione

$$\psi_p(p) = \frac{\tilde{\psi}(p/\hbar)}{\sqrt{\hbar}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipq/\hbar} \psi(q) \quad (32)$$

è definita come *funzione d'onda nello spazio degli impulsi*. Con questa posizione

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp p |\psi_p^*(p, t)|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dp \psi_p^*(p, t) p \psi_p(p, t) \quad (33)$$

e l'operatore \hat{p} può scriversi come

$$\hat{p}\psi_p(p) = p \cdot \psi_p(p) \quad (34)$$

13) Trovare le autofunzioni dell'operatore impulso

L'equazione agli autovalori

$$\hat{p}f_p(q) \equiv -i\hbar \frac{d}{dq}f_p(q) = pf_p(q) \quad (35)$$

(attenzione a non confondere l'operatore \hat{p} con il suo autovalore p). Questa equazione ha come soluzione

$$f_p(q) = Ce^{ipq/\hbar} \quad (36)$$

La costante C viene scelta in modo che le $f_p(q)$ siano funzioni ortogonali in senso improprio, ovvero

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dq f_{p_1}(q) f_{p_2}(q) = \delta(p_1 - p_2) \quad (37)$$

Utilizzando la rappresentazione di Fourier della delta è facile vedere che, a meno di una fase inessenziale

$$C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad (38)$$

Si vede che tramite l'identificazione $p = \hbar k$ le autofunzioni dell'impulso coincidono con quelle dell'esercizio 1. Ciò non deve sorprendere in quanto l'Hamiltoniana della particella libera commuta con l'operatore impulso e quindi i due operatori ammettono un sistema di autofunzioni comuni.

Si noti come la (32) si può scrivere come

$$\psi_p(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp f_p^*(q) \psi(q) = \langle f_p, \psi \rangle \quad (39)$$

ovvero la $\psi_p(p)$ è la proiezione della funzione d'onda sulle autofunzioni degli impulsi. Ne consegue che essa ha l'interpretazione seguente: $|\psi_p(p)|^2 dp$ è la probabilità che la particella abbia un impulso compreso tra p e $p + dp$.

14) Detto \hat{q} l'operatore coordinata definito come

$$\hat{q}\psi(q) = q \cdot \psi(q) \quad (40)$$

1. **Mostrare che \hat{q} è hermitiano.**
2. **Trovare le autofunzioni di \hat{q}**
3. **Mostrare che nella rappresentazione degli impulsi**

$$\hat{q}\psi_p(p) = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \psi_p(p) \quad (41)$$

1. La dimostrazione è banale ed è lasciata per esercizio.
2. Detta $f_x(q)$ l'autofunzione di \hat{q} relativa all'autovalore x , deve essere $\hat{q}f_x(q) = xf_x(q)$. D'altronde, per la definizione di \hat{q} sarà anche $\hat{q}f_x(q) = qf_x(q)$. Ne consegue che $(x - q)f_x(q) = 0$. L'unica funzione non nulla che ha la proprietà $zf(z) = 0, \forall z \in \mathbf{R}$ è la delta di Dirac, per cui

$$f_x(q) = \delta(q - x) = f_q(x) \quad (42)$$

Si vede allora che qualunque funzione d'onda $\psi(q)$ può essere scritta formalmente come

$$\psi(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx f_q^*(x) \psi(x) = \langle f_q, \psi \rangle \quad (43)$$

ovvero la $\psi(q)$ è la proiezione della funzione d'onda sulle autofunzioni delle coordinate.

3. Utilizzando le proprietà della trasformata di Fourier, si lascia per esercizio dimostrare che

$$\langle q \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \psi_p^*(p, t) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \right) \psi_p(p, t) \quad (44)$$

da cui discende l'asserto.

Si noti che in base ai risultati precedenti, è possibile definire uno stato $|\psi\rangle$ indipendentemente dalla rappresentazione scelta. Le funzioni d'onda nello spazio delle coordinate o degli impulsi saranno semplicemente la proiezione della $|\psi\rangle$ sugli autostati dell'operatore \hat{q} o \hat{p} rispettivamente

$$\psi(q) \equiv \langle q | \psi \rangle \quad (45)$$

$$\psi_p(p) \equiv \langle p | \psi \rangle \quad (46)$$

$$(47)$$

con

$$\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle, \langle q|\hat{q} = q\langle q| \quad (48)$$

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle, \langle p|\hat{p} = p\langle p| \quad (49)$$

$$\langle q|q'\rangle = \delta(q - q') \quad (50)$$

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p - p') \quad (51)$$

$$\langle q|p\rangle = \langle p|q\rangle^* = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipq/\hbar} \quad (52)$$

$$\langle q|\hat{q}|\psi\rangle = q\psi(q) \quad (53)$$

$$\langle q|\hat{p}|\psi\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q} \psi(q) \quad (54)$$

$$\langle p|\hat{p}|\psi\rangle = p\psi_p(p) \quad (55)$$

$$\langle p|\hat{q}|\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \psi_p(p) \quad (56)$$

Per esempio formalmente si ha

$$\psi_p(p) = \langle p|\psi\rangle = \langle p| \left(\int_{-\infty}^{+\infty} dq |q\rangle \langle q| \right) |\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dq \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipq/\hbar} \psi(q) \quad (57)$$

15) Mostrare che $[\hat{q}, \hat{p}] = \hat{q}\hat{p} - \hat{p}\hat{q} = i\hbar$

Questa prova è lasciata per esercizio allo studente.

16) Mostrare che se si definisce

$$\begin{aligned} \Delta q &= \sqrt{\langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2} \\ \Delta p &= \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} \end{aligned} \quad (58)$$

dove per $\langle \dots \rangle$ si intende il valore di aspettazione su di uno stato proprio (reale) vale il principio di indeterminazione di Heisenberg

$$\Delta q \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (59)$$

La prova è lasciata per esercizio allo studente rifacendosi all'analogo principio relativo alle trasformate di Fourier.

17) Una particella è caratterizzata dalla seguente funzione d'onda

$$\psi(q) = Ne^{-\alpha|q|}e^{-ikq} \quad (60)$$

1. Calcolare N affinché la funzione sia normalizzata
2. fare un grafico delle funzioni del modulo quadro e della parte reale e immaginaria della $\psi(q)$.
3. calcolare la probabilità che la particella si trovi nell'intervallo $0 \leq q \leq L$ e nel semiasse $q \geq 0$
4. calcolare $\langle q \rangle$ e $\langle q^2 \rangle$.
5. calcolare $\langle p \rangle$ e $\langle p^2 \rangle$.
6. mostrare che vale il principio di indeterminazione.
7. calcolare la $\psi_p(p)$

1. Poiché deve essere $\int_{-\infty}^{+\infty} dq |\psi(q)|^2 = 1$ si ha

$$\begin{aligned} 1 = \int_{-\infty}^{+\infty} dq |\psi(q)|^2 &= N^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dq e^{-2\alpha|q|} \\ &= 2N^2 \int_0^{+\infty} dq e^{-2\alpha q} \\ &\stackrel{y=2\alpha q}{=} \frac{N^2}{\alpha} \int_0^{+\infty} dy e^{-y} = \frac{N^2}{\alpha} \end{aligned} \quad (61)$$

da cui si ricava $N = \sqrt{\alpha}$.

2. Si veda la figura 2.
3. Si ha

$$\begin{aligned} P(0 \leq q \leq L) &= \int_0^L dq |\psi(q)|^2 \\ &= \alpha \int_0^L dq e^{-2\alpha q} \end{aligned}$$

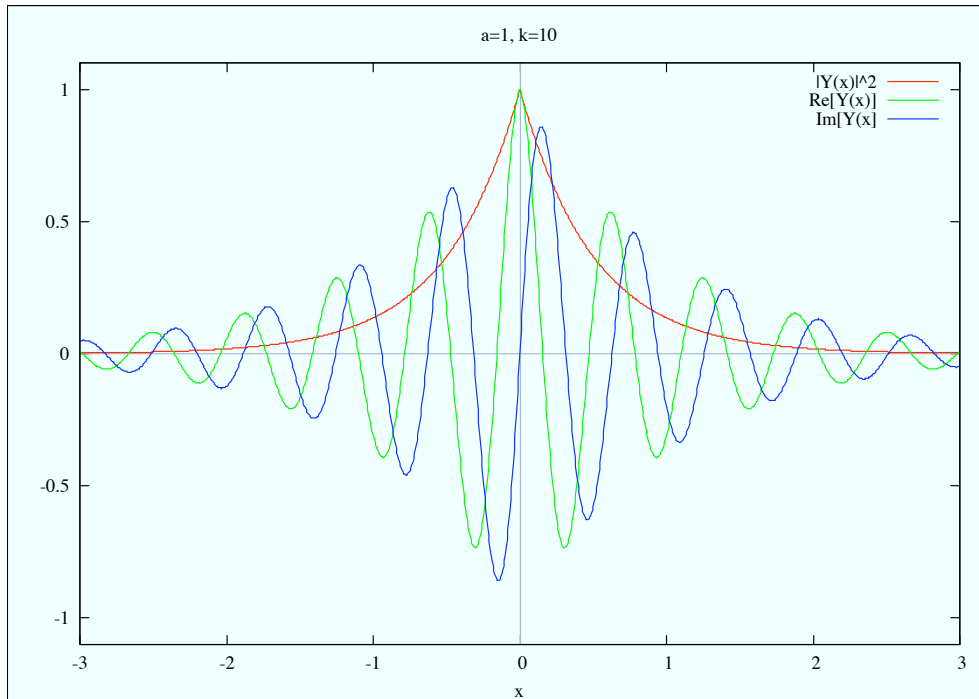


Figura 2: $|\psi|^2$, $\Re[\psi]$ e $\Im[\psi]$

$$\begin{aligned} & \stackrel{y=2\alpha q}{=} \frac{1}{2} \int_0^{2\alpha L} dy e^{-y} \\ & = \frac{1}{2} (1 - e^{-2\alpha L}) \end{aligned} \quad (62)$$

$$P(q \geq 0) = \lim_{L \rightarrow +\infty} P(0 \leq q \leq L) = \frac{1}{2} \quad (63)$$

4. Si ha:

$$\begin{aligned} \langle q \rangle & = \int_{-\infty}^{+\infty} dq \psi^*(q) q \psi(q) \\ & = \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} dq q e^{-2\alpha|q|} = 0 \end{aligned} \quad (64)$$

poiché q è una funzione dispari mentre $e^{-2\alpha|q|}$ una funzione pari. Analogamente

$$\langle q^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dq \psi^*(q) q^2 \psi(q)$$

$$\begin{aligned}
&= \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} dq q^2 e^{-2\alpha|q|} \\
&= 2\alpha \int_0^{+\infty} dq q^2 e^{-2\alpha q} \\
&\stackrel{y=2\alpha q}{=} \frac{1}{4\alpha^2} \int_0^{+\infty} dy y^2 e^{-y} = \frac{1}{2\alpha^2} \quad (65)
\end{aligned}$$

dove si è sfruttata la proprietà $\int_0^{+\infty} dy y^n e^{-y} = \Gamma(n+1) = n!$ per n intero.

5. Si ha

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dq \psi^*(q) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q} \right) \psi(q) \quad (66)$$

d'altronde si ha

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \psi}{\partial q} &= \sqrt{\alpha} \exp(ikq - \alpha|q|) \left(ik - \alpha \frac{\partial |q|}{\partial q} \right) \\
&= \sqrt{\alpha} \exp(ikq - \alpha|q|) [ik - \alpha(\vartheta(q) - \vartheta(-q))] \quad (67)
\end{aligned}$$

dove la funzione di Heavyside $\vartheta(q)$ è definita come $\vartheta(q) = 0$ se $q < 0$ e $\vartheta(q) = 1$ se $q \geq 0$. Sostituendo in (66) si ha

$$\begin{aligned}
\langle p \rangle &= \frac{\hbar\alpha}{i} \int_{-\infty}^{+\infty} dq [ik - \alpha(\vartheta(q) - \vartheta(-q))] e^{-2\alpha|q|} \\
&= \frac{\hbar\alpha}{i} \left[\int_{-\infty}^0 (ik + \alpha) e^{2\alpha q} + \int_0^{+\infty} (ik - \alpha) e^{-2\alpha q} \right] \\
&= \frac{\hbar}{2i} 2ik = \hbar k \quad (68)
\end{aligned}$$

Analogamente

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dq \psi^*(q) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q} \right)^2 \psi(q) \quad (69)$$

Dalla equazione (67) si ottiene

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial q^2} = \sqrt{\alpha} \left\{ -2\alpha\delta(q) + [ik - \alpha(\vartheta(q) - \vartheta(-q))]^2 \right\} \exp(ikq - \alpha|q|) \quad (70)$$

dove si è utilizzata la relazione

$$\frac{\partial \vartheta(q)}{\partial q} = -\frac{\partial \vartheta(-q)}{\partial q} = \delta(q) \quad (71)$$

Ne deriva che

$$\begin{aligned}
\langle p^2 \rangle &= -\hbar^2 \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} dq \left\{ -2\alpha \delta(q) + [ik - \alpha(\vartheta(q) - \vartheta(-q))]^2 \right\} e^{-2\alpha|q|} \\
&= 2\hbar^2 \alpha^2 - \hbar^2 \alpha \left[\int_{-\infty}^0 (ik + \alpha)^2 e^{2\alpha q} + \int_0^{+\infty} (ik - \alpha)^2 e^{-2\alpha q} \right] \\
&= 2\hbar^2 \alpha^2 - \frac{\hbar^2}{2} [(ik + \alpha)^2 + (ik - \alpha)^2] \\
&= \hbar^2 (k^2 + \alpha^2)
\end{aligned} \tag{72}$$

6. Si ha

$$\begin{aligned}
\Delta q &= \sqrt{\langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2} = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \\
\Delta p &= \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \hbar \alpha \\
\Rightarrow \Delta q \Delta p &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \geq \frac{\hbar}{2}
\end{aligned} \tag{73}$$

c.v.d.

7. Poiché la trasformata di Fourier della funzione

$$f(q) = e^{-a|q|} \tag{74}$$

vale

$$\tilde{f}(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{a}{a^2 + z^2} \tag{75}$$

si ha, utilizzando la proprietà di shift della trasformata di Fourier

$$\psi_p(p) = \frac{\tilde{\psi}(p/\hbar)}{\sqrt{\hbar}} = \sqrt{\frac{2}{\pi \alpha \hbar}} \left[1 + \left(\frac{p/\hbar + k}{\alpha} \right)^2 \right]^{-1} \tag{76}$$

18) Calcolare Δq e Δp per il pozzo di potenziale e mostrare che vale il principio di indeterminazione.

A causa della simmetria delle funzioni d'onda (7) è facile mostrare che $\langle q \rangle = 0$ e $\langle p \rangle = 0$ per cui $\Delta q^2 = \langle q^2 \rangle$ e $\Delta p^2 = \langle p^2 \rangle$. Si ha

$$\langle p^2 \rangle = 2m \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = 2m E_n = \left(\frac{\pi \hbar n}{2a} \right)^2 \tag{77}$$

Il calcolo di $\langle q^2 \rangle$ è diretto

$$\begin{aligned}\langle q^2 \rangle &= \int_{-a}^{+a} \frac{dq}{a} q^2 \cos^2 \left(\frac{n\pi q}{2a} \right) \quad n = 1, 3, 5 \dots \\ \langle q^2 \rangle &= \int_{-a}^{+a} \frac{dq}{a} q^2 \sin^2 \left(\frac{n\pi q}{2a} \right) \quad n = 2, 4, 6 \dots\end{aligned}\quad (78)$$

Il calcolo è elementare ed è lasciato come esercizio allo studente. Il risultato è, per entrambi i casi

$$\langle q^2 \rangle = \frac{a^2}{3} \left(1 - \frac{6}{n^2 \pi^2} \right) \quad (79)$$

Ne consegue che

$$\Delta q \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{n^2 \pi^2}{3} - 2} \quad (80)$$

Si verifica facilmente che la quantità sotto radice è sempre maggiore di 1.

19) Sia $\psi(q, 0)$ la funzione d'onda di una particella libera al tempo $t = 0$. Trovare l'espressione generale per la funzione d'onda al tempo $t > 0$.

L'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo, nella rappresentazione degli impulsi vale

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_p(p, t) = \frac{p^2}{2m} \psi_p(p, t) \quad (81)$$

la quale ha come semplice soluzione

$$\psi_p(p, t) = \exp \left(-i \frac{p^2 t}{2m\hbar} \right) \psi_p(p, 0) \quad (82)$$

Tornando alla rappresentazione delle coordinate (ovvero facendo l'antitrasformata di Fourier di ambo i membri) si ha

$$\begin{aligned}\psi(q, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipq/\hbar} \psi_p(p, t) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipq/\hbar} e^{-i\frac{p^2 t}{2m\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq'}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipq'/\hbar} \psi(q', 0) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dq' \psi(q', 0) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp \left[-i \frac{p^2 t}{2m\hbar} + i \frac{p}{\hbar} (q - q') \right] \\ &\equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dq' G(q - q', t) \psi(q', 0)\end{aligned}\quad (83)$$

Usando la formula per il calcolo degli integrali gaussiani si ha che la funzione G vale

$$\begin{aligned} G(q) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp \left[-i \frac{p^2 t}{2m\hbar} + i \frac{p}{\hbar} q \right] \\ &= \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} \exp \left(i \frac{mq^2}{2\hbar t} \right) \end{aligned} \quad (84)$$

La funzione G viene chiamata *funzione di Green* (o propagatore) e corrisponde alla soluzione dell'equazione di Schrödinger con la condizione iniziale $\psi(q, 0) = \delta(q)$.

Si noti che il calcolo precedente poteva essere eseguito anche utilizzando il formalismo della Meccanica Quantistica come segue:

$$\begin{aligned} \psi(q, t) &\equiv \langle q | \psi(t) \rangle \\ &= \langle q | e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \psi(0) \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dq' \langle q | e^{-i\hat{H}t/\hbar} | q' \rangle \langle q' | \psi(0) \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dq' \langle q | e^{-i\hat{H}t/\hbar} | q' \rangle \psi(q', 0) \end{aligned} \quad (85)$$

dove si è sfruttata la proprietà di completezza $\int dq' |q'\rangle \langle q'| = 1$. Inoltre utilizzando anche la proprietà di completezza per gli stati $|p\rangle$ si ottiene

$$\begin{aligned} \langle q | e^{-i\hat{H}t/\hbar} | q' \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dp \langle q | e^{-i\hat{H}t/\hbar} | p \rangle \langle p | q' \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dp \left(-i \frac{p^2 t}{2m\hbar} \right) \langle q | p \rangle \langle p | q' \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp \left(-i \frac{p^2 t}{2m\hbar} \right) e^{ipq/\hbar} e^{-ipq'/\hbar} \\ &\equiv G(q - q', t) \end{aligned} \quad (86)$$

20) Si supponga che a $t = 0$ la funzione d'onda (normalizzata) di una particella libera sia un pacchetto d'onda gaussiano data da

$$\psi(q, 0) = \frac{1}{(2\pi)^{1/4} \sqrt{\sigma_0}} e^{-\frac{q^2}{4\sigma_0}} e^{ikq} \quad (87)$$

1. **Trovare come evolve la funzione d'onda $\psi(q, t)$ e la densità di probabilità $|\psi(q, t)|^2$.**
2. **Calcolare la $\psi_p(p, t)$ e la $|\psi_p(p, t)|^2$.**
3. **Calcolare $\Delta q(t)$ e $\Delta p(t)$ e mostrare che vale il principio di indeterminazione.**

1. Utilizzando il risultato dell'esercizio precedente si ha

$$\psi(q, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dq' \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} \frac{1}{(2\pi)^{1/4} \sqrt{\sigma_0}} e^{i\frac{m(q-q')^2}{2\hbar t} - \frac{q'^2}{4\sigma_0} + ikq'} \quad (88)$$

Dopo qualche calcolo (lasciato per esercizio allo studente) si ottiene, utilizzando la formula per gli integrali gaussiani

$$\psi(q, t) = \frac{1}{(2\pi)^{1/4} \sqrt{\sigma_0 + \frac{i\hbar t}{2m\sigma_0}}} \exp \left[-\frac{(q-vt)^2}{4\left(\sigma_0^2 + \frac{i\hbar t}{2m}\right)} \right] e^{ik(q-vt)} \quad (89)$$

con $v = \hbar k/m$. E' facile vedere allora che¹

$$|\psi(q, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma(t)} e^{-\frac{(q-vt)^2}{2\sigma^2(t)}} \quad (90)$$

con

$$\sigma(t) = \sigma_0 \sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{2m\sigma_0^2}\right)^2} \quad (91)$$

Ne consegue che l'evoluzione di un pacchetto d'onda gaussiano è ancora gaussiano, il cui centroide si muove con legge $\langle q \rangle = vt$ (dimostrare) ma la cui deviazione standard aumenta nel tempo.

2. Si comincia col calcolare la $\psi_p(p, 0)$

$$\begin{aligned} \psi_p(p, 0) &= \frac{1}{(2\pi)^{1/4} \sqrt{2\pi\hbar\sigma_0}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{-\frac{q^2}{4\sigma_0^2} - i\left(\frac{p}{\hbar} - k\right)q} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{1/4}} \sqrt{\frac{2\sigma_0}{\hbar}} e^{-\frac{\sigma_0^2}{\hbar^2}(p-\hbar k)^2} \end{aligned} \quad (92)$$

¹è possibile visualizzare l'evoluzione della $|\psi(q, t)|^2$ al seguente URL: http://it.youtube.com/watch?v=Pq_H2fiWBSM&NR=1

Usando la (82) si ottiene quindi

$$\psi_p(p, t) = \frac{1}{(2\pi)^{1/4}} \sqrt{\frac{2\sigma_0}{\hbar}} \exp \left[-\frac{\sigma_0^2}{\hbar^2} (p - \hbar k)^2 - i \frac{p^2 t}{2m\hbar} \right] \quad (93)$$

e

$$|\psi_p(p, t)|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sigma_0}{\hbar} \exp \left[-\frac{2\sigma_0^2}{\hbar^2} (p - \hbar k)^2 \right] \quad (94)$$

3. Poiché $\langle q \rangle = vt$ e $\langle p \rangle = \hbar k$ si ha

$$\begin{aligned} (\Delta q(t))^2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} dq |\psi(q, t)|^2 (q - vt)^2 \\ (\Delta p(t))^2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} dp |\psi_p(p, t)|^2 (p - \hbar k)^2 \end{aligned} \quad (95)$$

Il calcolo è semplice usando la proprietà²

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-y^2} y^2 = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad (96)$$

Dopo qualche semplice calcolo si ottiene

$$\begin{aligned} \Delta q(t) &= \sigma(t) \\ \Delta p(t) &= \frac{\hbar}{2\sigma_0} \\ \Delta q(t)\Delta p(t) &= \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{2m\sigma_0^2} \right)^2} \geq \frac{\hbar}{2} \end{aligned} \quad (97)$$

Si nota come l'indeterminazione sulla coordinata cresce nel tempo (si ha lo "sparpagliamento" della funzione d'onda), mentre quella sull'impulso rimane costante.

²Infatti

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-y^2} y^2 = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-\alpha y^2} \Big|_{\alpha=1} = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \Big|_{\alpha=1} = \frac{1}{2} \sqrt{\pi} \alpha^{-3/2} \Big|_{\alpha=1}$$

21) Mostrare che se la funzione d'onda di una particella soddisfa l'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo

$$i\hbar \frac{\partial \psi(q, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(q, t)}{\partial q^2} + V(q)\psi(q, t) \quad (98)$$

con $V(q)$ funzione di classe C^∞ , il valore di aspettazione di q segue approssimativamente una traiettoria classica

Derivando rispetto al tempo entrambi i membri dell'equazione (19) si ha

$$m \frac{d^2 \langle q \rangle}{dt^2} = \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{+\infty} dq \left[\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial q} + \psi^* \frac{\partial}{\partial q} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right] \quad (99)$$

Utilizzando l'equazione (98) e la sua complessa coniugata, si ottiene

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 \langle q \rangle}{dt^2} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dq \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial q^2} + V \psi^* \right) \frac{\partial \psi}{\partial q} \\ &\quad - \int_{-\infty}^{+\infty} dq \psi^* \frac{\partial}{\partial q} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial q^2} + V \psi \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} dq \left(\frac{\partial^2 \psi^*}{\partial q^2} \frac{\partial \psi}{\partial q} - \psi^* \frac{\partial}{\partial q} \frac{\partial^2 \psi}{\partial q^2} \right) \\ &\quad + \int_{-\infty}^{+\infty} dq \left(\psi^* V \frac{\partial}{\partial q} \psi - \psi^* \frac{\partial}{\partial q} V \psi \right) \end{aligned} \quad (100)$$

Per mezzo di una doppia integrazione per parti è possibile mostrare che il primo integrale si annulla. Sviluppando il secondo si ottiene

$$m \frac{d^2 \langle q \rangle}{dt^2} = - \int_{-\infty}^{+\infty} dq \psi^* \frac{\partial V}{\partial q} \psi \equiv - \left\langle \frac{\partial V}{\partial q} \right\rangle \quad (101)$$

Sviluppando $V(q)$ in serie di Taylor intorno al punto $q = \langle q \rangle$ poiché $\langle q - \langle q \rangle \rangle = 0$ si ottiene

$$m \frac{d^2 \langle q \rangle}{dt^2} = -\frac{\partial V}{\partial q}(\langle q \rangle) - \frac{1}{2} \frac{\partial^3 V}{\partial q^3}(\langle q \rangle) \cdot (\Delta q)^2 + \dots \quad (102)$$

Come si vede, nel limite $\Delta q \rightarrow 0$, il baricentro della funzione d'onda si muove esattamente sulla traiettoria classica. Ciò giustifica perché la meccanica classica è valida quando le incertezze quantistiche sono trascurabili.

22) Mostrare che l'operatore $\exp(ia\hat{p}/\hbar)$ opera delle traslazioni nello spazio delle coordinate.

Operando direttamente nello spazio delle coordinate si ha

$$\begin{aligned}\exp(ia\hat{p}/\hbar)\psi(q) &\equiv \exp\left(a\frac{\partial}{\partial q}\right)\psi(q) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial q^n} \psi(q) \\ &= \psi(q+a)\end{aligned}\tag{103}$$

Esercizi sull'oscillatore armonico

Nota: Un oscillatore armonico è definito dall'hamiltoniano:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{q}^2}{2}$$

con $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$. Per la teoria relativa all'oscillatore armonico ci si riferisce al seguente testo: Picasso "Lezioni di Meccanica Quantistica", edizioni ETS, §5.

1) Si trovino gli autostati di un oscillatore armonico nella rappresentazione delle coordinate.

Lo stato fondamentale dell'oscillatore armonico è definito da $\hat{\eta}|0\rangle = 0$. Usando la definizione di $\hat{\eta}$ si ha, nella rappresentazione delle coordinate si ha

$$\langle q | \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} (\hat{p} - im\omega\hat{q}) | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \left(-i\hbar \frac{d}{dq} - im\omega q \right) \psi_0(q) = 0 \quad (104)$$

Questa equazione si integra banalmente per separazione delle variabili, fornendo il risultato (normalizzato):

$$\psi_0(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega q^2}{2\hbar}} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\xi^2/2} \quad (105)$$

con $\xi = \sqrt{m\omega/\hbar}q$. L'autostato corrispondente all'autovalore $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ si trova utilizzando l'operatore di salita

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{\eta}^\dagger)^n |0\rangle \quad (106)$$

L'operatore $\hat{\eta}^\dagger$ può scriversi come

$$\hat{\eta}^\dagger = -\frac{i}{\sqrt{2}} \left(\frac{d}{d\xi} - \xi \right) = -\frac{i}{\sqrt{2}} e^{\xi^2/2} \frac{d}{d\xi} e^{-\xi^2/2} \quad (107)$$

come è facile verificare. Allora

$$\begin{aligned} \psi_n(q) &= \frac{(-i)^n}{2^{n/2} \sqrt{n!}} \left(e^{\xi^2/2} \frac{d}{d\xi} e^{-\xi^2/2} \right)^n \psi_0(\xi) \\ &= \frac{(-i)^n}{2^{n/2} \sqrt{n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\xi^2/2} e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \\ &\equiv \frac{(-i)^n}{2^{n/2} \sqrt{n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) \end{aligned} \quad (108)$$

dove è stata usata la formula di Rodriguez per i polinomi di Hermite.

2) Trovare autovalori ed autostati del seguente Hamiltoniano

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{q}^2}{2} + F\hat{q} \quad (109)$$

dove F è una forza costante.

Il problema si risolve per mezzo di una opportuna traslazione $\hat{U}_a = \exp(ia\hat{p}/\hbar)$ con a costante da determinare. Infatti

$$\hat{\mathcal{H}}' = \hat{U}_a \hat{\mathcal{H}} \hat{U}_a^\dagger = e^{ia\hat{p}/\hbar} \hat{\mathcal{H}} e^{-ia\hat{p}/\hbar} \quad (110)$$

Per effettuare il calcolo si utilizza la seguente relazione, la cui dimostrazione è effettuata in appendice B:

$$e^{\hat{\alpha}\hat{\beta}} e^{-\hat{\alpha}} = \hat{\beta} + [\hat{\alpha}, \hat{\beta}] + \frac{1}{2!} [\hat{\alpha}, [\hat{\alpha}, \hat{\beta}]] + \frac{1}{3!} [\hat{\alpha}, [\hat{\alpha}, [\hat{\alpha}, \hat{\beta}]]] + \dots \quad (111)$$

Usando la proprietà $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$ si ottiene

$$\begin{aligned} \hat{U}_a \hat{p} \hat{U}_a^\dagger &= \hat{p} \\ \hat{U}_a \hat{q} \hat{U}_a^\dagger &= \hat{q} + \frac{ia}{\hbar} [\hat{p}, \hat{q}] = \hat{q} + a \end{aligned} \quad (112)$$

poiché la serie si tronca al secondo termine. Si ha allora:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}' &= \frac{1}{2} \left[\frac{(\hat{U}_a \hat{p} \hat{U}_a^\dagger)(\hat{U}_a \hat{p} \hat{U}_a^\dagger)}{m} + m\omega^2 (\hat{U}_a \hat{q} \hat{U}_a^\dagger)(\hat{U}_a \hat{q} \hat{U}_a^\dagger) \right] + F \hat{U}_a \hat{q} \hat{U}_a^\dagger \\ &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{q}^2}{2} + (m\omega^2 a - F)\hat{q} + \frac{m\omega^2 a^2}{2} - Fa \end{aligned} \quad (113)$$

Scegliendo $a = F/m\omega^2$ è possibile eliminare il termine lineare per cui

$$\hat{\mathcal{H}}' = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{q}^2}{2} - \frac{F^2}{2m\omega^2} \quad (114)$$

Questa, a parte il termine costante è esattamente l'Hamiltoniano di un oscillatore armonico con pulsazione ω , per cui gli autovalori dell'energia valgono

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega - \frac{F^2}{2m\omega^2} \quad (115)$$

mentre gli autostati sono quelli dell'oscillatore armonico. Per trovare gli autostati del problema iniziale si noti che l'equazione agli autovalori

$$\hat{\mathcal{H}}'|n\rangle = \hat{U}_a \hat{\mathcal{H}} \hat{U}_a^\dagger |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (116)$$

si può riscrivere come

$$\hat{\mathcal{H}} \hat{U}_a^\dagger |n\rangle = E_n \hat{U}_a^\dagger |n\rangle \quad (117)$$

per cui gli autostati di $\hat{\mathcal{H}}$ sono $|n\rangle' = \hat{U}_a^\dagger |n\rangle = \exp(-ia\hat{p}/\hbar)|n\rangle$, ovvero $\psi_n'(q) = \psi_n(q - a)$ (dove i ψ_n sono stati calcolati nel problema precedente) corrispondenti agli autovalori E_n .

3) Trovare autovalori ed autostati del seguente Hamiltoniano:³

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{q}^2}{2} + \frac{A\omega}{2}(\hat{p}\hat{q} + \hat{q}\hat{p}) = \hat{\mathcal{H}}_0 + \frac{A\omega}{2}(\hat{p}\hat{q} + \hat{q}\hat{p}) \quad (118)$$

dove A è una costante con $|A| < 1$.

Per semplicità di notazione si defisce $\hat{K} = \hat{\mathcal{H}}/\hbar\omega$, $\hat{P} = \hat{p}/\sqrt{m\hbar\omega}$ e $\hat{Q} = \sqrt{m\omega/\hbar}\hat{q}$. Con questa posizione l'Hamiltoniano diviene:

$$\hat{K} = \frac{\hat{P}^2 + \hat{Q}^2}{2} + \frac{A}{2}(\hat{Q}\hat{P} + \hat{P}\hat{Q}) \equiv \hat{K}_0 + \frac{A}{2}(\hat{Q}\hat{P} + \hat{P}\hat{Q}) \quad (119)$$

e $[\hat{Q}, \hat{P}] = i$. Come nell'esercizio precedente, si opera una opportuna trasformazione unitaria per eliminare il termine spurio. In particolare si può utilizzare la seguente trasformazione

$$\hat{U}_\theta = \exp(i\theta\hat{K}_0) \quad (120)$$

Evidentemente si ha

$$\hat{U}_\theta \hat{K} \hat{U}_\theta^\dagger = \hat{K}_0 + \frac{A}{2}(\hat{U}_\theta \hat{Q} \hat{U}_\theta^\dagger \hat{U}_\theta \hat{P} \hat{U}_\theta^\dagger + \hat{U}_\theta \hat{P} \hat{U}_\theta^\dagger \hat{U}_\theta \hat{Q} \hat{U}_\theta^\dagger) \quad (121)$$

Si noti che $[\hat{K}_0, \hat{Q}] = -i\hat{P}$ e $[\hat{K}_0, \hat{P}] = i\hat{Q}$ (provare queste relazioni per esercizio). Usando la (111) si ha allora:

$$\begin{aligned} e^{i\theta\hat{K}_0} \hat{Q} e^{-i\theta\hat{K}_0} &= \hat{Q} + \theta\hat{P} - \frac{\theta^2}{2!}\hat{Q} + \dots = \hat{Q} \cos \theta + \hat{P} \sin \theta \\ e^{i\theta\hat{K}_0} \hat{P} e^{-i\theta\hat{K}_0} &= \hat{P} - \theta\hat{Q} - \frac{\theta^2}{2!}\hat{P} + \dots = \hat{P} \cos \theta - \hat{Q} \sin \theta \end{aligned} \quad (122)$$

³Si noti che presi singolarmente $\hat{p}\hat{q}$ e $\hat{q}\hat{p}$ non costituiscono un operatore hermitiano.

per cui, dopo qualche calcolo

$$\hat{U}_\theta \hat{K} \hat{U}_\theta^\dagger = \hat{K}_0 + \frac{A}{2} [(\hat{P}^2 - \hat{Q}^2) \sin 2\theta + (\hat{Q}\hat{P} + \hat{P}\hat{Q}) \cos 2\theta] \quad (123)$$

Posto $\theta = \pi/4$ è possibile eliminare il termine spurio ottenendo

$$\hat{U}_\theta \hat{K} \hat{U}_\theta^\dagger = \frac{(1+A)\hat{P}^2 + (1-A)\hat{Q}^2}{2} \quad (124)$$

Tornando alle variabili originarie si ha

$$\hat{U}_\theta \hat{\mathcal{H}} \hat{U}_\theta^\dagger = (1+A) \frac{\hat{p}^2}{2m} + (1-A) \frac{m\omega^2 \hat{q}^2}{2} \equiv \frac{\hat{p}^2}{2m'} + \frac{m'\omega'^2 \hat{q}^2}{2} \quad (125)$$

con $m' = m/(1+A)$ e $\omega' = \sqrt{1-A^2}\omega$. Poiché $|A| < 1$ queste quantità sono ben definite. Gli autovalori dell'energia sono quindi

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega' \quad (126)$$

e gli autostati sono dati da

$$|n\rangle' = e^{-i\frac{\pi\hat{H}_0}{4\hbar\omega}} |n, m', \omega'\rangle \quad (127)$$

Questa espressione è solo formale in quanto non è semplice ricavare gli stati $|n\rangle'$ a partire dagli stati $|n\rangle$ del secondo membro (si noti infatti che gli stati al secondo membro si riferiscono ad un oscillatore armonico di massa m' e pulsazione ω' mentre l'operatore nell'esponenziale è l'Hamiltoniano di un oscillatore di massa m e pulsazione ω).

4) Trovare autovalori ed autostati del seguente Hamiltoniano descrivente due oscillatori armonici *accoppiati*:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{m_1\omega_1^2 \hat{q}_1^2}{2} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + \frac{m_2\omega_2^2 \hat{q}_2^2}{2} + g\hat{q}_1\hat{q}_2 \quad (128)$$

con $[\hat{q}_1, \hat{q}_2] = [\hat{p}_1, \hat{p}_2] = [\hat{q}_1, \hat{p}_2] = [\hat{p}_1, \hat{q}_2] = 0$ e $[\hat{q}_1, \hat{p}_1] = [\hat{q}_2, \hat{p}_2] = i\hbar$.

Nuovamente, per semplicità di notazione si definisce $\hat{Q}_i = \hat{q}_i\sqrt{m_i}$, $\hat{P}_i = \hat{p}_i/\sqrt{m_i}$ e $G = g/\sqrt{m_1m_2}$, per cui:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2}(\hat{P}_1^2 + \hat{P}_2^2 + \omega_1^2 \hat{Q}_1^2 + \omega_2^2 \hat{Q}_2^2) + G\hat{Q}_1\hat{Q}_2 \quad (129)$$

Operando come negli esercizi precedenti, si consideri la trasformazione

$$\hat{U}_\theta = \exp \left[\frac{i\theta}{\hbar} (\hat{Q}_1 \hat{P}_2 - \hat{P}_1 \hat{Q}_2) \right] \equiv \exp \left(\frac{i\theta}{\hbar} \hat{L}_3 \right) \quad (130)$$

con $\hat{L}_3 = \hat{Q}_1 \hat{P}_2 - \hat{P}_1 \hat{Q}_2$. E' facile mostrare che $[\hat{L}_3, \hat{Q}_1] = i\hbar \hat{Q}_2$ e $[\hat{L}_3, \hat{Q}_2] = -i\hbar \hat{Q}_1$ e analoghe relazioni per le \hat{P}_i . Usando queste relazioni e la (111) si lascia per esercizio mostrare che

$$\hat{U}_\theta \begin{pmatrix} \hat{Q}_1 \\ \hat{Q}_2 \end{pmatrix} \hat{U}_\theta^\dagger = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{Q}_1 \\ \hat{Q}_2 \end{pmatrix} \quad (131)$$

e analoghe relazioni per le \hat{P}_i . Sostituendo nell'Hamiltoniano si ottiene:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}' &= \frac{1}{2}(\hat{P}_1^2 + \hat{P}_2^2) + \frac{1}{2}\hat{Q}_1^2(\omega_1^2 c_\theta^2 + \omega_2^2 s_\theta^2) + \frac{1}{2}\hat{Q}_2^2(\omega_1^2 s_\theta^2 + \omega_2^2 c_\theta^2) \\ &\quad + \hat{Q}_1 \hat{Q}_2 c_\theta s_\theta (\omega_2^2 - \omega_1^2) + G(\hat{Q}_1^2 - \hat{Q}_2^2) c_\theta s_\theta + G\hat{Q}_1 \hat{Q}_2 (c_\theta^2 - s_\theta^2) \end{aligned} \quad (132)$$

con $s_\theta \equiv \sin \theta$ e $c_\theta \equiv \cos \theta$. Imponendo la condizione

$$\tan 2\theta = \frac{2G}{\omega_1^2 - \omega_2^2} \quad (133)$$

si ottiene che i termini misti $\hat{Q}_1 \hat{Q}_2$ si annullano e

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}' &= \frac{1}{2}(\hat{P}_1^2 + \hat{P}_2^2 + \Omega_1^2 \hat{Q}_1^2 + \Omega_2^2 \hat{Q}_2^2) \\ &= \left(\frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{m_1 \Omega_1^2 \hat{q}_1^2}{2} \right) + \left(\frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + \frac{m_2 \Omega_2^2 \hat{q}_2^2}{2} \right) \end{aligned} \quad (134)$$

con

$$\begin{aligned} \Omega_1^2 &= \omega_1^2 c_\theta^2 + \omega_2^2 s_\theta^2 + G s_{2\theta} \\ \Omega_2^2 &= \omega_1^2 s_\theta^2 + \omega_2^2 c_\theta^2 - G s_{2\theta} \end{aligned} \quad (135)$$

L'Hamiltoniana $\hat{\mathcal{H}}'$ descrive due oscillatori armonici disaccoppiati i cui autovalori dell'energia valgono

$$E_{n_1, n_2} = \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) \hbar \Omega_1 + \left(n_2 + \frac{1}{2} \right) \hbar \Omega_2 \quad (136)$$

e gli autostati

$$|n_1, n_2\rangle = e^{-\frac{i\theta}{\hbar}(\hat{q}_1\hat{p}_2 - \hat{p}_1\hat{q}_2)}|n_1, m_1, \Omega_1\rangle|n_2, m_2, \Omega_2\rangle \quad (137)$$

Analogamente all'esercizio precedente questa espressione è soltanto formale poiché non è semplice ricavare gli autostati $|n_1, n_2\rangle$ a partire dagli autostati dell'oscillatore armonico.

5) Per l'Hamiltoniano dell'esercizio precedente, trattando l'accoppiamento $g\hat{q}_1\hat{q}_2$ come una perturbazione, trovare la correzione allo stato fondamentale del sistema.

In assenza di perturbazione gli autostati del sistema saranno dati semplicemente da $|n_1, n_2\rangle = |n_1\rangle_1|n_2\rangle_2$ con energia $E_{n_1, n_2} = (n_1 + 1/2)\hbar\omega_1 + (n_2 + 1/2)\hbar\omega_2$. Al primo ordine perturbativo si ha

$$\begin{aligned} |0\rangle' &= |0, 0\rangle + \sum_{r_1, r_2 \neq 0, 0} \frac{\langle r_1, r_2 | g\hat{q}_1\hat{q}_2 | 0, 0 \rangle}{E_{0,0} - E_{r_1, r_2}} |r_1, r_2\rangle \\ &= |0\rangle_1|0\rangle_2 - \frac{g}{\hbar} \sum_{r_1, r_2 \neq 0, 0} \frac{\langle r_1 | \hat{q}_1 | 0 \rangle_1 \langle r_2 | \hat{q}_2 | 0 \rangle_2}{r_1\omega_1 + r_2\omega_2} |r_1\rangle_1|r_2\rangle_2 \end{aligned} \quad (138)$$

Utilizzando l'espressione

$$\hat{q}_{1,2} = i\sqrt{\frac{\hbar}{2m_{1,2}\omega_{1,2}}}(\hat{\eta}_{1,2} - \hat{\eta}_{1,2}^\dagger) \quad (139)$$

e $\hat{\eta}_{1,2}|0\rangle_{1,2} = 0$, $\hat{\eta}_{1,2}^\dagger|0\rangle_{1,2} = |1\rangle_{1,2}$ si ottiene

$$\hat{q}_{1,2}|0\rangle_{1,2} = -i\sqrt{\frac{\hbar}{2m_{1,2}\omega_{1,2}}}|1\rangle_{1,2} \quad (140)$$

Sostituendo nell'espressione precedente, gli unici termini non nulli sono quelli per cui $r_{1,2} = 1$, ovvero

$$|0\rangle' = |0\rangle_1|0\rangle_2 - \frac{g}{2(\omega_1 + \omega_2)\sqrt{m_1m_2\omega_1\omega_2}}|1\rangle_1|1\rangle_2 \quad (141)$$

Si noti che al primo ordine la correzione all'energia si annulla poiché $\langle n | \hat{q} | n \rangle = 0$. In effetti si lascia per esercizio mostrare a partire dalle (135) che $\Omega_i = \omega_i + O(g^2)$ per cui

$$E_{n_1, n_2} = \left(n_1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_1 + \left(n_2 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_2 + O(g^2) \quad (142)$$

6) Calcolare Δq e Δp per gli autostati di un oscillatore armonico e mostrare che vale il principio di indeterminazione.

Conviene mostrare innanzitutto un teorema generale: se $|\psi\rangle$ è un autostato di un Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$ che commuta con l'operatore parità e se $\hat{\mathcal{O}}$ anticommuta con l'operatore parità ($\hat{\mathcal{P}}\hat{\mathcal{O}} = -\hat{\mathcal{O}}\hat{\mathcal{P}}$) allora il valore di aspettazione di $\hat{\mathcal{O}}$ sullo stato $|\psi\rangle$ è zero. Infatti, se $\hat{\mathcal{H}}$ e $\hat{\mathcal{P}}$ commutano, ammettono un sistema di autostati in comune, il che vuol dire che gli autostati di $\hat{\mathcal{H}}$ sono anche autostati di parità per cui $\hat{\mathcal{P}}|\psi\rangle = \pm|\psi\rangle$. Si ha quindi

$$\langle\psi|\hat{\mathcal{O}}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{\mathcal{P}}^2\hat{\mathcal{O}}|\psi\rangle = -\langle\psi|\hat{\mathcal{P}}\hat{\mathcal{O}}\hat{\mathcal{P}}|\psi\rangle = -\langle\psi|\hat{\mathcal{O}}|\psi\rangle \quad (143)$$

da cui discende $\langle\psi|\hat{\mathcal{O}}|\psi\rangle = 0$.

Utilizzando il teorema precedente è facile vedere che $\langle\hat{q}\rangle = 0$ e $\langle\hat{p}\rangle = 0$, per cui $\Delta q^2 = \langle\hat{q}^2\rangle$ e $\Delta p^2 = \langle\hat{p}^2\rangle$. Conviene cominciare a trovare la seconda quantità. Si ricordi che

$$\hat{p} = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\hat{\eta} + \hat{\eta}^\dagger) \quad (144)$$

per cui

$$\begin{aligned} \hat{p}^2 = \frac{m\omega\hbar}{2}(\hat{\eta} + \hat{\eta}^\dagger)^2 &= \frac{m\omega\hbar}{2} [(\hat{\eta})^2 + (\hat{\eta}^\dagger)^2 + \hat{\eta}^\dagger\hat{\eta} + \hat{\eta}\hat{\eta}^\dagger] \\ &= \frac{m\omega\hbar}{2} [(\hat{\eta})^2 + (\hat{\eta}^\dagger)^2 + 2\hat{N} + 1] \end{aligned} \quad (145)$$

dove sono state usate la proprietà $[\hat{\eta}, \hat{\eta}^\dagger] = 1$ e $\hat{N} = \hat{\eta}^\dagger\hat{\eta}$ operatore numero, $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$. Poiché $(\hat{\eta})^2|n\rangle \propto |n-2\rangle$ e $(\hat{\eta}^\dagger)^2|n\rangle \propto |n+2\rangle$ si ha che $\langle n|(\hat{\eta}^\dagger)^2 + (\hat{\eta})^2|n\rangle = 0$, per cui

$$\langle\hat{p}^2\rangle = \langle n|\hat{p}^2|n\rangle = m\omega\hbar \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (146)$$

Per trovare $\langle\hat{q}^2\rangle$ si noti che $\langle\hat{\mathcal{H}}\rangle = \hbar\omega(n + 1/2)$. D'altronde

$$\langle\hat{\mathcal{H}}\rangle = \frac{\langle\hat{p}^2\rangle}{2m} + \frac{m\omega^2\langle\hat{q}^2\rangle}{2} \quad (147)$$

da cui si ricava facilmente

$$\langle\hat{q}^2\rangle = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (148)$$

In definitiva

$$\Delta q \Delta p = \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) \geq \frac{\hbar}{2} \quad (149)$$

Si noti che la minima indeterminazione $\Delta q \Delta p = \hbar/2$ si ha per $n = 0$ che corrisponde ad una autofunzione gaussiana.

7) Calcolare il valore di aspettazione dell'operatore $\hat{O} = \hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q}$ per gli autostati di un oscillatore armonico.

Poiché $\langle n | (\hat{\eta}^\dagger)^2 | n \rangle = 0$ si ha

$$0 = \langle (\hat{\eta}^\dagger)^2 \rangle = \frac{1}{2m\hbar\omega} \left[\langle \hat{p}^2 \rangle - m^2\omega^2 \langle \hat{q}^2 \rangle + im\omega \langle \hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q} \rangle \right] \quad (150)$$

Usando i risultati dell'esercizio precedente si ricava facilmente $\langle \hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q} \rangle = 0$.

8) Si consideri una particella sottoposta ad un potenziale armonico il cui stato al tempo $t = 0$ è $|\psi(0)\rangle = |\psi_0\rangle$. Calcolare il valore di aspettazione degli operatori \hat{q} e \hat{p} sullo stato $|\psi(t)\rangle$.

Poiché $|\psi(t)\rangle$ può scriversi come

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle = e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} |\psi(0)\rangle \quad (151)$$

dove $\hat{U}(t)$ è l'operatore di evoluzione temporale, si ha

$$\langle \psi(t) | \hat{q} | \psi(t) \rangle = \langle \psi_0 | e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \hat{q} e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} | \psi_0 \rangle \quad (152)$$

Operando allo stesso modo dell'esercizio 3, equazione (122), si ottiene dopo qualche semplice calcolo

$$e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \hat{q} e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} = \hat{q} \cos \omega t + \frac{\hat{p}}{m\omega} \sin \omega t \quad (153)$$

per cui

$$\langle \hat{q} \rangle_t = \langle \hat{q} \rangle_0 \cos \omega t + \frac{\langle \hat{p} \rangle_0}{m\omega} \sin \omega t \quad (154)$$

Ne consegue che il baricentro della funzione d'onda si muove di moto armonico. Si lascia allo studente il calcolo di $\langle \hat{p} \rangle_t$.

9) Utilizzando la teoria perturbativa, determinare le correzioni ai livelli energetici per un oscillatore anarmonico definito dall'Hamiltoniano seguente:⁴

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{q}^2}{2} + \alpha\hat{q}^3 + \beta\hat{q}^4 \quad (155)$$

Si consideri il termine $\hat{\mathcal{H}}_I = \alpha\hat{q}^3 + \beta\hat{q}^4$ come una perturbazione all'oscillatore armonico lineare. Usando il teorema dimostrato nell'esercizio 6, poiché $\hat{\mathcal{P}}\hat{q}^3\hat{\mathcal{P}}^{-1} = -\hat{q}^3$ si ha che il contributo al primo ordine perturbativo del termine cubico si annulla. Ciò può indurre erroneamente a credere che il termine cubico può essere trascurato rispetto al quartico, in quanto contribuisce solo al secondo ordine perturbativo. In realtà se si scrive l'espressione per la perturbazione al livello energetico E_n all'ordine più basso

$$\Delta E_n = \langle n|\beta\hat{q}^4|n\rangle + \frac{1}{\hbar\omega} \sum_{r \neq n} \frac{|\langle r|\alpha\hat{q}^3|n\rangle|^2}{n-r} \quad (156)$$

si vede che, poiché l'operatore \hat{q} contiene un fattore $\hbar^{1/2}$ potendosi scrivere come

$$\hat{q} = i\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{\eta} - \hat{\eta}^\dagger) \quad (157)$$

entrambi i termini sono di ordine \hbar^2 e quindi vanno considerati entrambi. Si noti invece come il secondo ordine in \hat{q}^4 o eventuali potenze superiori di \hat{q} danno contributi $O(\hbar^3)$ e quindi possono essere effettivamente trascurati.

Si consideri la seguente relazione

$$\hat{q}^2 = -\frac{\hbar}{2m\omega}(\hat{\eta} - \hat{\eta}^\dagger)^2 = -\frac{\hbar}{2m\omega} [(\hat{\eta})^2 + (\hat{\eta}^\dagger)^2 - (2\hat{N} + 1)] \quad (158)$$

⁴Si noti per qualunque valore di α e β , $V(x) = m\omega^2x^2/2 + \alpha x^3 + \beta x^4$ ha un minimo locale in $x = 0$, poiché $V'(0) = 0$ e $V''(0) > 0$ come è facile mostrare, quindi il problema è ben definito. Tuttavia può accadere $x = 0$ non è il minimo assoluto o anche che $V(x) \rightarrow -\infty$ per $x \rightarrow \pm\infty$ a seconda dei valori e/o del segno di α e β , causando potenziali problemi di stabilità del sistema fisico in questione. Nel seguito per semplicità verranno trascurati questo tipo di problemi. Un potenziale del tipo indicato può essere ottenuto tramite una espansione in serie di Taylor sino al quarto ordine intorno al minimo (convenzionalmente posto in $x = 0$) di un potenziale reale.

dove $\hat{N} = \hat{\eta}^\dagger \hat{\eta}$ è l'operatore numero e si è usato il fatto che $[\hat{\eta}, \hat{\eta}^\dagger] = 1$. Usando anche le relazioni

$$\hat{\eta}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (159)$$

$$\hat{\eta}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (160)$$

si ottiene

$$\hat{q}^2|n\rangle = -\frac{\hbar}{2m\omega} \left[\sqrt{n(n-1)}|n-2\rangle + \sqrt{(n+1)(n+2)}|n+2\rangle - (2n+1)|n\rangle \right] \quad (161)$$

Il calcolo della correzione al termine quartico è allora semplice

$$\begin{aligned} \langle n|\beta\hat{q}^4|n\rangle = \beta\|\hat{q}^2|n\rangle\|^2 &= \beta \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 \left[n(n-1) + (n+1)(n+2) + (2n+1)^2 \right] \\ &= \beta \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 \cdot 6 \left(n^2 + n + \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (162)$$

Si calcoli ora $\hat{q}^3|n\rangle$. Usando le equazioni (157), (161) e (160) si ottiene dopo qualche calcolo lasciato per esercizio allo studente

$$\begin{aligned} \hat{q}^3|n\rangle &= -i \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{3/2} (\hat{\eta} - \hat{\eta}^\dagger) \left[\sqrt{n(n-1)}|n-2\rangle + \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{(n+1)(n+2)}|n+2\rangle - (2n+1)|n\rangle \right] \\ &= -i \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{3/2} \left[\sqrt{n(n-1)(n-2)}|n-3\rangle \right. \\ &\quad - 3n\sqrt{n}|n-1\rangle + 3(n+1)\sqrt{n+1}|n+1\rangle \\ &\quad \left. + \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}|n+3\rangle \right] \end{aligned} \quad (163)$$

e quindi

$$\begin{aligned} |\langle r|\hat{q}^3|n\rangle|^2 &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 \left[n(n-1)(n-2)\delta_{r,n-3} \right. \\ &\quad + 9n^3\delta_{r,n-1} + 9(n+1)^3\delta_{r,n+1} \\ &\quad \left. + (n+1)(n+2)(n+3)\delta_{r,n+3} \right] \end{aligned} \quad (164)$$

Utilizzando questa espressione nel secondo termine dell'equazione (156), si vede che i soli termini non nulli sono quelli per cui $r = n \pm 3$ e $r = n \pm 1$, per cui

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar\omega} \sum_{r \neq n} \frac{|\langle r | \alpha \hat{q}^3 | n \rangle|^2}{n-r} &= \frac{\alpha^2 \hbar^2}{8m^3 \omega^4} \left[\frac{n(n-1)(n-2)}{n-(n-3)} \right. \\ &\quad + \frac{9n^3}{n-(n-1)} + \frac{9(n+1)^3}{n-(n+1)} \\ &\quad \left. + \frac{(n+1)(n+2)(n+3)}{n-(n+3)} \right] \end{aligned} \quad (165)$$

Dopo qualche semplice calcolo e raggruppando tutti i termini si ottiene in definitiva all'ordine più basso

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega - \frac{15\alpha^2 \hbar^2}{4m^3 \omega^4} \left(n^2 + n + \frac{11}{30}\right) + \frac{3\beta \hbar^2}{2m^2 \omega^2} \left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right) \quad (166)$$

10) Calcolare la prima correzione relativistica all'oscillatore armonico.

L'energia cinetica di una particella in relatività ristretta vale

$$E_k = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} - mc^2 \quad (167)$$

Se $p \ll mc$ è possibile espandere l'espressione precedente utilizzando l'espressione per il binomio di Newton

$$(1+x)^{1/2} = 1 + \frac{1}{2}x + \left(\frac{1/2}{2}\right)x^2 + \dots = 1 + \frac{1}{2}x - \frac{1}{8}x^2 + \dots \quad (168)$$

si ha:

$$E_k = mc^2 \left[\left(1 + \frac{p^2}{2m^2 c^2} - \frac{p^4}{8m^4 c^4} + \dots\right) - 1 \right] = \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2} + \dots \quad (169)$$

Il termine in p^4 rappresenta la prima correzione relativistica. Per un oscillatore armonico l'Hamiltoniano corretto vale

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{q}^2}{2} - \frac{\hat{p}^4}{8m^3 c^2} \quad (170)$$

Trattando l'ultimo termine come una perturbazione si ha

$$\Delta E_n = -\langle n | \frac{\hat{p}^4}{8m^3 c^2} | n \rangle \quad (171)$$

A parte la sostituzione $\hat{q} \rightarrow \hat{p}$ il problema è simile all'esercizio precedente in cui è presente solo una perturbazione di tipo quartico. Operando allo stesso modo si ottiene

$$E_n = \left[n + \frac{1}{2} + \frac{3\hbar\omega}{16mc^2} \left(n^2 + n + \frac{1}{2} \right) \right] \hbar\omega \quad (172)$$

L'approssimazione è valida se $\hbar\omega \ll mc^2$.

11) Calcolare le correzioni all'energia del primo livello eccitato di due oscillatori armonici di egual massa e frequenza descritti dall'Hamiltoniano seguente

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2}{2m} + \frac{m\omega^2(\hat{q}_1^2 + \hat{q}_2^2)}{2} + g\hat{q}_1^3\hat{q}_2^3 \quad (173)$$

in cui, al solito, $[\hat{q}_1, \hat{q}_2] = [\hat{p}_1, \hat{p}_2] = [\hat{q}_1, \hat{p}_2] = [\hat{p}_1, \hat{q}_2] = 0$ e $[\hat{q}_1, \hat{p}_1] = [\hat{q}_2, \hat{p}_2] = i\hbar$.

In assenza del termine di accoppiamento $g\hat{q}_1^3\hat{q}_2^3$ il sistema descrive due oscillatori armonici disaccoppiati, per cui gli autostati sono $|n_1, n_2\rangle = |n_1\rangle_1 |n_2\rangle_2$ con energia $E_{n_1, n_2} = (n_1 + n_2 + 1)\hbar\omega$.

Il primo livello eccitato ha energia $E_I = E_{0,1} = E_{1,0} = 2\hbar\omega$. Ne consegue che il livello imperturbato è degenere avendo gli stati $|1, 0\rangle$ e $|0, 1\rangle$ la medesima energia. Il calcolo alla correzione al primo livello eccitato non può essere effettuato quindi con la teoria perturbativa standard ma occorre applicare la teoria perturbativa per il caso degenere.

L'idea alla base della teoria perturbativa degenere è la seguente: si supponga che all'energia E dell'Hamiltoniano imperturbato corrispondano un numero N finito di stati degeneri $|\varphi_k\rangle$, $k = 1 \dots N$

$$\hat{\mathcal{H}}|\varphi_k\rangle = E|\varphi_k\rangle \quad (174)$$

L'equazione agli autovalori per l'Hamiltoniano perturbato sarà

$$(\hat{\mathcal{H}} + \lambda\hat{V})|\psi\rangle = (E + \lambda\Delta E + \dots)|\psi\rangle \quad (175)$$

Si può supporre che all'ordine zero in λ la $|\psi\rangle$ sia una semplice combinazione lineare degli autostati degeneri

$$|\psi\rangle = \sum_{h=1}^N C_h |\varphi_h\rangle \quad (176)$$

per cui $\hat{\mathcal{H}}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$. Moltiplicando scalarmente la (175) per $\langle\varphi_k|$ al primo ordine in λ si ha

$$\lambda\langle\varphi_k|\hat{V}|\psi\rangle = \lambda\Delta E\langle\varphi_k|\psi\rangle \quad (177)$$

Sostituendo la (176) nell'espressione precedente si ottiene il sistema di equazioni

$$\sum_{k=1}^N C_k \langle\varphi_k|\hat{V}|\varphi_h\rangle = \Delta E C_h \Rightarrow \sum_{k=1}^N C_k \left(\langle\varphi_k|\hat{V}|\varphi_h\rangle - \Delta E \delta_{hk} \right) = 0 \quad (178)$$

Questo sistema ha una soluzione non banale solo se

$$\det(\mathbf{V} - \Delta E \mathbf{I}) = 0 \quad (179)$$

con $\mathbf{V}_{hk} = \langle\varphi_k|\hat{V}|\varphi_h\rangle$. Questo equazione può fornire sino ad N soluzioni distinte $\Delta E_1, \dots, \Delta E_N$ il che indica che la perturbazione ha provocato la rottura della degenerazione.

Applicando la teoria precedente al caso in esame, conviene definire per semplicità $|\varphi_1\rangle = |1, 0\rangle$ e $|\varphi_2\rangle = |0, 1\rangle$. Usando il teorema relativo all'esercizio 6 è facile vedere che

$$V_{11} = \langle 1, 0 | \hat{V} | 1, 0 \rangle = g \langle 1 | \hat{q}_1^3 | 1 \rangle_1 \langle 0 | \hat{q}_2^3 | 0 \rangle_2 = 0 \quad (180)$$

e identicamente $V_{22} = 0$. Inoltre si ha

$$V_{12} = \langle 1, 0 | \hat{V} | 0, 1 \rangle = g \langle 1 | \hat{q}_1^3 | 0 \rangle_1 \langle 0 | \hat{q}_2^3 | 1 \rangle_2 \quad (181)$$

Usando la (164) si ottiene

$$\hat{q}^3 | 0 \rangle = -i \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{3/2} [3|1\rangle + \sqrt{6}|3\rangle] \quad (182)$$

da cui

$$\langle 1 | \hat{q}^3 | 0 \rangle = -3i \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{3/2} \quad (183)$$

da cui si ricava

$$V_{12} = \frac{9}{8}g \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^3 \quad (184)$$

e $V_{21} = V_{12} \equiv \varepsilon$. L'equazione

$$\begin{vmatrix} -\Delta E & \varepsilon \\ \varepsilon & -\Delta E \end{vmatrix} = 0 \quad (185)$$

ha la semplice soluzione $\Delta E = \pm\varepsilon$. Ne consegue che la perturbazione rompe la degenerazione. Si lascia per esercizio mostrare che gli stati corrispondenti all'energia $E_I \pm \varepsilon$ sono $|E_I \pm \varepsilon\rangle = (|1, 0\rangle \pm |0, 1\rangle)/\sqrt{2}$

Esercizi su spin e momenti angolari

Nota: Un momento angolare $\hat{\mathbf{J}}$ è definito assiomaticamente come un vettore le cui componenti \hat{J}_a , $a = 1, 2, 3$ hanno la proprietà $[\hat{J}_a, \hat{J}_b] = i\hbar\epsilon_{abc}\hat{J}_c$, con ϵ_{abc} tensore totalmente antisimmetrico. Definendo $\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + \hat{J}_3^2$ si vede che $[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_a] = 0$, per cui esiste un sistema di autostati comuni tra l'operatore $\hat{\mathbf{J}}^2$ e una qualsiasi delle componenti di $\hat{\mathbf{J}}$, convenzionalmente la \hat{J}_3

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{J}}^2|j, m\rangle &= \hbar^2 j(j+1)|j, m\rangle \\ \hat{J}_3|j, m\rangle &= \hbar m|j, m\rangle\end{aligned}$$

con j intero o semi-intero e $m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$. Per la teoria relativa ai momenti angolari ci si riferisce al seguente testo: Picasso "Lezioni di Meccanica Quantistica", edizioni ETS, §10.

1) Mostrare che se $\hat{\mathbf{q}}$ e $\hat{\mathbf{p}}$ sono definiti come vettori coordinate e impulso di una particella ($[\hat{q}_a, \hat{q}_b] = [\hat{p}_a, \hat{p}_b] = 0$ e $[\hat{q}_a, \hat{p}_b] = i\hbar\delta_{ab}$) l'operatore $\mathbf{M} = \hat{\mathbf{q}} \wedge \hat{\mathbf{p}}$ definisce un momento angolare.

Per mostrare l'asserto occorre verificare che $[\hat{M}_a, \hat{M}_b] = i\hbar\epsilon_{abc}\hat{M}_c = i\hbar(\hat{q}_a\hat{p}_b - \hat{q}_b\hat{p}_a)$ con $a \neq b$. Si comincia col mostrare che $[\hat{M}_a, \hat{q}_b] = i\hbar\epsilon_{abc}\hat{q}_c$. Infatti, essendo $\hat{M}_a = \epsilon_{acd}\hat{q}_c\hat{p}_d$ si ha

$$[\hat{M}_a, \hat{q}_b] = \epsilon_{acd}\hat{q}_c[\hat{p}_d, \hat{q}_b] = -i\hbar\delta_{db}\epsilon_{acd}\hat{q}_c = -i\hbar\epsilon_{acb}\hat{q}_c = i\hbar\epsilon_{abc}\hat{q}_c \quad (186)$$

dove si è sfruttato il fatto che $\epsilon_{acb} = -\epsilon_{abc}$. Allo stesso modo è facile mostrare che $[\hat{M}_a, \hat{p}_b] = i\hbar\epsilon_{abc}\hat{p}_c$. A questo punto si ha:

$$\begin{aligned}[\hat{M}_a, \hat{M}_b] &= \epsilon_{bcd}[\hat{M}_a, \hat{q}_c\hat{p}_d] \\ &= \epsilon_{bcd} \left\{ \hat{q}_c[\hat{M}_a, \hat{p}_d] + [\hat{M}_a, \hat{q}_c]\hat{p}_d \right\} \\ &= i\hbar(\epsilon_{bcd}\epsilon_{ade}\hat{q}_c\hat{p}_e + \epsilon_{bcd}\epsilon_{ace}\hat{q}_e\hat{p}_d) \\ &= i\hbar [-(\delta_{ab}\delta_{ce} - \delta_{ac}\delta_{be})\hat{q}_c\hat{p}_e + (\delta_{ab}\delta_{de} - \delta_{ad}\delta_{be})\hat{q}_e\hat{p}_d] \\ &= i\hbar(-\delta_{ab}\hat{q}_c\hat{p}_c + \hat{q}_a\hat{p}_b + \delta_{ab}\hat{q}_e\hat{p}_e - \hat{q}_b\hat{p}_a) \\ &= i\hbar(\hat{q}_a\hat{p}_b - \hat{q}_b\hat{p}_a)\end{aligned} \quad (187)$$

In questo calcolo è stata sfruttata la proprietà $\epsilon_{abf}\epsilon_{cef} = \delta_{ac}\delta_{be} - \delta_{ae}\delta_{bc}$.

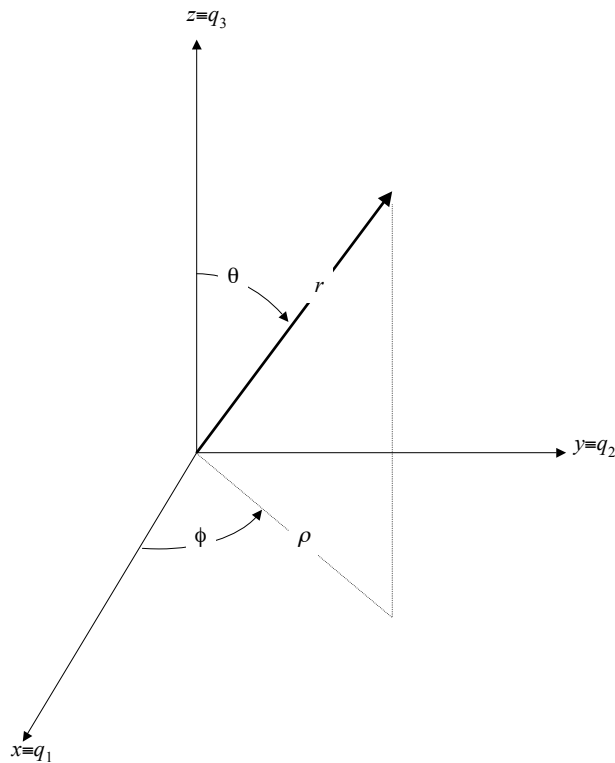


Figura 3: Coordinate polari

2) **Mostrare che nel caso dell'esercizio precedente** $[\hat{M}_a, \hat{\mathbf{q}}^2] = [\hat{M}_a, \hat{\mathbf{p}}^2] = [\hat{\mathbf{M}}^2, \hat{\mathbf{q}}^2] = [\hat{\mathbf{M}}^2, \hat{\mathbf{p}}^2] = 0$ **con** $\hat{\mathbf{q}}^2 = \hat{q}_1^2 + \hat{q}_2^2 + \hat{q}_3^2$ **e lo stesso per** $\hat{\mathbf{p}}^2$.

Questo esercizio è lasciato per esercizio allo studente. Come conseguenza, per una particella in un *potenziale centrale*, ovvero descritto da un Hamiltoniano

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{q}^2) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r^2) \quad (188)$$

si ha che l'Hamiltoniano commuta sia con \hat{M}_3 che con $\hat{\mathbf{M}}^2$.

3) **Mostrare che nello spazio delle coordinate si ha** $\hat{M}_3 = -i\hbar\partial/\partial\phi$, **dove** ϕ **è l'angolo definito in fig. 3**

In coordinate cartesiane l'operatore \hat{M}_3 si scrive come

$$\hat{M}_3 = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (189)$$

dove $x \equiv q_1$ e $y \equiv q_2$. In coordinate polari

$$\begin{cases} x = \rho \cos \phi \\ y = \rho \sin \phi \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} dx = \cos \phi d\rho - \rho \sin \phi d\phi \\ dy = \sin \phi d\rho + \rho \cos \phi d\phi \end{cases}$$

da cui si ricava

$$\begin{cases} d\rho = \cos \phi dx + \sin \phi dy \equiv \frac{\partial \rho}{\partial x} dx + \frac{\partial \rho}{\partial y} dy \\ d\phi = -\frac{\sin \phi}{\rho} dx + \frac{\cos \phi}{\rho} dy \equiv \frac{\partial \phi}{\partial x} dx + \frac{\partial \phi}{\partial y} dy \end{cases}$$

Da queste si ottiene

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \phi} = \cos \phi \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\sin \phi}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ \frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial \rho}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial \phi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \phi} = \sin \phi \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\cos \phi}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} \end{cases}$$

dopo qualche semplice calcolo si ricava infine

$$x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (190)$$

da cui l'asserto.

4) Mostrare che l'operatore $\hat{U}_\alpha = \exp(i\alpha \hat{M} \cdot \mathbf{u}/\hbar)$ genera delle rotazioni intorno all'asse definito dal versore \mathbf{u} .

Senza perdita di generalità è possibile scegliere il versore \mathbf{u} in modo che coincida con l'asse z , ovvero $\mathbf{u} = \mathbf{u}_3$. In tal caso l'operatore in questione diviene, nella rappresentazione delle coordinate

$$\hat{U}_\alpha = \exp\left(\frac{i\alpha \hat{M}_3}{\hbar}\right) \quad (191)$$

per cui

$$\hat{U}_\alpha \psi(r, \theta, \phi) = e^{\alpha \partial / \partial \phi} \psi(r, \theta, \phi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial \phi^n} \psi(r, \theta, \phi) = \psi(r, \theta, \phi + \alpha) \quad (192)$$

5) Trovare autovalori ed autofunzioni dell'operatore \hat{M}_3 .

L'equazione agli autovalori vale

$$\hat{M}_3 f_m(\phi) \equiv \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} f_m(\phi) = m\hbar f_m(\phi) \quad (193)$$

che ha soluzioni

$$f_m(\phi) = e^{im\phi} \quad (194)$$

La condizione di periodicit  $f_m(\phi) = f_m(\phi + 2\pi)$ porta a concludere che m deve essere intero. Ne consegue quindi che momenti angolari semi-interi non possono essere scritti nella forma $\hat{\mathbf{q}} \wedge \hat{\mathbf{p}}$.

6) Scrivere esplicitamente gli operatori $\hat{\mathbf{J}}$, $\hat{\mathbf{J}}^2$, \hat{J}_\pm nella rappresentazione degli autostati \hat{J}_3 per $j = 1/2$ e $j = 1$ e trovare gli autostati di \hat{J}_1 e J_2 .

Si ricordano le formule generali:

$$\begin{aligned} \hat{J}_3 |j, m\rangle &= \hbar m |j, m\rangle \\ \hat{\mathbf{J}}^2 |j, m\rangle &= \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle \\ \hat{J}_\pm |j, m\rangle &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle \end{aligned} \quad (195)$$

con $\hat{J}_\pm = \hat{J}_1 \pm \hat{J}_2$.

Per $j = 1/2$ si ha che gli autostati di \hat{J}_3 sono semplicemente dati da

$$\hat{J}_3 \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle \quad (196)$$

Posto

$$\left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \equiv |+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \equiv |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (197)$$

in questa rappresentazione si ha evidentemente

$$\hat{J}_3 = \frac{\hbar}{2} |+\rangle \langle +| - \frac{\hbar}{2} |-\rangle \langle -| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_3 \quad (198)$$

Evidentemente l'operatore $\hat{\mathbf{J}}^2$ in questa rappresentazione deve essere proporzionale alla matrice unit :

$$\hat{\mathbf{J}}^2 |\pm\rangle = \hbar^2 \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) |\pm\rangle \Rightarrow \hat{\mathbf{J}}^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (199)$$

Usando le espressioni di J_{\pm} è facile vedere che $\hat{J}_{\pm}|\mp\rangle = \hbar|\pm\rangle$ mentre $\hat{J}_{\pm}|\pm\rangle = 0$ per cui⁵

$$\hat{J}_+ = \hbar|+\rangle\langle-| = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{J}_- = \hbar|-\rangle\langle+| = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (201)$$

Usando le relazioni $\hat{J}_1 = (\hat{J}_+ + \hat{J}_-)/2$ e $\hat{J}_2 = (\hat{J}_+ - \hat{J}_-)/2i$ si ottiene facilmente

$$\hat{J}_1 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_1, \quad \hat{J}_2 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_2 \quad (202)$$

Il calcolo degli autostati di $\hat{J}_{1,2}$ è un semplice esercizio ed è lasciato allo studente (si veda anche l'esercizio 9). In generale un momento angolare con $j = 1/2$ è definito come uno *spin*⁶ e si usa il simbolo $\hat{\mathbf{S}}$. Si noti che per quanto detto nell'esercizio precedente uno spin non ha una rappresentazione nello spazio delle coordinate.

Per $j = 1$ si hanno i tre stati

$$\hat{J}_3|1, \pm 1\rangle = \pm\hbar|1, \pm 1\rangle, \quad \hat{J}_3|1, 0\rangle = 0 \quad (203)$$

⁵In generale si ha:

$$\begin{aligned} \hat{J}_+ &= \hbar \sum_{m=-j}^{j-1} \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} |j, m+1\rangle\langle j, m| \\ \hat{J}_- &= \hbar \sum_{m=-j+1}^j \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} |j, m-1\rangle\langle j, m| \end{aligned} \quad (200)$$

⁶Uno spin è un momento angolare intrinseco di una particella. Particelle con spin $1/2$ sono ad esempio l'elettrone, il neutrino, o i nucleoni (i quali però sono composti da particelle elementari, chiamate *quark*, anche esse di spin $1/2$). Esistono anche particelle (elementari e non) con spin nullo o diverso da $1/2$: per esempio il fotone ha spin 1. Particelle con spin semi-intero sottostanno al *principio di esclusione di Pauli*: due particelle identiche non possono occupare lo stesso stato. Nel seguito, per semplicità si intenderà per spin un momento angolare con $j = 1/2$. Si noti infine che uno spin (e, più in generale, un momento angolare) non necessariamente si riferiscono ad un momento angolare nel senso classico della parola, ma possono anche riferirsi a numeri quantici interni che caratterizzano lo stato di un sistema (per esempio un neutrone ed un protone possono essere visti come due stati diversi della stessa particella, il nucleone, caratterizzati da due valori diversi del cosiddetto *spin isotopico*).

Anche qui si può porre

$$|1, 1\rangle \equiv |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1, 0\rangle \equiv |0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1, -1\rangle \equiv |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (204)$$

In questa rappresentazione è facile, ripetendo i ragionamenti del caso precedente ricavare le rappresentazioni dei vari operatori come segue (il calcolo è lasciato per esercizio):

$$\begin{aligned} \hat{J}_1 &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{J}_2 &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{J}_3 &= \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\ \hat{J}_+ &= \hbar\sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{J}_- &= \hbar\sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (205)$$

e $\hat{\mathbf{J}}^2 = 2\hbar^2\mathbf{I}$. Anche in questo caso il calcolo degli autostati di \hat{J}_1 e \hat{J}_2 è un semplice esercizio di algebra e viene lasciato per esercizio. Per esempio per gli autostati di \hat{J}_1 si ha

$$\begin{aligned} |1, \pm 1\rangle_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \pm \frac{1}{2}|0\rangle \\ |1, 0\rangle_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) \end{aligned} \quad (206)$$

7) Mostrare che il più generico operatore autoaggiunto in uno spazio di Hilbert due dimensioni può essere scritto nella forma

$$\hat{\xi} = A + \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{S}} \quad (207)$$

dove \mathbf{B} è un vettore reale a tre componenti e $\hat{\mathbf{S}}$ è un operatore di spin.

Uno spazio a due dimensioni è semplicemente definito da due vettori ortogonali $|e_{1,2}\rangle$ a cui viene data la rappresentazione

$$|e_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |e_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (208)$$

e ovviamente $\langle e_1| = (1, 0)$ $\langle e_2| = (0, 1)$. Un operatore $\hat{\xi}$ può essere rappresentato semplicemente da una matrice 2×2 $\xi_{ab} = \langle e_a | \hat{\xi} | e_b \rangle$. L'operatore aggiunto $\hat{\xi}^\dagger$ ha quindi la rappresentazione $\xi_{ab}^\dagger = \langle e_a | \hat{\xi}^\dagger | e_b \rangle = \langle e_b | \hat{\xi} | e_a \rangle^* = \xi_{ba}^*$. Un operatore è autoaggiunto se

$$\begin{pmatrix} \xi_{11} & \xi_{12} \\ \xi_{21} & \xi_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \xi_{11}^* & \xi_{21}^* \\ \xi_{12}^* & \xi_{22}^* \end{pmatrix} \quad (209)$$

cioè ξ_{11} e ξ_{22} reali e $\xi_{12}^* = \xi_{21}$. Posto $\xi_{11} = A + \hbar B_3/2$, $\xi_{22} = A - \hbar B_3/2$ e $\xi_{21} = \hbar(B_1 + iB_2)/2 = \xi_{12}^*$ con A e B_a reali, si ha

$$\begin{aligned} \hat{\xi} &= \begin{pmatrix} A + \frac{\hbar}{2}B_3 & \frac{\hbar}{2}(B_1 - iB_2) \\ \frac{\hbar}{2}(B_1 + iB_2) & A - \frac{\hbar}{2}B_3 \end{pmatrix} \\ &= A + B_1 \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + B_2 \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + B_3 \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ &= A + B_1 \frac{\hbar}{2} \sigma_1 + B_2 \frac{\hbar}{2} \sigma_2 + B_3 \frac{\hbar}{2} \sigma_3 = A + \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{S}} \end{aligned} \quad (210)$$

dove le σ_a sono le matrici di Pauli. Ne consegue che tutte le proprietà relative ad un qualsivoglia sistema a due livelli possono essere riferite alle analoghe proprietà dello spin.

8) Trovare la condizione per cui due operatori bidimensionali $\hat{\xi}_1$ e $\hat{\xi}_2$ commutano.

Usando il risultato dell'esercizio precedente è possibile scrivere $\hat{\xi}_{1,2} = A_{1,2} + \mathbf{B}_{1,2} \cdot \hat{\mathbf{S}}$ per cui

$$[\hat{\xi}_1, \hat{\xi}_2] = B_{1a} B_{2b} [\hat{S}_a, \hat{S}_b] = i\hbar \epsilon_{abc} B_{1a} B_{2b} \hat{S}_c = \mathbf{B}_1 \wedge \mathbf{B}_2 \cdot \hat{\mathbf{S}} \quad (211)$$

Di conseguenza $[\hat{\xi}_1, \hat{\xi}_2] = 0$ se \mathbf{B}_1 e \mathbf{B}_2 sono paralleli, cioè $\mathbf{B}_{1,2} = \beta_{1,2} \mathbf{u}$ dove \mathbf{u} è un versore.

9) Trovare gli autostati dello spin per una generica direzione definita dal vettore $\mathbf{u} = \cos \phi \sin \theta \mathbf{u}_1 + \sin \phi \sin \theta \mathbf{u}_2 + \cos \theta \mathbf{u}_3$.

L'equazione agli autovalori da risolvere sarà

$$\mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{S}}|s\rangle \equiv \hat{S}_u|s\rangle = m\hbar|s\rangle \quad (212)$$

Scrivendo $|s\rangle$ come

$$|s\rangle = s_1|e_1\rangle + s_2|e_2\rangle = \begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \end{pmatrix} \quad (213)$$

l'equazione diviene

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} u_3 & u_- \\ u_+ & -u_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \end{pmatrix} = m\hbar \begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \end{pmatrix} \quad (214)$$

con $u_{\pm} = u_1 \pm iu_2$. L'equazione precedente ammette soluzioni se

$$\begin{vmatrix} u_3 - 2m & u_- \\ u_+ & -u_3 - 2m \end{vmatrix} = 4m^2 - 1 = 0 \quad (215)$$

poiché $u_3^2 + u_-u_+ = |\mathbf{u}|^2 = 1$. Questa equazione ha, come previsto, le soluzioni $m = \pm 1/2$. Sostituendo queste soluzioni nell'equazione agli autovalori e risolvendo per s_1 e s_2 (con la condizione di normalizzazione $\langle s|s\rangle = |s_1|^2 + |s_2|^2 = 1$) si ottengono, a meno di una costante arbitraria i due stati ortogonali (il calcolo è lasciato per esercizio allo studente):⁷

$$\begin{aligned} |+\mathbf{u}\rangle &= \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\phi/2} |e_1\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi/2} |e_2\rangle \\ |-\mathbf{u}\rangle &= -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi/2} |e_1\rangle + \cos \frac{\theta}{2} e^{i\phi/2} |e_2\rangle \end{aligned} \quad (216)$$

corrispondenti agli autovalori $\pm\hbar/2$ rispettivamente. In particolare scegliendo come vettore \mathbf{u} i versori degli assi si ha:

$$|+\mathbf{u}_1\rangle = \frac{|e_1\rangle + |e_2\rangle}{\sqrt{2}}$$

⁷Si lascia come esercizio anche verificare che vale la relazione di completezza, cioè che $|+\mathbf{u}\rangle\langle+\mathbf{u}| + |-\mathbf{u}\rangle\langle-\mathbf{u}| = 1$

$$\begin{aligned}
|-\mathbf{u}_1\rangle &= \frac{-|e_1\rangle + |e_2\rangle}{\sqrt{2}} \\
|+\mathbf{u}_2\rangle &= \frac{|e_1\rangle + i|e_2\rangle}{\sqrt{2}i} \\
|-\mathbf{u}_2\rangle &= \frac{-|e_1\rangle + i|e_2\rangle}{\sqrt{2}i} \\
|+\mathbf{u}_3\rangle &= |e_1\rangle \equiv |+\rangle \\
|-\mathbf{u}_3\rangle &= |e_2\rangle \equiv |-\rangle
\end{aligned}$$

10) Nel caso dell'esercizio precedente trovare gli operatori di salita e di discesa $\hat{S}_{u\pm}$ che hanno la proprietà $\hat{S}_{u\pm}|\mp\mathbf{u}\rangle = \hbar|\pm\mathbf{u}\rangle$.

Ad esempio

$$\hat{S}_{u+} = \hbar|+\mathbf{u}\rangle\langle-\mathbf{u}| = \hbar \begin{pmatrix} -\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2} & \cos^2\frac{\theta}{2}e^{-i\phi} \\ -\sin^2\frac{\theta}{2}e^{i\phi} & \cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (217)$$

Il calcolo di \hat{S}_{u-} è lasciato per esercizio allo studente.

11) Nel caso dell'esercizio 9 si supponga di aver fatto una misura dello spin nella direzione \mathbf{u} e di aver trovato come risultato $\hbar/2$. Calcolare:

1. Dire in che stato si trova il sistema.
2. Il valore di aspettazione di \hat{S}_1 , \hat{S}_2 e \hat{S}_3 su questo stato.
3. Calcolare ΔS_1 , ΔS_2 e ΔS_3 su questo stato e verificare che vale il principio di indeterminazione.
4. La probabilità che facendo successivamente una misura nella direzione z si trovi come risultato $\hbar/2$.
5. La probabilità che dopo la misura relativa al punto precedente, una nuova misura nella direzione \mathbf{u} fornisca $-\hbar/2$.

1. Ovviamente dopo la misura il sistema si trova nello stato $|+\mathbf{u}\rangle$.

2. Poiché

$$\begin{aligned}\hat{S}_3|+\mathbf{u}\rangle &= \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2}\hat{S}_3|+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2}\hat{S}_3|-\rangle \\ &= \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2}\frac{\hbar}{2}|+\rangle - \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2}\frac{\hbar}{2}|-\rangle\end{aligned}\quad (218)$$

si ha, dopo qualche semplice calcolo

$$\langle+\mathbf{u}|\hat{S}_3|+\mathbf{u}\rangle = \frac{\hbar}{2}\cos\theta\quad (219)$$

Inoltre poiché $\hat{S}_\pm = \hat{S}_1 + i\hat{S}_2$ si ha $\hat{S}_1 = (\hat{S}_+ + \hat{S}_-)/2$, per cui

$$\begin{aligned}\hat{S}_1|+\mathbf{u}\rangle &= \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2}\frac{1}{2}\hat{S}_-|+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2}\frac{1}{2}\hat{S}_+|-\rangle \\ &= \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi/2}\frac{\hbar}{2}|-\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi/2}\frac{\hbar}{2}|+\rangle\end{aligned}\quad (220)$$

dove si sono usate le relazioni $\hat{S}_\pm|\pm\rangle = 0$ e $\hat{S}_\pm|\mp\rangle = \hbar|\mp\rangle$. Ne deriva che dopo qualche calcolo

$$\langle+\mathbf{u}|\hat{S}_1|+\mathbf{u}\rangle = \frac{\hbar}{2}\sin\theta\cos\phi\quad (221)$$

Allo stesso modo si lascia per esercizio dimostrare che

$$\langle+\mathbf{u}|\hat{S}_2|+\mathbf{u}\rangle = \frac{\hbar}{2}\sin\theta\sin\phi\quad (222)$$

3. Si ha, utilizzando il fatto che \hat{S}_3 è hermitiano

$$\langle\hat{S}_3^2\rangle = \langle+\mathbf{u}|\hat{S}_3^\dagger \cdot \hat{S}_3|+\mathbf{u}\rangle = \|\hat{S}_3|+\mathbf{u}\rangle\|^2 = \frac{\hbar^2}{4}\quad (223)$$

e analogamente $\langle\hat{S}_1^2\rangle = \langle\hat{S}_2^2\rangle = \hbar^2/4$. Ricordando che $\Delta S_a = \sqrt{\langle\hat{S}_a^2\rangle - \langle\hat{S}_a\rangle^2}$ ne deriva allora che

$$\begin{aligned}\Delta S_1 &= \frac{\hbar}{2}\sqrt{1 - \sin^2\theta\cos^2\phi} \\ \Delta S_2 &= \frac{\hbar}{2}\sqrt{1 - \sin^2\theta\sin^2\phi} \\ \Delta S_3 &= \frac{\hbar}{2}\sqrt{1 - \cos^2\theta}\end{aligned}\quad (224)$$

Allora ad esempio si ha

$$\begin{aligned}\Delta S_1 \Delta S_2 &= \frac{\hbar^2}{4} \sqrt{\cos^2 \theta + \sin^4 \theta \sin^2 \phi \cos^2 \phi} \\ &\geq \frac{\hbar}{2} |\langle i[\hat{S}_1, \hat{S}_2] \rangle| = \frac{\hbar}{2} |\langle \hat{S}_3 \rangle| = \frac{\hbar^2}{4} \cos \theta\end{aligned}\quad (225)$$

Si lascia per esercizio mostrare le altre relazioni di indeterminazione.

4. Evidentemente si ha

$$P\left(s_z = \frac{\hbar}{2}\right) = |\langle + | + \mathbf{u} \rangle|^2 = \cos^2 \frac{\theta}{2}\quad (226)$$

5. Dopo la misura precedente il sistema si trova nello stato $|+\rangle$. La probabilità che una successiva misura nella direzione \mathbf{u} fornisca il risultato $-\hbar/2$ sarà data da

$$P\left(s_u = -\frac{\hbar}{2}\right) = |\langle -\mathbf{u} | + \rangle|^2 = \sin^2 \frac{\theta}{2}\quad (227)$$

Si noti che, a parte i casi $\theta = 0, \pi/2$ ($\hat{S}_u = \pm \hat{S}_z$) in cui il risultato è sempre nullo, se non si fosse effettuato la misura intermedia, le probabilità di aver trovato lo spin invertito rispetto alla misura iniziale sarebbe stata $|\langle -\mathbf{u} | + \mathbf{u} \rangle|^2 = 0$ poiché i due stati sono ortogonali. Ciò è conseguenza del fatto che gli operatori \hat{S}_u e \hat{S}_z non commutano ($[\hat{S}_u, \hat{S}_z] = i\mathbf{u} \wedge \mathbf{u}_3 \cdot \mathbf{S}$) e quindi sono incompatibili. Ne consegue che la misura intermedia ha perturbato il sistema.

12) Una particella di carica e possiede un momento magnetico intrinseco dato da

$$\hat{\mathbf{m}} = \frac{eg_s}{2mc} \hat{\mathbf{S}} \equiv \mu \hat{\mathbf{S}}\quad (228)$$

dove la costante g_s è una quantità chiamata *momento giromagnetico* e dipende dalla natura della particella (per esempio un elettrone $g_s \simeq 2$). Si supponga di sottoporre la particella ad un campo magnetico costante $\mathbf{B} = B\mathbf{w}$, dove \mathbf{w} è un versore:

1. Scrivere, in analogia con la meccanica classica, l'Hamiltoniano relativo all'interazione del momento magnetico della particella con il campo magnetico.
2. Scrivere l'operatore di evoluzione temporale relativo all'Hamiltoniano precedente.
3. Supponendo che all'istante $t = 0$, $S_3 = \hbar/2$ calcolare la probabilità che al tempo t una misura di S_3 fornisca $-\hbar/2$. Allo stesso modo calcolare la probabilità che al tempo t una misura di S_1 e S_2 fornisca $\pm\hbar/2$.
4. Mostrare se lo stato iniziale di spin $|\psi(0)\rangle$ è autostato di $\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{u}$, al tempo t la $|\psi(t)\rangle$ sarà autostato di $\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{u}(t)$ dove il vettore $\mathbf{u}(t)$ precede intorno al vettore campo magnetico.
5. Mostrare altresì che il valore di aspettazione $\langle \hat{\mathbf{S}}(t) \rangle$ precede intorno al campo magnetico.

1. In analogia con il caso classico si ha

$$\hat{\mathcal{H}} = -\hat{\mathbf{m}} \cdot \mathbf{B} = -\omega \hat{S}_w \quad (229)$$

dove si è posto $\omega = \mu B = eg_s B/2mc$ e

$$\hat{S}_w = \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{w} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} w_3 & w_- \\ w_+ & -w_3 \end{pmatrix} \equiv \frac{\hbar}{2} \sigma_w \quad (230)$$

2. L'operatore di evoluzione temporale può scriversi come

$$\hat{U}(t) = e^{-i\hat{\mathcal{H}}t/\hbar} = e^{i\frac{\omega t}{2}\sigma_w} \quad (231)$$

Per il calcolo di questa quantità si noti che $\sigma_w^2 = 1$ come è facile verificare. Ne consegue che $\sigma_w^3 = \sigma_w$, $\sigma_w^4 = 1$ etc.

$$\begin{aligned} e^{i\frac{\omega t}{2}\sigma_w} &= 1 + i(\omega t/2)\sigma_w - \frac{(\omega t/2)^2}{2!} - i\frac{(\omega t/2)^3}{3!}\sigma_w + \dots \\ &= \cos \frac{\omega t}{2} + i\sigma_w \sin \frac{\omega t}{2} \end{aligned} \quad (232)$$

3. Evidentemente in questo caso $|\psi(0)\rangle = |+\rangle$, quindi

$$\begin{aligned}
 |\psi(t)\rangle &= \left(\cos \frac{\omega t}{2} + i\sigma_w \sin \frac{\omega t}{2} \right) |+\rangle \\
 &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\omega t}{2} + iw_3 \sin \frac{\omega t}{2} & iw_- \sin \frac{\omega t}{2} \\ iw_+ \sin \frac{\omega t}{2} & \cos \frac{\omega t}{2} - iw_3 \sin \frac{\omega t}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\omega t}{2} + iw_3 \sin \frac{\omega t}{2} \\ iw_+ \sin \frac{\omega t}{2} \end{pmatrix} \quad (233)
 \end{aligned}$$

per cui

$$P_-(t) = |\langle -|\psi(t)\rangle|^2 = |w_+|^2 \sin^2 \frac{\omega t}{2} = \frac{1}{2} \cos^2 \theta (1 - \cos \omega t) \quad (234)$$

e ovviamente $P_+(t) = 1 - P_-(t)$. Questa formula è nota come *formula di Rabi* ed ha una validità più generale rispetto al problema in questione, poiché riguarda l'evoluzione temporale di un qualsiasi sistema a 2 livelli. Si noti come se $\theta = 0$ la probabilità di conversione è nulla: in tal caso lo stato iniziale è un autostato dell'Hamiltoniano. Come noto infatti gli autostati dell'Hamiltoniano non evolvono nel tempo.

Si ha inoltre per esempio dopo qualche calcolo

$$\begin{aligned}
 P_{+\mathbf{u}_1}(t) &= |\langle +\mathbf{u}_1|\psi(t)\rangle|^2 \\
 &= \frac{1}{2} - \sin \theta \cos \phi \sin \omega t + \frac{1}{4} \sin 2\theta \sin \phi (1 - \cos \omega t) \quad (235)
 \end{aligned}$$

Il calcolo delle altre probabilità è lasciato per esercizio allo studente.

4. Per mostrare questa proprietà, senza perdita di generalità conviene prendere \mathbf{w} allineato all'asse z e considerare come stato iniziale uno stato $|+\mathbf{u}\rangle$ relativo al versore $\mathbf{u} = \sin \theta \mathbf{u}_1 + \cos \theta \mathbf{u}_3$ che giace inizialmente sul piano xz come in figura 4. Usando la (216) si ha

$$|\psi(0)\rangle = |+\mathbf{u}\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle \quad (236)$$

Al tempo t si ha

$$\begin{aligned}
 |\psi(t)\rangle &= \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle \\
 &= \left(\cos \frac{\omega t}{2} + i\sigma_3 \sin \frac{\omega t}{2} \right) \left(\cos \frac{\theta}{2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle \right) \\
 &= \cos \frac{\theta}{2} e^{i\omega t/2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\omega t/2} |-\rangle \quad (237)
 \end{aligned}$$

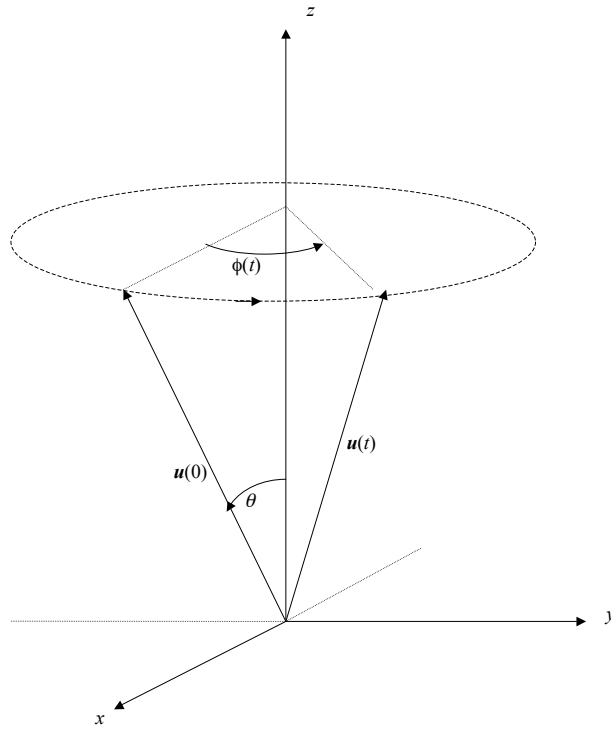


Figura 4: Precessione dello spin

dove si è usato il fatto che $\sigma_3|\pm\rangle = \pm|\pm\rangle$. Guardando l'equazione (216) si vede che questo è lo stato $|+\mathbf{u}(t)\rangle$ relativo al versore $\mathbf{u}(t) = \cos\phi(t)\sin\theta\mathbf{u}_1 + \sin\phi(t)\sin\theta\mathbf{u}_2 + \cos\theta\mathbf{u}_3$ con $\phi(t) = -\omega t$ (si noti che per una particella di carica positiva la precessione è antioraria, in figura 4 è mostrata la precessione dello spin di una particella con carica negativa).⁸

⁸Evidentemente era possibile risolvere questo problema utilizzando direttamente l'equazione di Schrödinger $i\hbar\partial_t|\psi(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}}|\psi(t)\rangle$, ovvero il sistema

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{s}_+(t) \\ \dot{s}_-(t) \end{pmatrix} = -\omega\hat{S}_w \begin{pmatrix} s_+(t) \\ s_-(t) \end{pmatrix}$$

con la condizione iniziale $(s_+(0), s_-(0)) = (\cos\theta/2, \sin\theta/2)$. Si invita lo studente risolvere il problema seguendo questa via alternativa.

5. Viene lasciato come esercizio mostrare che

$$\begin{aligned}
 \langle \psi(t) | \hat{S}_1 | \psi(t) \rangle &= \frac{\hbar}{2} \sin \theta \cos \omega t \\
 \langle \psi(t) | \hat{S}_2 | \psi(t) \rangle &= \frac{\hbar}{2} \sin \theta \sin \omega t \\
 \langle \psi(t) | \hat{S}_3 | \psi(t) \rangle &= \frac{\hbar}{2} \cos \theta
 \end{aligned} \tag{238}$$

dal quale si evince che $\langle \hat{\mathbf{S}}(t) \rangle \propto \mathbf{u}(t)$. Si lascia come esercizio allo studente calcolare l'operatore $\hat{\mathbf{S}}(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{\mathbf{S}} \hat{U}(t)$.⁹

13) Tramite la teoria perturbativa si imposti il problema del calcolo delle correzioni ad autovalori ed autostati indotti dell'interazione spin-campo magnetico

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \mu \hat{\mathcal{H}}_I = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q}) + \mu \mathbf{B}(\hat{q}) \cdot \hat{\mathbf{S}} \tag{239}$$

rispetto all'Hamiltoniano imperturbato $\hat{\mathcal{H}}_0$ (il quale non dipende dallo spin della particella) avente uno spettro discreto di autovalori. Trovare gli autostati del sistema nel caso in cui $\mathbf{B}(\hat{q}) = B(\hat{q})\mathbf{u}$ con \mathbf{u} versore costante.

In assenza di perturbazione ($\mu = 0$) se $\psi_n(q)$ è la funzione d'onda che descrive la parte spaziale relativa all'energia E_n (cioè soluzione dell'equazione $\hat{\mathcal{H}}_0 \psi_n = E_n \psi_n$) lo stato completo che descrive la particella può essere scritto come $|\psi(q), s\rangle = \psi_n(q) |s\rangle$, dove $|s\rangle = s_+ |+\rangle + s_- |-\rangle$ descrive lo spin della particella. Dato che l'Hamiltoniano imperturbato non dipende dallo spin, e quindi l'energia della particella non dipende dalla direzione del suo spin, il sottospazio $s_+ |\psi_n(q), +\rangle + s_- |\psi_n(q), -\rangle$ è doppiamente degenere. Ci si aspetta che l'introduzione della perturbazione indurrà una rottura di questa degenerazione in quanto essa introduce una direzione privilegiata nello spazio data dalla direzione del campo magnetico.

⁹Si provi come esercizio anche ricavare $\langle \hat{\mathbf{S}}(t) \rangle$ direttamente dall'equazione differenziale

$$\frac{d\langle \hat{\mathbf{S}}(t) \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathbf{S}}] \rangle = -\omega \mathbf{u}_3 \wedge \langle \hat{\mathbf{S}}(t) \rangle$$

con la condizione iniziale $\langle \hat{\mathbf{S}}(0) \rangle = \sin \theta \mathbf{u}_1 + \cos \theta \mathbf{u}_3$.

Per convenienza vengono scelti come base del sottospazio degenere gli stati $|\psi_n(q), \pm\rangle$. Utilizzando la teoria perturbativa degenere si ha che all'ordine più basso gli autostati perturbati possono essere scritti come $|\psi'\rangle = s_+|\psi_n(q), +\rangle + s_-|\psi_n(q), -\rangle$ dove gli s_{\pm} soddisfano l'equazione agli autovalori

$$\mathbf{M}_n \begin{pmatrix} s_+ \\ s_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_n^{++} & M_n^{+-} \\ M_n^{-+} & M_n^{--} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_+ \\ s_- \end{pmatrix} = \Delta E_n \begin{pmatrix} s_+ \\ s_- \end{pmatrix} \quad (240)$$

dove ΔE_n è la correzione all' n -esimo livello e

$$\begin{aligned} M_n^{\pm\pm} &= \langle \psi_n(q), \pm | \mu \mathbf{B}(\hat{q}) \cdot \hat{\mathbf{S}} | \psi_n(q), \pm \rangle \\ &= \mu \int dq |\psi_n(q)|^2 B(q) \langle \pm | \hat{S}_{\mathbf{u}(q)} | \pm \rangle \Rightarrow \\ \mathbf{M}_n &= \mu \frac{\hbar}{2} \int dq |\psi_n(q)|^2 B(q) \begin{pmatrix} u_3(q) & u_-(q) \\ u_+(q) & -u_3(q) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (241)$$

Il sistema precedente ha soluzioni non nulle solo se

$$\det(\mathbf{M}_n - \Delta E_n \mathbf{I}) = \begin{vmatrix} M_n^{++} - \Delta E_n & M_n^{+-} \\ M_n^{-+} & M_n^{--} - \Delta E_n \end{vmatrix} = 0 \quad (242)$$

Una volta calcolati i coefficienti $M_n^{\pm\pm}$ è possibile calcolare le correzioni all'energia e gli stati corrispondenti.

Il caso speciale in cui $\mathbf{B}(q)$ ha una direzione costante è più semplice da trattare. Infatti, posto

$$\langle B \rangle_n = \int dq |\psi_n(q)|^2 B(q) \quad (243)$$

si ha evidentemente

$$\mathbf{M}_n = \frac{\hbar \omega_n}{2} \begin{pmatrix} u_3 & u_- \\ u_+ & -u_3 \end{pmatrix} = \omega_n \hat{S}_u \quad (244)$$

con $\omega_n = \mu \langle B \rangle_n$. Il sistema (240) è quindi equivalente al problema 9 in cui si cercano gli autostati dell'operatore \hat{S}_u . Gli autovalori dell'energia sono $E_n^{\pm} = \pm \hbar \omega_n / 2$ corrispondenti agli autostati $|\pm \mathbf{u}\rangle$. Di conseguenza il campo magnetico rompe la degenerazione in modo che lo stato allineato nella direzione del campo magnetico ha una energia $E_n + \hbar \omega_n / 2$ mentre quello nella direzione opposta ha energia $E_n - \hbar \omega_n / 2$, come era ragionevole aspettarsi (si noti che ω_n può essere positivo o negativo a seconda del segno di μ e di $\langle B \rangle_n$).

Si noti infine che, a parte il caso $B = \text{costante}$, questa è solo l'approssimazione di ordine zero in μ , in quanto, in generale, ad ordini superiori vi sarà anche una correzione alla funzione d'onda $\psi_n(q)$ la quale sarà una sovrapposizione di stati ad energia diversa.

14) Si mostri che se $\hat{\mathbf{J}}_A$ e $\hat{\mathbf{J}}_B$ sono due momenti angolari con $[\hat{\mathbf{J}}_A, \hat{\mathbf{J}}_B] = 0$, l'operatore $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}_A + \hat{\mathbf{J}}_B$ è ancora un momento angolare.

Questo esercizio è lasciato per esercizio allo studente (sugg.: si mostri che le componenti \hat{J}_a rispettano le relazioni di commutazione di un momento angolare). L'operatore $\hat{\mathbf{J}}$ è definito come momento angolare totale del sistema.

15) Siano $\hat{\mathbf{S}}_A$ ed $\hat{\mathbf{S}}_B$ due spin con $[\hat{\mathbf{S}}_A, \hat{\mathbf{S}}_B] = 0$ i cui autostati di \hat{S}_3 sono $|\pm\rangle_A$ e $|\pm\rangle_B$ rispettivamente. Si trovino gli autostati di \hat{J}_3 e $\hat{\mathbf{J}}^2$ con $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{S}}_A + \hat{\mathbf{S}}_B$ momento angolare totale del sistema.

Questo problema fa parte del problema più generale relativa alla *combinazione dei momenti angolari*. La base di partenza è data dai quattro stati $|\pm, \pm\rangle = |\pm\rangle_A |\pm\rangle_B$. Si comincia col provare che lo stato $|+, +\rangle$ è un autostato di \hat{J}_3 e $\hat{\mathbf{J}}^2$. Infatti per \hat{J}_3

$$\begin{aligned} \hat{J}_3 |+, +\rangle &= (\hat{S}_{A3} + \hat{S}_{B3}) |+\rangle_A |+\rangle_B \\ &= [\hat{S}_{A3} |+\rangle_A] |+\rangle_B + |+\rangle_A [\hat{S}_{B3} |+\rangle_B] \\ &= \frac{\hbar}{2} |+\rangle_A |+\rangle_B + |+\rangle_A \frac{\hbar}{2} |+\rangle_B \\ &= \hbar |+, +\rangle \end{aligned} \quad (245)$$

Per $\hat{\mathbf{J}}^2$ si noti che vale questa relazione

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}}^2 &= (\hat{\mathbf{S}}_A + \hat{\mathbf{S}}_B)^2 = \hat{\mathbf{S}}_A^2 + \hat{\mathbf{S}}_B^2 + 2\hat{\mathbf{S}}_A \cdot \hat{\mathbf{S}}_B \\ &= \hat{\mathbf{S}}_A^2 + \hat{\mathbf{S}}_B^2 + 2\hat{S}_{A3}\hat{S}_{B3} + \hat{S}_{A+}\hat{S}_{B-} + \hat{S}_{A-}\hat{S}_{B+} \end{aligned} \quad (246)$$

E' facile verificare allora che

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}}^2 |+, +\rangle &= (\hat{\mathbf{S}}_A^2 + \hat{\mathbf{S}}_B^2 + 2\hat{S}_{A3}\hat{S}_{B3} + \hat{S}_{A+}\hat{S}_{B-} + \hat{S}_{A-}\hat{S}_{B+}) |+\rangle_A |+\rangle_B \\ &= \left(\frac{3}{4}\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + 2\frac{1}{4}\hbar^2 \right) |+\rangle_A |+\rangle_B \\ &= 2\hbar^2 |+, +\rangle \end{aligned} \quad (247)$$

dove si è usato il fatto che $\hat{S}_+|+\rangle = 0$. Ricordando le relazioni $\hat{\mathbf{J}}^2|j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j, m\rangle$ e $\hat{J}_3|j, m\rangle = \hbar m|j, m\rangle$ è possibile interpretare lo stato $|+, +\rangle$ come lo stato relativo ad un momento angolare con $j = 1$ e $m = 1$, ovvero,

$$|1, 1\rangle = |+, +\rangle = |+\rangle_A |+\rangle_B \quad (248)$$

Allo stesso modo è possibile fare la seguente identificazione

$$|1, -1\rangle = |-, -\rangle = |-\rangle_A |-\rangle_B \quad (249)$$

Per trovare lo stato $|1, 0\rangle$ è sufficiente utilizzare l'operatore di discesa sullo stato $|1, 1\rangle$ (oppure l'operatore di salita sullo stato $|1, -1\rangle$). Ricordando che $\hat{J}_-|1, 1\rangle = \hbar\sqrt{2}|1, 0\rangle$ si ha

$$\begin{aligned} \hat{J}_-|1, 1\rangle = \hat{J}_-|+, +\rangle &= (\hat{S}_{A-} + \hat{S}_{B-})|+\rangle_A |+\rangle_B \\ &= \hbar|-\rangle_A |+\rangle_B + \hbar|+\rangle_A |-\rangle_B \\ &= \hbar\sqrt{2} \frac{|-\rangle_A |+\rangle_B + |+\rangle_A |-\rangle_B}{\sqrt{2}} \end{aligned} \quad (250)$$

da cui si ha l'identificazione

$$|1, 0\rangle = \frac{|-\rangle_A |+\rangle_B + |+\rangle_A |-\rangle_B}{\sqrt{2}} \quad (251)$$

Poiché gli stati iniziali sono quattro, esisterà una ulteriore combinazione di stati ortogonale agli stati precedenti. E' facile verificare che questo stato è il seguente:

$$|0, 0\rangle = \frac{|-\rangle_A |+\rangle_B - |+\rangle_A |-\rangle_B}{\sqrt{2}} \quad (252)$$

Si lascia per esercizio provare che $\hat{\mathbf{J}}^2|0, 0\rangle = 0$. Ne consegue che questo stato corrisponde ad un momento angolare nullo, $j = 0$. Gli stati relativi a $j = 1$ vengono definiti *stati del tripletto* e corrispondono alla situazione in cui gli spin delle due particelle sono allineati. Lo stato $j = 0$ viene chiamato *singoletto* e corrisponde alla situazione in cui i due spin sono disallineati.¹⁰

¹⁰Ciò potrebbe non risultare evidente per lo stato $|1, 0\rangle$. Tuttavia si lascia per esercizio mostrare che si ha per esempio

$$|1, 0\rangle = \frac{|+\mathbf{u}_1\rangle_A |+\mathbf{u}_1\rangle_B - |-\mathbf{u}_1\rangle_A |-\mathbf{u}_1\rangle_B}{\sqrt{2}}$$

16) Tramite la teoria perturbativa si calcolino le correzioni ad autovalori ed autostati indotti da una interazione spin-spin del tipo

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \beta\hat{\mathcal{H}}_I = \frac{\hat{\mathbf{p}}_A^2}{2m_A} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_B^2}{2m_B} + V(\hat{\mathbf{q}}_{AB}) + \beta F(\hat{\mathbf{q}}_{AB})\hat{\mathbf{S}}_A \cdot \hat{\mathbf{S}}_B \quad (253)$$

dove $\hat{\mathbf{q}}_{AB} = \hat{\mathbf{q}}_A - \hat{\mathbf{q}}_B$ è la distanza tra le due particelle A e B .

Si noti intanto che l'Hamiltoniano in questione può essere riscritto come (si veda Picasso "Lezioni di Meccanica Quantistica", edizioni ETS, §11)

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} &= \frac{\mathbf{P}^2}{2(m_A + m_B)} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + V(\hat{\mathbf{q}}) + \beta F(\hat{\mathbf{q}})\hat{\mathbf{S}}_A \cdot \hat{\mathbf{S}}_B \\ &= \hat{\mathcal{H}}_{\text{c.d.m}}(\mathbf{P}) + \hat{\mathcal{H}}_0(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{q}}) + \beta\hat{\mathcal{H}}_I \end{aligned} \quad (254)$$

dove $\hat{\mathbf{q}} = \hat{\mathbf{q}}_{AB}$, $\mathbf{P} = \hat{\mathbf{p}}_A + \hat{\mathbf{p}}_B$ è l'impulso totale del sistema, $\hat{\mathbf{p}}$ è l'impulso delle particelle rispetto al centro di massa del sistema [$\hat{\mathbf{p}} = (m_A\hat{\mathbf{p}}_A - m_B\hat{\mathbf{p}}_B)/(m_A + m_B)$] e μ è la massa ridotta del sistema. Il termine $\hat{\mathcal{H}}_{\text{c.d.m}}(\mathbf{P})$ descrive il moto del centro di massa del sistema come particella libera e può essere trascurato. Per semplicità nel seguito si supporrà che l'Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_0$ abbia un sistema discreto e non degenero di autovalori. Come nel caso dell'esercizio 13, gli autostati del sistema imperturbato relativi all'autovalore E_n saranno una combinazione dei quattro stati $|\psi_n(\mathbf{q}), \pm, \pm\rangle = |\psi_n(\mathbf{q})|\pm\rangle_A|\pm\rangle_B$ che definiscono quindi uno spazio quattro volte degenero.

Come al solito, all'ordine più basso della teoria perturbativa degenero gli stati perturbati saranno una combinazione lineare degli stati imperturbati degeneri

$$|\psi\rangle = \sum_{i_A, i_B} s_{i_A, i_B} |\psi_n(\mathbf{q}), i_A, i_B\rangle \quad (255)$$

dove $i_{A,B} = +, -$ e gli s_{i_A, i_B} sono soluzioni del problema agli autovalori

$$\sum_{i'_A, i'_B} \langle \psi_n(\mathbf{q}), i_A, i_B | \beta\hat{\mathcal{H}}_I | \psi_n(\mathbf{q}), i'_A, i'_B \rangle s_{i'_A, i'_B} = \Delta E_n s_{i_A, i_B} \quad (256)$$

Come nell'esercizio 13 è possibile separare la parte spaziale da quella di spin

$$\langle \psi_n(\mathbf{q}), i_A, i_B | \beta\hat{\mathcal{H}}_I | \psi_n(\mathbf{q}), i'_A, i'_B \rangle = \beta \langle F \rangle_n \langle i_A, i_B | \hat{\mathbf{S}}_A \cdot \hat{\mathbf{S}}_B | i'_A, i'_B \rangle \quad (257)$$

cioè gli spin sono allineati in un asse ortogonale all'asse z , mentre invece si ha

$$|0, 0\rangle = \frac{|+\mathbf{u}_1\rangle_A |-\mathbf{u}_1\rangle_B - |-\mathbf{u}_1\rangle_A |+\mathbf{u}_1\rangle_B}{\sqrt{2}}$$

cioè per il singoletto gli spin sono disallineati anche nell'asse ortogonale all'asse z .

con

$$\langle F \rangle_n = \int d^3 \mathbf{q} |\psi_n(\mathbf{q})|^2 F(\mathbf{q}) \quad (258)$$

Per il calcolo di $\langle i_A, i_B | \hat{\mathbf{S}}_A \cdot \hat{\mathbf{S}}_B | i'_A, i'_B \rangle$ conviene utilizzare la seguente relazione:

$$\hat{\mathbf{S}}_A \cdot \hat{\mathbf{S}}_B = \hat{S}_{A3} \hat{S}_{B3} + \frac{1}{2} (\hat{S}_{A+} \hat{S}_{B-} + \hat{S}_{A-} \hat{S}_{B+}) \quad (259)$$

Con queste posizioni è facile verificare che

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{S}}_A \cdot \hat{\mathbf{S}}_B |+, +\rangle &= \frac{\hbar^2}{4} |+, +\rangle \\ \hat{\mathbf{S}}_A \cdot \hat{\mathbf{S}}_B |+, -\rangle &= -\frac{\hbar^2}{4} |+, -\rangle + \frac{\hbar^2}{2} |-, +\rangle \\ \hat{\mathbf{S}}_A \cdot \hat{\mathbf{S}}_B |-, +\rangle &= -\frac{\hbar^2}{4} |-, +\rangle + \frac{\hbar^2}{2} |+, -\rangle \\ \hat{\mathbf{S}}_A \cdot \hat{\mathbf{S}}_B |-, -\rangle &= \frac{\hbar^2}{4} |-, -\rangle \end{aligned}$$

Posto $\varepsilon_n = \beta \langle F \rangle_n \hbar^2 / 4$ si ha che l'equazione agli autovalori (256) si riduce a

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_n & & & & \\ & -\varepsilon_n & 2\varepsilon_n & & \\ & 2\varepsilon_n & -\varepsilon_n & & \\ & & & \varepsilon_n & \\ & & & & \varepsilon_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_{++} \\ s_{+-} \\ s_{-+} \\ s_{--} \\ s_{--} \end{pmatrix} = \Delta E_n \begin{pmatrix} s_{++} \\ s_{+-} \\ s_{-+} \\ s_{--} \\ s_{--} \end{pmatrix} \quad (260)$$

che ammette soluzioni non banali se

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_n - \Delta E_n & & & & \\ & -\varepsilon_n - \Delta E_n & 2\varepsilon_n & & \\ & 2\varepsilon_n & -\varepsilon_n - \Delta E_n & & \\ & & & \varepsilon_n - \Delta E_n & \\ & & & & \varepsilon_n - \Delta E_n \end{vmatrix} = (\Delta E_n - \varepsilon)^3 (\Delta E_n + 3\varepsilon_n) = 0 \quad (261)$$

ovvero $\Delta E_n = \varepsilon_n$ o $\Delta E_n = -3\varepsilon_n$. Per $\Delta E_n = \varepsilon_n$ si ottiene che s_{++} e s_{--} sono arbitrari e $s_{+-} = s_{-+}$. Ne consegue che una qualunque combinazione dei tre stati

$$|+, +\rangle, |-, -\rangle, \frac{|+, -\rangle + |-, +\rangle}{\sqrt{2}} \quad (262)$$

ha la stessa energia $E_n + \varepsilon_n$. Questi sono esattamente i tre stati di tripletto. Se invece $\Delta E_n = -3\varepsilon_n$ si ottiene $s_{++} = s_{--} = 0$ e $s_{+-} = -s_{-+}$ ovvero l'unico stato

$$\frac{|+, -\rangle - |-, +\rangle}{\sqrt{2}} \quad (263)$$

cioè lo stato di singoletto.

In definitiva la perturbazione non rimuove completamente la degenerazione, essendo il sottospazio con $j = 1$ degenero con la stessa energia $E_n + \varepsilon_n$, mentre lo stato con $j = 0$ ha energia $E_n - 3\varepsilon_n$. Ciò non deve sorprendere in quanto è evidente che un accoppiamento del tipo $\hat{\mathbf{S}}_A \cdot \hat{\mathbf{S}}_B$ è massimo quando gli spin sono allineati. Si noti anche che scrivendo $\hat{\mathbf{S}}_A \cdot \hat{\mathbf{S}}_B$ come

$$\hat{\mathbf{S}}_A \cdot \hat{\mathbf{S}}_B = \frac{1}{2} [(\hat{\mathbf{S}}_A + \hat{\mathbf{S}}_B)^2 - \hat{\mathbf{S}}_A^2 - \hat{\mathbf{S}}_B^2] = \frac{\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{S}}_A^2 - \hat{\mathbf{S}}_B^2}{2} \quad (264)$$

e scegliendo come base direttamente gli stati di singoletto e di tripletto $|\psi_n(\mathbf{q}), j, m\rangle$ si sarebbe ottenuto immediatamente

$$\begin{aligned} \Delta E_n &= \langle \psi_n(\mathbf{q}), j, m | \left[\beta F(\hat{\mathbf{q}}) \frac{\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{S}}_A^2 - \hat{\mathbf{S}}_B^2}{2} \right] | \psi_n(\mathbf{q}), j, m \rangle \\ &= 2\varepsilon_n \left[j(j+1) - \frac{3}{2} \right] \end{aligned} \quad (265)$$

che fornisce direttamente $\Delta E_n = +\varepsilon_n$ se $j = 1$ e $\Delta E_n = -3\varepsilon_n$ se $j = 0$.

17) Si trovino gli autostati di \hat{J}_3 e $\hat{\mathbf{J}}^2$ con $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{M}} + \hat{\mathbf{S}}$ dove $\hat{\mathbf{M}}$ è un momento angolare e $\hat{\mathbf{S}}$ uno spin.

Anche in questo caso la base di partenza è costituita dagli stati $|l, m, \pm\rangle = |l, m\rangle|\pm\rangle$. Il generico autostato di \hat{J}_3 può essere costruito come segue:

$$|j, \mu\rangle = a_+ |l, m, +\rangle + a_- |l, m+1, -\rangle \quad (266)$$

Si lascia per esercizio verificare che $\hat{J}_3 |j, \mu\rangle = \hbar(m+1/2) |j, \mu\rangle$, per cui si può fare l'identificazione $\mu = m+1/2$. I coefficienti a_{\pm} possono essere trovati imponendo che questo sia anche autostato di $\hat{\mathbf{J}}^2$. Per il calcolo conviene utilizzare la relazione

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{\mathbf{M}}^2 + \hat{\mathbf{S}}^2 + 2\hat{M}_3\hat{S}_3 + \hat{M}_+\hat{S}_- + \hat{M}_-\hat{S}_+ \quad (267)$$

Usando le relazioni (195) dopo qualche calcolo, lasciato per esercizio, si otterrà

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}}^2 |j, m+1/2\rangle &= \hbar^2 \left[(\Gamma_{lm}^{11} a_+ + \Gamma_{lm}^{12} a_-) |l, m, +\rangle \right. \\ &\quad \left. + (\Gamma_{lm}^{12} a_+ + \Gamma_{lm}^{22} a_-) |l, m+1, -\rangle \right] \\ &\equiv \hbar^2 j(j+1) |j, m+1/2\rangle \end{aligned} \quad (268)$$

con

$$\begin{aligned}
\Gamma_{lm}^{11} &= l(l+1) + \frac{3}{4} + m \\
\Gamma_{lm}^{22} &= l(l+1) - \frac{1}{4} - m \\
\Gamma_{lm}^{12} &= \sqrt{(l+m+1)(l-m)}
\end{aligned} \tag{269}$$

Questa relazione è soddisfatta se

$$\begin{cases} \Gamma_{lm}^{11}a_+ + \Gamma_{lm}^{12}a_- = j(j+1)a_+ \\ \Gamma_{lm}^{12}a_+ + \Gamma_{lm}^{22}a_- = j(j+1)a_- \end{cases} \tag{270}$$

Questo sistema ammette soluzioni non banali se

$$\begin{vmatrix} l(l+1) + \frac{3}{4} + m - j(j+1) & \sqrt{(l+m+1)(l-m)} \\ \sqrt{(l+m+1)(l-m)} & l(l+1) - \frac{1}{4} - m - j(j+1) \end{vmatrix} = 0 \tag{271}$$

Posto $x = l(l+1) - j(j+1) - 1/4$ si ha l'equazione

$$(x-m)(x+m+1) = (l+m+1)(l-m) \tag{272}$$

che evidentemente ha soluzioni se $x = l$ oppure se $x = -l - 1$ cioè

$$l(l+1) - j(j+1) - \frac{1}{4} = \begin{cases} l+1 \\ -l \end{cases} \tag{273}$$

Le uniche soluzioni positive di queste equazioni sono $j = l \pm 1/2$. Il calcolo dei coefficienti a_{\pm} è lasciato come esercizio. Il risultato finale è il seguente

$$|j, \mu\rangle = \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}}|l, m, +\rangle + \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}}|l, m, -\rangle \tag{274}$$

per $j = l + 1/2$ e $\mu = m + 1/2$, e

$$|j, \mu\rangle = \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}}|l, m, +\rangle - \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}}|l, m, -\rangle \tag{275}$$

con $j = l - 1/2$ e $\mu = m + 1/2$. Si noti come gli stati con $j = l + 1/2$ siano $2l + 2$ mentre quelli con $j = l - 1/2$ siano $2l$. In totale si hanno quindi $2(2l + 1)$ stati, pari cioè al numero iniziale di stati $|l, m\rangle|\pm\rangle$.

18) Tramite la teoria perturbativa si imposti il problema del calcolo delle correzioni ad autovalori ed autostati indotti dell'interazione spin-momento angolare

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \mu\hat{\mathcal{H}}_I = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{q}}) + \alpha\mathbf{W}(\hat{\mathbf{q}})\hat{\mathbf{M}} \cdot \hat{\mathbf{S}} \quad (276)$$

rispetto all'Hamiltoniano imperturbato $\hat{\mathcal{H}}_0$.

Questo problema è lasciato per esercizio allo studente (sugg.: in analogia con il problema 16, si scriva

$$\hat{\mathbf{M}} \cdot \hat{\mathbf{S}} = \frac{1}{2} [(\hat{\mathbf{M}} + \hat{\mathbf{S}})^2 - \hat{\mathbf{M}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2] = \frac{\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{M}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2}{2} \quad (277)$$

e si utilizzi direttamente la base $\psi_n(\mathbf{q})|j, \mu\rangle$, dove gli stati $|j, \mu\rangle$ sono quelli trovati nell'esercizio precedente).

Appendice A: La corrente di probabilità

Viene trattato qui il problema generale in tre dimensioni. Si consideri l'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo per una particella soggetta ad un potenziale $V(\mathbf{q}, t)$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi \quad (\text{A1})$$

Prendendo la complessa coniugata di ambo i membri si ha

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + V\psi^* \quad (\text{A2})$$

Moltiplicando la prima per ψ^* e la seconda per ψ e sottraendo membro a membro

$$i\hbar \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^* \right) \quad (\text{A3})$$

Il primo membro può essere riscritto come segue

$$i\hbar \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^* \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 \quad (\text{A4})$$

Il secondo membro può essere riscritto come

$$-\frac{\hbar^2}{2m} [\psi^* \nabla \cdot (\nabla \psi) - \psi \nabla \cdot (\nabla \psi^*)] = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (\text{A5})$$

come è facile verificare. Ponendo allora

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) \quad (\text{A6})$$

è facile vedere che la (A3) può essere riscritta sotto forma di una *equazione di continuità*

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (\text{A7})$$

Si consideri allora un certo volume finito \mathcal{V} e integrando ambo i membri della (A7) su \mathcal{V}

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}} |\psi|^2 d^3 \mathbf{q} = - \int_{\mathcal{V}} \nabla \cdot \mathbf{j} d^3 \mathbf{q} = - \oint_{\partial \mathcal{V}} \mathbf{j} \cdot \hat{\mathbf{n}} dS \quad (\text{A8})$$

dove è stato utilizzato il teorema di Gauss ($\partial \mathcal{V}$ è la superficie di contorno del volume \mathcal{V} e $\hat{\mathbf{n}}$ è il versore perpendicolare alla superficie dS). Il primo membro

rappresenta la variazione della probabilità di trovare la particella nel volume \mathcal{V} . Ne consegue che $\mathbf{j}(\mathbf{q}, t) \cdot \hat{\mathbf{n}} dS dt$ può essere interpretato come la probabilità che la particella sia passata attraverso la superficie dS nel tempo dt , ovvero $\mathbf{j} \cdot \hat{\mathbf{n}}$ è interpretato come un *flusso di probabilità* e la corrente \mathbf{j} è interpretata come una *corrente di probabilità*.

Nel caso unidimensionale, la corrente può essere riscritta come

$$j = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial q} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial q} \right) \quad (\text{A9})$$

e l'equazione di continuità diviene

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial q} = 0 \quad (\text{A10})$$

Appendice B: Dimostrazione dell'identità operatoriale (111)

Espandendo $e^{\pm \hat{\alpha}}$ si ha

$$e^{\hat{\alpha}} \hat{\beta} e^{-\hat{\alpha}} = \left[1 + \hat{\alpha} + \dots + \frac{\hat{\alpha}^n}{n!} + \dots \right] \hat{\beta} \left[1 - \hat{\alpha} + \dots + \frac{(-1)^n \hat{\alpha}^n}{n!} + \dots \right] \quad (\text{B1})$$

Raggruppando tutti i termini di ordine $\hat{\alpha}^n$ si ha

$$e^{\hat{\alpha}} \hat{\beta} e^{-\hat{\alpha}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \hat{\zeta}_n \quad (\text{B2})$$

dove

$$\begin{aligned} \hat{\zeta}_n &= n! \left[\frac{\hat{\alpha}^n \hat{\beta}}{n!} - \frac{\hat{\alpha}^{n-1} \hat{\beta} \hat{\alpha}}{(n-1)!1!} + \frac{\hat{\alpha}^{n-2} \hat{\beta} \hat{\alpha}^2}{(n-2)!2!} + \dots (-1)^n \frac{\hat{\beta} \hat{\alpha}^n}{n!} \right] \\ &= \sum_{p=0}^n \binom{n}{p} (-1)^p \hat{\alpha}^{n-p} \hat{\beta} \hat{\alpha}^p \end{aligned} \quad (\text{B3})$$

Per dimostrare l'identità basta far vedere che

$$\hat{\zeta}_n = \overbrace{[\hat{\alpha}, [\hat{\alpha}, \dots [\hat{\alpha}, \hat{\beta}] \dots]]}^{n \text{ volte}} \quad (\text{B4})$$

Questo può essere fatto facilmente per induzione. Infatti, per $n = 1$ si ha:

$$\hat{\zeta}_1 = \sum_{p=0}^1 \binom{1}{p} (-1)^p \hat{\alpha}^{1-p} \hat{\beta} \hat{\alpha}^p = \hat{\alpha} \hat{\beta} - \hat{\beta} \hat{\alpha} = [\hat{\alpha}, \hat{\beta}] \quad (\text{B5})$$

Supposto vero per n per $n + 1$ si ha

$$\begin{aligned} [\hat{\alpha}, \hat{\zeta}_n] &= \sum_{p=0}^n \binom{n}{p} (-1)^p (\hat{\alpha}^{n-p+1} \hat{\beta} \hat{\alpha}^p - \hat{\alpha}^{n-p} \hat{\beta} \hat{\alpha}^{p+1}) \\ &= \sum_{p=0}^n \binom{n}{p} (-1)^p \hat{\alpha}^{n+1-p} \hat{\beta} \hat{\alpha}^p + \sum_{p=0}^n \binom{n}{p} (-1)^{p+1} \hat{\alpha}^{n+1-(p+1)} \hat{\beta} \hat{\alpha}^{p+1} \\ &= \sum_{p=0}^n \binom{n}{p} (-1)^p \hat{\alpha}^{n+1-p} \hat{\beta} \hat{\alpha}^p + \sum_{p=1}^{n+1} \binom{n}{p-1} (-1)^p \hat{\alpha}^{n+1-p} \hat{\beta} \hat{\alpha}^p \end{aligned} \quad (\text{B6})$$

dove nell'ultima sommatoria si è fatta la sostituzione $p = p' - 1$. Utilizzando la relazione

$$\binom{n}{p} + \binom{n}{p-1} = \binom{n+1}{p} \quad (\text{B7})$$

valida per $p = 1, \dots, n$ si ha che

$$\begin{aligned} [\hat{\alpha}, \hat{\zeta}_n] &= \hat{\alpha}^{n+1} \hat{\beta} + \sum_{p=1}^n \binom{n+1}{p} (-1)^p \hat{\alpha}^{n+1-p} \hat{\beta} \hat{\alpha}^p + (-1)^{n+1} \hat{\beta} \hat{\alpha}^{n+1} \\ &= \sum_{p=0}^{n+1} \binom{n+1}{p} (-1)^p \hat{\alpha}^{n+1-p} \hat{\beta} \hat{\alpha}^p \equiv \hat{\zeta}_{n+1} \end{aligned} \quad (\text{B8})$$

ovvero

$$\begin{aligned} \hat{\zeta}_{n+1} &= [\hat{\alpha}, \hat{\zeta}_n] = [\hat{\alpha}, \overbrace{[\hat{\alpha}, [\hat{\alpha}, \dots [\hat{\alpha}, \hat{\beta}] \dots]]}^{n \text{ volte}}] \\ &= \overbrace{[\hat{\alpha}, [\hat{\alpha}, \dots [\hat{\alpha}, \hat{\beta}] \dots]]}^{n+1 \text{ volte}} \end{aligned} \quad (\text{B9})$$

c.v.d.