

Compito 26 maggio 2022

Si consideri una particella di massa m che si muove sul piano, confinata da una forza centrale armonica, la cui Hamiltoniana è

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}\alpha \hat{r}^2, \quad \hat{p}^2 \equiv \sum_i \hat{p}_i^2, \quad \hat{r}^2 \equiv \sum_i \hat{x}_i^2.$$

(a) Definire le unità naturali del problema, che permettono di riscrivere l'equazione di Schrödinger in termini di quantità adimensionali. In particolare, scrivere la scala di lunghezza, di tempo e di energia del problema.

(b) Calcolare lo spettro energetico e le degenerazioni dei livelli.

(c) Scrivere esplicitamente le funzioni d'onda dello stato fondamentale e dei primi stati eccitati.

(d) Calcolare la posizione media e l'impulso medio della particella nello stato fondamentale e nei primi stati eccitati. Calcolare la distanza media dal centro per il livello fondamentale.

(e) Calcolare la probabilità che la particella nello stato fondamentale si trovi ad una distanza $r \leq r_*$, e la probabilità che abbia un impulso $|\mathbf{p}| > p_*$ ($r_* > 0$ e $p_* > 0$ sono valori generici).

La particella è adesso soggetta ad una forza aggiuntiva costante F lungo uno degli assi.

(f) Assumendo F piccola, calcolare le correzioni allo spettro, al primo ordine in F , sullo stato fondamentale e i primi stati eccitati.

(g) Assumendo F piccola, calcolare al secondo ordine in F la correzione allo spettro per il livello fondamentale. Discutere la validità dell'approssimazione al secondo ordine.

(h) Calcolare esattamente lo spettro in presenza di F . Confrontare con il calcolo perturbativo.

Consideriamo adesso due particelle identiche fermioniche di spin $1/2$ soggette al potenziale armonico introdotto sopra, la cui Hamiltoniana è

$$\hat{H}_2 = \sum_{a=1}^2 \left(\frac{\hat{p}_a^2}{2m} + \frac{1}{2}\alpha \hat{r}_a^2 \right).$$

(i) Assumendo che l'Hamiltoniana delle due particelle non dipenda dallo spin, scrivere la funzione d'onda dello stato fondamentale e dei primi stati eccitati, tenendo conto degli stati di spin.

(l) Rispondere alla stessa domanda in (i), assumendo un'interazione spin-spin del tipo

$$\hat{H}_{\text{spin}} = \kappa \mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2.$$

Riportiamo per referenza le funzioni d'onda in rappresentazione di Schrödinger dei primi due livelli dell'oscillatore armonico unidimensionale

$$\varphi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\gamma}} \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{2\gamma^2}}; \quad \varphi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{\gamma}} \frac{\sqrt{2}}{\pi^{1/4}} \frac{x}{\gamma} e^{-\frac{x^2}{2\gamma^2}}$$

dove γ è la lunghezza caratteristica dell'oscillatore armonico.

Soluzioni:

(a) Si ha $[\alpha] = M/T^2$ (con M, T, L unità di massa, tempo e lunghezza rispettivamente) e da $[\hbar] = ML^2/T$ (e ovviamente $[m] = M$) si ottengono le scale tipiche

$$T \sim \sqrt{\frac{m}{\alpha}}, \quad L \sim \sqrt{\frac{\hbar}{\sqrt{\alpha m}}}, \quad E \sim \hbar \sqrt{\frac{\alpha}{m}},$$

che coincidono con le scale scritte in notazione usuale se si sostituisce $\alpha = m\omega^2$.

(b) La Hamiltoniana è separabile in coordinate cartesiane nella somma di due oscillatori unidimensionali; indicando con $n_1, n_2 \in \mathbf{N}$ i livelli di queste due Hamiltoniane si ottiene lo spettro

$$E_{n_1, n_2} = \hbar \sqrt{\frac{\alpha}{m}} (n_1 + n_2 + 1) \equiv \hbar \sqrt{\frac{\alpha}{m}} (n + 1).$$

Poichè il numero naturale n può essere scritto in $n + 1$ modi come somma di numeri naturali, il livello n -esimo ha degenerazione $n + 1$.

(c) La funzione d'onda del fondamentale è $\varphi_0(x_1)\varphi_0(x_2)$. Le funzioni d'onda del primo livello degenere due volte si possono scrivere come $\varphi_0(x_1)\varphi_1(x_2)$ e $\varphi_1(x_1)\varphi_0(x_2)$ o due qualunque combinazioni ortonormali di queste. γ è la scala di lunghezza identificata nel punto (a).

(d) Per calcolare la posizione media serve calcolare il valore di aspettazione delle componenti dell'operatore posizione \hat{x}_1 e \hat{x}_2 . Per il fondamentale si trova

$$\langle \hat{x}_1 \rangle = \int \varphi_0(x_1)x_1\varphi_0(x_1)dx_1 \int \varphi_0(x_2)\varphi_0(x_2)dx_2 = 0$$

poichè $\varphi_0(x_1)^2$ è una funzione pari mentre x_1 è dispari. In modo identico si annulla il valor medio di \hat{x}_2 sul fondamentale ed in modo analogo si annullano anche i valori medi sugli stati primi eccitati. Per procedere in modo sistematico si può usare il fatto che tutti gli stati che hanno la stessa energia hanno la stessa parità $(-1)^n$, quindi il valor medio su questi stati dell'operatore posizione (dispari) si annulla. Con lo stesso argomento si vede annullarsi anche il valor medio dell'operatore impulso. La distanza media dal centro nello stato fondamentale si calcola come

$$\langle d \rangle = \int \sqrt{x_1^2 + x_2^2} \varphi_0(x_1)^2 \varphi_0(x_2)^2 dx_1 dx_2 = \frac{1}{\pi\gamma^2} 2\pi \int_0^\infty r e^{-r^2/\gamma^2} r dr = 2\gamma \int_0^\infty \xi^2 e^{-\xi^2} d\xi$$

e introducendo il parametro arbitrario c si ha

$$\int_0^\infty \xi^2 e^{-c\xi^2} d\xi = -\frac{d}{dc} \int_0^\infty e^{-c\xi^2} d\xi = -\frac{1}{2} \frac{d}{dc} \sqrt{\frac{\pi}{c}} = \frac{\sqrt{\pi}}{4} c^{-3/2},$$

quindi infine $\langle d \rangle = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \gamma$.

(e) La probabilità che nello stato fondamentale la particella si trovi a distanza $r \leq r_*$ è

$$\int_{r < r_*} \phi_0(x_1)^2 \phi_0(x_2)^2 dx_1 dx_2 = \frac{2\pi}{\pi\gamma^2} \int_0^{r_*} e^{-r^2/\gamma^2} r dr = 2 \int_0^{r_*/\gamma} e^{-\xi^2} \xi d\xi = \int_0^{(r_*/\gamma)^2} e^{-\eta} d\eta = 1 - e^{-(r_*/\gamma)^2}.$$

La probabilità che nel fondamentale l'impulso soddisfi $|\mathbf{p}| > p_*$ può essere calcolata in modo analogo usando la trasformata di Fourier della funzione d'onda o, più semplicemente, la rappresentazione dell'impulso. In questa rappresentazione l'equazione di Schrödinger per l'oscillatore armonico mantiene la stessa forma che in rappresentazione della posizione ma con $m' = 1/\alpha$ e $\alpha' = 1/m$, quindi l'unico effetto che si ha nella funzione d'onda è di sostituire γ con \hbar/γ , quindi usando il calcolo precedente si vede che la probabilità che nel fondamentale si abbia $|\mathbf{p}| > p_*$ è

$$e^{-(p_*\gamma/\hbar)^2}.$$

(f) Consideriamo una forza diretta lungo l'asse x_1 , quindi $V = -Fx_1$. Per il calcolo al primo ordine sul fondamentale basta calcolare il valore medio di V sul fondamentale, che si annulla come visto in (d). Per il calcolo al primo ordine sul livello primo eccitato (degenere) serve calcolare tutti gli elementi di matrice della perturbazione tra gli stati del

livello e diagonalizzare la matrice. Tutti gli elementi di matrice si annullano per la simmetria per parità, quindi al primo ordine i livelli non cambiano.

(g) La formula per la variazione dell'energia del fondamentale in teoria delle perturbazioni non degenera al secondo ordine è data da

$$\Delta E_{0,0}^{(2)} = \sum_{n_1, n_2 > 0} \frac{|\langle n_1, n_2 | V | 0, 0 \rangle|^2}{E_{0,0} - E_{n_1, n_2}}$$

inoltre abbiamo $V = -Fx_1$ e

$$x_1 = \frac{\gamma}{\sqrt{2}}(a_1 + a_1^\dagger)$$

dove a_1 e a_1^\dagger sono rispettivamente gli operatori di discesa e salita dell'oscillatore armonico unidimensionale in direzione x_1 . L'unico elemento di matrice non nullo che contribuisce alla somma è quindi

$$\langle 1, 0 | V | 0, 0 \rangle = -F \frac{\gamma}{\sqrt{2}}$$

e si ottiene

$$\Delta E_{0,0}^{(2)} = -\frac{F^2 \gamma^2}{2} \frac{1}{\hbar \sqrt{\alpha/m}} = -\frac{F^2}{2\alpha}.$$

Questo calcolo è da ritenersi valido fintanto che la variazione di energia è molto più piccola della spaziatura dei livelli:

$$\frac{F^2}{2\alpha} \ll \hbar \sqrt{\frac{\alpha}{m}}.$$

(h) Si può riscrivere

$$\frac{1}{2}\alpha(x_1^2 + x_2^2) - Fx_1 = \frac{1}{2}\alpha\left(x_1 - \frac{F}{\alpha}\right)^2 - \frac{F^2}{2\alpha} + \frac{1}{2}\alpha x_2^2$$

da cui si vede che il sistema perturbato è un oscillatore armonico con gli stessi parametri di quello originale ma con il centro di oscillazione spostato in $(F/\alpha, 0)$ ed un termine aggiuntivo $-\frac{F^2}{2\alpha}$ all'energia. Questo è lo stesso termine che era stato trovato nel punto precedente con teoria delle perturbazioni al secondo ordine.

(i) Nel fondamentale entrambe le particelle hanno $n_1 = n_2 = 0$, quindi lo stato orbitale è necessariamente simmetrico per scambio. Di conseguenza il sistema deve avere $S = 0$ in quanto il singoletto è l'unica combinazione di due spin antisimmetrica per scambio. La funzione d'onda del fondamentale è quindi

$$\varphi_0(x_1^{(1)})\varphi_0(x_2^{(1)})\varphi_0(x_1^{(2)})\varphi_0(x_2^{(2)})\frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}},$$

dove i numeri in parentesi indicano la particella.

Per i primi eccitati abbiamo una particella con $n_1 = n_2 = 0$ e l'altra con $n_1 = 1, n_2 = 0$ oppure $n_1 = 0, n_2 = 1$. Essendo le due particelle non equivalenti tutti e 8 gli stati possibili (2 stati orbitali \times 4 stati di spin) sono compatibili con il principio di esclusione. Le due combinazioni orbitali simmetriche

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_0(x_1^{(1)})\varphi_0(x_2^{(1)})\varphi_1(x_1^{(2)})\varphi_0(x_2^{(2)}) + \varphi_0(x_1^{(2)})\varphi_0(x_2^{(2)})\varphi_1(x_1^{(1)})\varphi_0(x_2^{(1)})) \\ & \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_0(x_1^{(1)})\varphi_0(x_2^{(1)})\varphi_0(x_1^{(2)})\varphi_1(x_2^{(2)}) + \varphi_0(x_1^{(2)})\varphi_0(x_2^{(2)})\varphi_0(x_1^{(1)})\varphi_1(x_2^{(1)})) \end{aligned}$$

sono necessariamente in uno stato di singoletto di spin, mentre le due combinazioni orbitali antisimmetriche

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_0(x_1^{(1)})\varphi_0(x_2^{(1)})\varphi_1(x_1^{(2)})\varphi_0(x_2^{(2)}) - \varphi_0(x_1^{(2)})\varphi_0(x_2^{(2)})\varphi_1(x_1^{(1)})\varphi_0(x_2^{(1)})) \\ & \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_0(x_1^{(1)})\varphi_0(x_2^{(1)})\varphi_0(x_1^{(2)})\varphi_1(x_2^{(2)}) - \varphi_0(x_1^{(2)})\varphi_0(x_2^{(2)})\varphi_0(x_1^{(1)})\varphi_1(x_2^{(1)})) \end{aligned}$$

sono necessariamente in uno stato di tripletto di spin. Non essendo presente un termine di interazione di spin ed essendo tutti gli stati orbitali degeneri, una qualunque combinazione lineare di questi 8 stati è in principio ammissibile.

(1) Se indichiamo con S la somma dei due spin si ha

$$\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 = \frac{S(S+1) - s_1(s_1+1) - s_2(s_2+1)}{2}$$

quindi per un sistema di due spin $1/2$ l'operatore $\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2$ corrisponde alla moltiplicazione per $\hbar/4$ sugli stati del tripletto e per $-3\hbar/4$ sul singoletto.

Quindi lo stato fondamentale non cambia per $k \neq 0$ (e l'energia cambia per un $-\frac{3}{4}\hbar\kappa$), mentre il livello dei primi eccitati si scinde in due livelli distinti corrispondenti alle 6 combinazioni di tripletto di spin (con un cambio di energia di $\frac{\hbar\kappa}{4}$) e alle due combinazioni di singoletto di spin (con un cambio di energia di $-3\frac{\hbar\kappa}{4}$).