

# **Note di Meccanica Quantistica Non Relativistica**

A cura di Alessandro Varsi

17 febbraio 2024

Alessandro Varsi  
varsialessandro@gmail.com  
<https://github.com/alevarsi>

Le seguenti note sono in fase di sviluppo. In particolare:

- Manca quasi tutto il Primo Parziale. Attenzione che anche i capitoli che ci sono NON sono completi. Gli unici davvero completi sono 1) Oscillatore armonico con autostati del momento angolare 2) Particella carica senza spin in campo EM.
- Al capitolo sulla Somma dei Momenti Angolari manca il caso generale, ma non verrà aggiunto mai probabilmente.
- Il capitolo sulla Struttura Fine e Iperfine dell'atomo di idrogeno è in fase di sviluppo. Manca il calcolo esplicito degli effetti dei termini aggiuntivi sullo spettro atomico.
- Manca il capitolo sulla relazione tra simmetrie e leggi di conservazione.
- Il capitolo sulle applicazioni della teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo non è completo. Mancano l'Effetto Zeeman e l'interazione tra onda elettromagnetica e atomo.
- Manca il capitolo sul Prodotto Tensoriale.
- Alla fine ci sono delle appendici che richiamano concetti non propri di un corso di Meccanica Quantistica, che sono nondimeno indispensabili.

#### Commenti sulla notazione

- I vettori verranno indicati con le lettere in grassetto, cioè:  $\vec{A} \equiv \mathbf{A}$ .
- Il prodotto vettoriale sarà indicato con " $\wedge$ " e non con " $\times$ " (se me ne ricordo).
- Le formule racchiuse in un box rosso sono generalmente quelle che, a mio avviso, dovrebbero essere inserite in un ipotetico formulario da portare all'esame scritto.

Per favore, contattatemi alla mail [VARSALESSANDRO@GMAIL.COM](mailto:VARSALESSANDRO@GMAIL.COM) per suggerire consigli e/o segnalare refusi.

# Indice

<b>I</b>	<b>Primo parziale</b>	<b>5</b>
<b>1</b>	<b>Teorema di Ehrenfest e limite classico</b>	<b>6</b>
1.1	Evoluzione temporale di un operatore . . . . .	6
1.2	Limite classico . . . . .	6
<b>2</b>	<b>Oscillatore armonico quantistico</b>	<b>8</b>
2.1	Introduzione . . . . .	8
2.2	Metodo analitico . . . . .	8
<b>3</b>	<b>Particella in un potenziale centrale e atomo idrogenoide</b>	<b>12</b>
3.1	Due particelle mutuamente interagenti . . . . .	12
3.2	Commento sul momento angolare . . . . .	13
<b>4</b>	<b>Una nuova trattazione dell'oscillatore armonico in 2D/3D</b>	<b>15</b>
4.1	Il problema . . . . .	15
4.2	Base $ n_x n_y\rangle$ : un ripasso . . . . .	16
4.3	Autostati del momento angolare $\hat{L}_z$ . . . . .	16
<b>5</b>	<b>Particella carica senza spin in campo elettromagnetico</b>	<b>18</b>
5.1	Considerazioni generali . . . . .	18
5.1.1	Meccanica Classica . . . . .	18
5.1.2	Meccanica quantistica . . . . .	20
5.2	Carica senza spin in campo magnetico: i livelli di Landau . . . . .	20
<b>II</b>	<b>Secondo parziale</b>	<b>24</b>
<b>6</b>	<b>Somma di momenti angolari</b>	<b>25</b>
6.1	Introduzione . . . . .	25
6.2	Somma di 2 momenti angolari . . . . .	26
6.2.1	Spazio degli stati . . . . .	26
6.2.2	Cambio di base . . . . .	26
6.3	Somma di due momenti di spin 1/2 di 2 particelle . . . . .	28
<b>7</b>	<b>Particelle identiche</b>	<b>30</b>
7.1	Introduzione: principio di indistinguibilità . . . . .	30
7.2	Approssimazione di particella indipendente . . . . .	31
7.3	Approssimazione di spin separabile da coordinate . . . . .	33
7.4	Conseguenze e applicazioni . . . . .	35
7.5	Operatori . . . . .	35

<b>8</b>	<b>Teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo</b>	<b>36</b>
8.1	Introduzione del problema . . . . .	36
8.2	Metodo generale . . . . .	37
8.3	Perturbazione sugli stati non degeneri . . . . .	37
8.4	Perturbazione sugli stati degeneri . . . . .	40
<b>9</b>	<b>Applicazioni della teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo</b>	<b>42</b>
9.1	Effetto Stark per l'atomo di idrogeno . . . . .	42
9.1.1	Effetto Stark sullo stato fondamentale $n = 1$ . . . . .	42
9.1.2	Effetto stark sul primo stato eccitato $n = 2$ . . . . .	44
9.2	Effetti delle dimensioni finite del nucleo su un atomo idrogenoide . . . . .	46
9.2.1	Identificazione dell'Hamiltoniana . . . . .	46
9.2.2	Calcolo della correzione al primo ordine . . . . .	47
<b>10</b>	<b>Struttura fine e iperfine dell'atomo di idrogeno</b>	<b>48</b>
10.1	La struttura fine . . . . .	48
10.1.1	Effetti relativistici: il termine cinetico . . . . .	48
10.1.2	Spin dell'elettrone: il termine spin-orbita . . . . .	49
10.1.3	Termine di Darwin . . . . .	50
10.2	La struttura iperfine . . . . .	51
10.2.1	Origine fisica . . . . .	51
10.2.2	Termine di interazione con campo magnetico . . . . .	51
10.2.3	Termine di interazione dipolo-dipolo . . . . .	51
10.2.4	Termine di contatto di Fermi . . . . .	51
<b>11</b>	<b>Teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo</b>	<b>53</b>
11.1	Introduzione del problema . . . . .	53
11.2	Soluzione approssimata dell'equazione di Schrodinger: metodo generale . . . . .	54
11.3	Soluzione al primo ordine . . . . .	55
11.3.1	Probabilità di transizione . . . . .	55
11.4	Soluzione al secondo ordine . . . . .	55
<b>12</b>	<b>Applicazioni della teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo</b>	<b>57</b>
12.1	Perturbazione costante . . . . .	57
12.2	Perturbazione sinusoidale . . . . .	58
12.2.1	Accoppiamento con stati discreti: la risonanza . . . . .	59
12.2.2	Nuova interpretazione della relazione di indeterminazione energia-tempo . . . . .	61
12.2.3	Accoppiamento con stati dello spettro continuo: la regola d'oro di Fermi . . . . .	61
12.3	Commenti sulla correzione al secondo ordine (perturbazione costante) . . . . .	63
<b>III</b>	<b>Appendici</b>	<b>64</b>
<b>A</b>	<b>Dimostrazioni varie</b>	<b>65</b>
A.1	Degenerazione dell'oscillatore armonico isotropo in 3D . . . . .	65
<b>B</b>	<b>Elettromagnetismo</b>	<b>66</b>
B.1	Interazione tra dipolo magnetico e campo magnetico . . . . .	66
B.2	Interazione tra dipolo elettrico e campo elettrico . . . . .	67
B.3	Interazione tra carica e campo elettrico uniforme . . . . .	67
B.4	Moto di una carica in un campo magnetico uniforme . . . . .	67

<b>C</b>	<b>Matematica</b>	<b>69</b>
C.1	Il laplaciano di $1/r$ . . . . .	69
C.2	Parità delle armoniche sferiche - 1 . . . . .	70
C.3	Parità delle armoniche sferiche - 2 . . . . .	71

Parte I

Primo parziale

# Capitolo 1

## Teorema di Ehrenfest e limite classico

### 1.1 Evoluzione temporale di un operatore

Il teorema di Ehrenfest stabilisce che le equazioni del moto per i valori medi di un'osservabile quantistica coincidono con le equazioni del moto classiche della rispettiva grandezza. Per ricavarlo cominciamo a calcolare l'evoluzione temporale di un'osservabile generica  $\hat{A}$ . Definiamo innanzitutto il valore medio dell'osservabile:

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle$$

Calcoliamone l'evoluzione temporale

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \frac{d}{dt} (\langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle) = \langle \psi(t) | \hat{A} \frac{d}{dt} (| \psi(t) \rangle) + \langle \psi(t) | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \psi(t) \rangle$$

Ma, dall'equazione di Schrodinger possiamo ottenere l'evoluzione temporale del vettore di stato e del suo duale:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \hat{H}(t) | \psi(t) \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | &= -\frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | \hat{H}(t) \end{aligned}$$

ricordando che l'Hamiltoniana è un operatore hermitiano. Ora inseriamo nell'evoluzione temporale sopra:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | [\hat{A}(t) \hat{H}(t) - \hat{H}(t) \hat{A}(t)] | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \psi(t) \rangle$$

Quindi finalmente otteniamo il teorema cercato:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle + \langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \rangle$$

**TEOREMA DI EHRENFEST**

Ora utilizziamo questo risultato per studiare il limite classico della meccanica quantistica, e in particolare i casi in cui esso è applicabile.

### 1.2 Limite classico

Ipotizziamo di studiare il moto di una particella senza spin e in un **potenziale stazionario**  $\hat{V}(\hat{\mathbf{x}})$ . In questo caso l'Hamiltoniana

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{\mathbf{x}})$$

**non dipende esplicitamente dal tempo.** Applichiamo il teorema di Ehrenfest a  $\hat{\mathbf{x}}$  e  $\hat{\mathbf{p}}$ :

- $\hat{\mathbf{x}}$

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{x}} \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{\mathbf{x}}, \hat{H}] \rangle + \cancel{\langle \frac{\partial \hat{\mathbf{x}}}{\partial t} \rangle} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{\mathbf{x}}, \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}] \rangle = \frac{1}{2i\hbar m} \langle [\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}^2] \rangle = \\ &= \frac{1}{2mi\hbar} \langle [\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}] \mathbf{p} + \mathbf{p} [\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}] \rangle = \frac{1}{2mi\hbar} \langle i\hbar \hat{\mathbf{p}} + i\hbar \hat{\mathbf{p}} \rangle = \\ &= \frac{1}{m} \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle\end{aligned}$$

- $\hat{\mathbf{p}}$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{\mathbf{p}}, \hat{H}] \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{\mathbf{p}}, \hat{V}(\hat{\mathbf{x}})] \rangle$$

Ricordiamo che  $[\hat{p}_x, f(\hat{x})] = -i\hbar f'(\hat{x})$  e quindi  $[\hat{\mathbf{p}}, f(\hat{\mathbf{x}})] = -i\hbar \nabla f$

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle = -\langle \nabla \hat{V}(\hat{\mathbf{x}}) \rangle}$$

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{x}} \rangle = \frac{1}{m} \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle}$$

Quindi abbiamo confermato la frase all'inizio del capitolo, cioè: *le leggi del moto per i valori d'aspettazione di un'osservabile quantistica coincidono con le leggi del moto classiche per la stessa grandezza fisica.*



## Capitolo 2

# Oscillatore armonico quantistico

### 2.1 Introduzione

Vogliamo risolvere l'equazione di Schrodinger per una particella di massa  $m$  soggetta ad un potenziale armonico:

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Lo studio di questo problema è importantissimo in quanto si tratta della prima approssimazione di moltissimi sistemi in natura. Si parte quindi. L'equazione da risolvere è:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right) \varphi(x) = E\varphi(x)$$

Possiamo già prevedere qualitativamente che lo spettro energetico sarà discreto in quanto il problema presenta due punti di inversione del moto; inoltre, il potenziale è pari quindi le soluzioni avranno parità definita (pari o dispari). Procediamo con la ricerca degli autovalori e delle autofunzioni prima con un metodo analitico, risolvendo l'equazione differenziale, e poi con un metodo algebrico che sfrutta l'analisi funzionale.

### 2.2 Metodo analitico

Come ogni fisico che si rispetti farebbe, liberiamoci delle variabili dimensionate all'interno della nostra equazione differenziale. Notiamo che il termine  $\hbar\omega$  ha dimensioni di un'energia, per cui dividiamo entrambi i membri per la quantità  $\frac{\hbar\omega}{2}$  e introduciamo la variabile  $\mathcal{E} = \frac{2E}{\hbar\omega}$ :

$$\left(-\frac{\hbar}{m\omega} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega}{\hbar} x^2\right) \varphi(x) = \mathcal{E}\varphi(x)$$

Effettuiamo il cambio di variabile

$$y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

$$\frac{d}{dx} = \frac{dy}{dx} \frac{d}{dy} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{d}{dy}$$

In modo tale che l'equazione diventi

$$\frac{d^2\varphi(y)}{dy^2} + (\mathcal{E} - y^2)\varphi(y) = 0 \tag{2.2.1}$$

Ora finalmente è tutto adimensionato e siamo pronti per cominciare la risoluzione dell'equazione differenziale. Utilizziamo un metodo che è utile ricordare per studi futuri, cioè quello di separare la trattazione per  $y$  grandi e per  $y$  piccole.

## Soluzione per $y$ grandi

In questo caso il termine  $\mathcal{E}$  è trascurabile e l'equazione da risolvere diventa

$$\frac{d^2\varphi(y)}{dy^2} - y^2\varphi(y) = 0 \quad (2.2.2)$$

Sappiamo che la soluzione deve essere quadrato integrabile e quindi deve andare a zero abbastanza velocemente. Ipotizziamo che assuma un forma di questo tipo:

$$\varphi(y) = e^{-ay^2}$$

Calcoliamo le derivate necessarie:

$$\varphi'(y) = -2aye^{-ay^2} \quad \varphi''(y) = (-2a + 4a^2y^2)e^{-ay^2}$$

e inseriamo nell'equazione (2.2.2), semplificando la parte esponenziale:

$$-2a + 4a^2y^2 - y^2 = 0$$

che per  $y$  grandi si traduce in  $a = +\frac{1}{2}$ . La soluzione negativa è stata scartata perché altrimenti la soluzione divergerebbe a  $\pm\infty$ . Adesso abbiamo scontato il comportamento della soluzione a  $\pm\infty$ .

## Soluzione per $y$ piccoli

Avendo scontato il comportamento per  $|y| \rightarrow \infty$ , impostiamo

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= e^{-y^2/2}h(y) \\ \varphi'(y) &= -ye^{-y^2/2}h(y) + e^{-y^2/2}h'(y) = e^{-y^2/2}[-yh(y) + h'(y)] \\ \varphi''(y) &= -ye^{-y^2/2}[-yh(y) + h'(y)] + e^{-y^2/2}[-h(y) - yh'(y) + h''(y)] = \\ &= e^{-y^2/2}[y^2h(y) - yh'(y) - h(y) - yh'(y) + h''(y)] = \\ &= e^{-y^2/2}[y^2h(y) - 2yh'(y) - h(y) + h''(y)] \end{aligned}$$

Inserendo nella (2.2.1) si ottiene

$$\begin{aligned} e^{-y^2/2}[y^2h(y) - 2yh'(y) - h(y) + h''(y)] + (\mathcal{E} - y^2)e^{-y^2/2}h(y) &= 0 \\ -2yh'(y) - h(y) + h''(y) + \mathcal{E}h(y) &= 0 \end{aligned}$$

Quindi l'equazione differenziale per  $h(y)$  diventa

$$h''(y) - 2yh'(y) + (\mathcal{E} - 1)h(y) = 0 \quad (2.2.3)$$

Cerchiamo la soluzione in serie di potenze:

$$h(y) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m y^m \quad h'(y) = \sum_{m=0}^{\infty} m a_m y^{m-1} \quad h''(y) = \sum_{m=0}^{\infty} m(m-1) a_m y^{m-2}$$

Inserendo nella (2.2.3)

$$\sum_{m=0}^{\infty} m(m-1)a_m y^{m-2} - 2y \sum_{m=0}^{\infty} m a_m y^{m-1} + (\mathcal{E} - 1) \sum_{m=0}^{\infty} a_m y^m = 0$$

$$\sum_{m=0}^{\infty} m(m-1)a_m y^{m-2} + \sum_{m=0}^{\infty} [(\mathcal{E} - 2m - 1)a_m y^m = 0$$

I coefficienti di  $y^{-1}$  e  $y^{-2}$ , che corrispondono a  $m = 0$  e  $m = 1$  nella prima serie, sono ovviamente nulli. Allora l'equazione può essere riscritta in questo modo:

$$\sum_{m=0}^{\infty} (m+1)(m+2)a_{m+2} y^m + \sum_{m=0}^{\infty} [(\mathcal{E} - 2m - 1)a_m y^m = 0$$

Eguagliando i termini dello stesso ordine si ottiene

$$(m+1)(m+2)a_{m+2} + (\mathcal{E} - 2m - 1)a_m = 0 \quad (2.2.4)$$

Abbiamo ottenuto una relazione di ricorrenza che ci permette di:

- Ottenere tutti i termini pari avendo la condizione iniziale  $a_0$
- Ottenere tutti i termini dispari avendo la condizione iniziale  $a_1$

Per avere più informazioni sulla soluzione, studiamo cosa succede per  $m$  grandi, diciamo per  $m > N$ . In questo caso dalla (2.2.4) si ricava

$$a_{m+2} = \frac{2}{m} a_m$$

Quindi possiamo dividere la serie in due parti, la prima fino a all'ordine  $N - 1$ , che fornirà un polinomio di grado  $N - 1$  che chiamiamo  $P(y)$ , e la seconda da  $N$  a infinito, che segue l'andamento dell'equazione appena ricavata. Cioè (per  $N$  pari):

$$\begin{aligned} h(y) &= P(y) + \sum_{k=N}^{\infty} a_k y^k = \\ &= P(y) + a_N y^N + a_{N+2} y^{N+2} + a_{N+4} y^{N+4} + \dots = \\ &= P(y) + a_N \left[ y^N + \frac{2}{N} y^{N+2} + \frac{2^2}{N(N+2)} y^{N+4} + \dots \right] = \\ &= P(y) + a_N \left[ y^N + \frac{1}{\frac{N}{2}} y^{N+2} + \frac{1}{\frac{N}{2}(\frac{N}{2}+1)} y^{N+4} + \dots \right] = \\ &= P(y) + a_N \left( \frac{N}{2} - 1 \right)! \left[ \frac{1}{(\frac{N}{2} - 1)!} y^N + \frac{1}{(\frac{N}{2})!} y^{N+2} + \frac{1}{(\frac{N}{2} + 1)!} y^{N+4} + \dots \right] = \\ &= P(y) + a_N y^2 \left( \frac{N}{2} - 1 \right)! \left[ \frac{1}{(\frac{N}{2} - 1)!} (y^2)^{\frac{N}{2}-1} + \frac{1}{(\frac{N}{2})!} (y^2)^{\frac{N}{2}} + \frac{1}{(\frac{N}{2} + 1)!} (y^2)^{\frac{N}{2}+1} + \dots \right] \end{aligned}$$

E lo stesso per i termini dispari. Dentro la parentesi quadra si è formata la serie esponenziale! Quindi

$$h(y) = P(y) + cost \times y^2 e^{y^2}$$

In questo caso, però, la funzione  $\varphi(y)$  andrebbe come  $e^{y^2/2}$  e quindi non sarebbe fisicamente accettabile, dato che diverge. L'unico modo per evitare questo comportamento è che a un certo punto la somma si fermi, cioè deve esistere un indice  $n$  tale per cui il termine  $a_{n+2}$  si annulli, quindi dalla (2.2.4) si ottiene:

$$\mathcal{E} = 2n + 1 \quad \implies \quad E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

E' importante fare due commenti:

1. **L'energia di un oscillatore armonico è quantizzata**
2. **L'energia minima è diversa da zero**, come previsto dal principio di indeterminazione. L'energia di punto zero è

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega$$

Con il vincolo trovato sopra, l'equazione per  $h(y)$  (2.2.3) diventa l'equazione caratteristica di Hermite:

$$\frac{d^2 h}{dy^2} - 2y \frac{dh}{dy} + 2nh = 0$$

che ha come soluzione i **Polinomi di Hermite**  $H_n(y)$ , che hanno parità definita, come previsto (in particolare la parità è  $(-1)^n$ ).

## Capitolo 3

# Particella in un potenziale centrale e atomo idrogenoide

### 3.1 Due particelle mutuamente interagenti

Studiamo il moto di due particelle che interagiscono con un potenziale  $V(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)$ . A breve risulterà chiaro come mai questa trattazione si inserisce nel capitolo sul moto in un campo centrale.

## MECCANICA CLASSICA

La lagrangiana di un sistema di questo tipo è

$$\mathcal{L}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dot{\mathbf{r}}_1, \dot{\mathbf{r}}_2) = \frac{1}{2}m_1\dot{\mathbf{r}}_1^2 + \frac{1}{2}m_2\dot{\mathbf{r}}_2^2 - V(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)$$

E i momenti coniugati necessari per scrivere l'Hamiltoniana sono

$$\begin{aligned}\mathbf{p}_1 &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{r}}_1} = m_1 \dot{\mathbf{r}}_1 \\ \mathbf{p}_2 &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{r}}_2} = m_2 \dot{\mathbf{r}}_2\end{aligned}$$

Un metodo furbo per studiare il moto è quello di effettuare il seguente cambio di coordinate:

$$\begin{cases} \mathbf{r}_{CM} = \frac{1}{M}(m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2) \\ \mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1 \end{cases} \quad \text{con} \quad M = m_1 + m_2 \quad (3.1.1)$$

Il nostro obiettivo ora è quello di scrivere la Lagrangiana in termini delle nuove coordinate  $\mathcal{L} = \mathcal{L}(\mathbf{r}_{CM}, \mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}_{CM}, \dot{\mathbf{r}})$ . Grazie al teorema di König sappiamo che l'energia cinetica totale è esprimibile come somma di quella del centro di massa  $K_{CM}$  e quella delle due particelle *rispetto al centro di massa*  $K'$  (N.B: non c'è bisogno, in realtà, di passare in questo sistema di riferimento e usare il teorema di König, ma farlo semplifica leggermente i calcoli. L'alternativa è quella di invertire il sistema per ricavare  $\mathbf{r}_1$  e  $\mathbf{r}_2$  e poi inserire direttamente nella Lagrangiana).

$$K = K_{CM} + K' = \frac{1}{2}M\dot{\mathbf{r}}_{CM}^2 + \frac{1}{2}m_1\dot{\mathbf{r}}_1'^2 + \frac{1}{2}m_2\dot{\mathbf{r}}_2'^2$$

Dove le coordinate primarie sono quelle relative al centro di massa. Vale ovviamente

$$\begin{cases} m_1\mathbf{r}'_1 + m_2\mathbf{r}'_2 = 0 \\ \mathbf{r} = \mathbf{r}'_2 - \mathbf{r}'_1 \end{cases}$$

da cui si ricava, dopo qualche passaggio banale,

$$\begin{cases} \mathbf{r}'_1 = -\frac{m_2}{m_1 + m_2} \mathbf{r} \\ \mathbf{r}'_2 = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \mathbf{r} \end{cases}$$

Inserendo nell'espressione dell'energia cinetica si ottiene

$$\begin{aligned} K' &= \frac{1}{2} m_1 \frac{m_2^2}{(m_1 + m_2)^2} \dot{\mathbf{r}}^2 + \frac{1}{2} m_2 \frac{m_1^2}{(m_1 + m_2)^2} \dot{\mathbf{r}}^2 = \frac{1}{2} \frac{m_1 m_2^2 + m_2 m_1^2}{(m_1 + m_2)^2} \dot{\mathbf{r}}^2 = \\ &= \frac{1}{2} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \frac{\cancel{m_1 + m_2}}{\cancel{m_1 + m_2}} \dot{\mathbf{r}}^2 = \frac{1}{2} \mu \dot{\mathbf{r}}^2 \end{aligned}$$

Avendo inserito la **massa ridotta**  $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ . Allora la Lagrangiana con le nuove coordinate diventa

$$\mathcal{L}(\mathbf{r}_{CM}, \mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}_{CM}, \dot{\mathbf{r}}) = \frac{1}{2} M \dot{\mathbf{r}}_{CM}^2 + \frac{1}{2} \mu \dot{\mathbf{r}}^2 - V(\mathbf{r})$$

A questo punto si cercano i momenti coniugati per scrivere l'Hamiltoniana

$$\begin{cases} \mathbf{p}_{CM} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{r}}_{CM}} = M \dot{\mathbf{r}}_{CM} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 \\ \mathbf{P} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{r}}} = \mu \dot{\mathbf{r}} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \left( \frac{\mathbf{p}_2}{m_2} - \frac{\mathbf{p}_1}{m_1} \right) = \frac{1}{M} (m_1 \mathbf{p}_2 - m_2 \mathbf{p}_1) \end{cases} \quad (3.1.2)$$

E quindi finalmente l'Hamiltoniana è

$$\boxed{H = \frac{\mathbf{p}_{CM}^2}{2M} + \frac{\mathbf{P}^2}{2\mu} + V(\mathbf{r})} \quad (3.1.3)$$

## 3.2 Commento sul momento angolare

Supponiamo di lavorare con particelle senza spin, quindi in cui l'unico momento angolare è di natura orbitale. Allora il momento angolare totale del sistema è

$$\mathbf{J} = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2 = \mathbf{r}_1 \wedge \mathbf{p}_1 + \mathbf{r}_2 \wedge \mathbf{p}_2$$

Mostriamo che si può anche scrivere

$$\mathbf{J} = \mathbf{L}_{CM} + \mathbf{L}_r$$

con  $\mathbf{L}_{CM} = \mathbf{r}_{CM} \wedge \mathbf{p}_{CM}$  e  $\mathbf{L}_r = \mathbf{r} \wedge \mathbf{P}$ . Vediamo di dimostrarlo, usando le relazioni (3.1.2):

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_{CM} + \mathbf{L}_r &= \mathbf{r}_{CM} \wedge \mathbf{p}_{CM} + \mathbf{r} \wedge \mathbf{P} = \\ &= \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{M} \wedge (\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2) + (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \wedge \frac{1}{M} (m_1 \mathbf{p}_2 - m_2 \mathbf{p}_1) = \\ &= \frac{m_1}{M} \mathbf{r}_1 \wedge \mathbf{p}_1 + \frac{m_1}{M} \mathbf{r}_1 \wedge \mathbf{p}_2 + \frac{m_2}{M} \mathbf{r}_2 \wedge \mathbf{p}_1 + \frac{m_2}{M} \mathbf{r}_2 \wedge \mathbf{p}_2 + \\ &\quad + \frac{m_1}{M} \mathbf{r}_2 \wedge \mathbf{p}_2 - \frac{m_2}{M} \mathbf{r}_2 \wedge \mathbf{p}_1 - \frac{m_1}{M} \mathbf{r}_1 \wedge \mathbf{p}_2 + \frac{m_2}{M} \mathbf{r}_1 \wedge \mathbf{p}_1 = \\ &= \mathbf{r}_1 \wedge \mathbf{p}_1 + \mathbf{r}_2 \wedge \mathbf{p}_2 \end{aligned}$$

Come volevasi dimostrare. In Meccanica Quantistica, però, queste osservabili vengono promosse a operatori, e cosa succede?

1.  $\hat{\mathbf{L}}_{CM}$  e  $\hat{\mathbf{L}}_r$  soddisfano le relazioni di commutazione dei momenti angolari, per cui sono in effetti i momenti angolari delle particelle fittizie.
2.  $[\hat{\mathbf{L}}_{CM}, \hat{\mathbf{L}}_r] = 0$  per ogni componente.

## Capitolo 4

# Una nuova trattazione dell'oscillatore armonico in 2D/3D

### 4.1 Il problema

Vogliamo studiare un sistema tridimensionale in cui una particella di massa  $\mu$  è soggetta ad un potenziale armonico isotropo nel piano  $xy$ , cioè:

$$V(x, y) = \frac{1}{2}\mu\omega^2(x^2 + y^2)$$

L'Hamiltoniana completa è

$$\hat{H} = \hat{H}_{xy} + \hat{H}_z$$

con

$$\hat{H}_{xy} = \frac{1}{2\mu} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2) + \frac{1}{2}\mu\omega^2(\hat{x}^2 + \hat{y}^2)$$

$$\hat{H}_z = \frac{\hat{p}_z^2}{2\mu}$$

Dobbiamo risolvere l'equazione agli autovalori  $\hat{H}|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$ . L'equazione è separabile quindi, come al solito, si spezza in due equazioni:

$$\begin{cases} \hat{H}_{xy}|\varphi_{xy}\rangle = E_{xy}|\varphi_{xy}\rangle \\ \hat{H}_z|\varphi_z\rangle = E_z|\varphi_z\rangle \end{cases}$$

Da queste si ottiene la soluzione finale:  $|\varphi\rangle = |\varphi_{xy}\rangle \otimes |\varphi_z\rangle$  con la relativa energia  $E = E_{xy} + E_z$ .

Cominciamo con il risolvere  $\hat{H}_z$ , la cui soluzione è ovviamente quella di una particella libera

$$\langle z|\varphi_z\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip_z z/\hbar} \quad E_z = \frac{p_z^2}{2\mu} \quad (4.1.1)$$

Inoltre, il sistema presenta **invarianza per rotazioni attorno all'asse z**, quindi  $\hat{L}_z$  è costante del moto. Si noti che  $[\hat{L}_z, \hat{H}_{xy}] = 0$ .

Ora occupiamoci di trovare gli autostati di  $\hat{H}_{xy}$ . Per farlo ci sono due strade (2 basi diverse); la prima consiste nell'utilizzare la base  $|n_x n_y\rangle$  comune a  $\hat{H}_x$  e  $\hat{H}_y$ , mentre la seconda consiste nel coinvolgere  $\hat{L}_z$ .



## 4.2 Base $|n_x n_y\rangle$ : un ripasso

Conosciamo già la soluzione:

$$|\varphi_{xy}\rangle = |\varphi_x\rangle \otimes |\varphi_y\rangle \quad E_{xy} = (n_x + n_y + 1)\hbar\omega$$

Gli stati non sono degeneri, la coppia  $\{n_x, n_y\}$  ne identifica uno in modo univoco, quindi  $\{\hat{H}_x, \hat{H}_y\}$  rappresentano un C.S.C.O. in 2D. Però c'è anche  $\hat{H}_z$ , che crea una degenerazione nella soluzione finale, infatti all'energia  $E_z$  corrispondono due stati diversi dato che dipende dal quadrato di  $p_z$ , uno con  $+|p_z|$  e l'altro con  $-|p_z|$ . Allora in 3D il set completo è

$$\boxed{\{\hat{p}_z, \hat{H}_x, \hat{H}_y\}}$$

C'è invarianza per traslazione lungo l'asse  $z$ , infatti  $[\hat{p}_z, \hat{H}] = 0$ . Gli stati si costruiscono nel seguente modo:

$$|n_x n_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_x!}} \frac{1}{\sqrt{n_y!}} (a_x^\dagger)^{n_x} (a_y^\dagger)^{n_y} |00\rangle$$

Ricordiamo che  $[a, a^\dagger] = 1$ .

## 4.3 Autostati del momento angolare $\hat{L}_z$

Notiamo innanzitutto che  $\hat{L}_z$  ha nella sua espressione solo la derivata rispetto all'angolo  $\varphi$ , mentre il potenziale conosce solo  $\vartheta$ , quindi il momento angolare commuta con l'Hamiltoniana:

$$L_z \div \frac{d}{d\varphi} \quad V \div x^2 + y^2 = r^2 \sin^2 \vartheta \quad \Rightarrow \quad [\hat{L}_z, \hat{H}_{xy}] = 0$$

Ricordiamo che l'Hamiltoniana di un oscillatore armonico può essere scritta nel seguente modo

$$\hat{H}_{xy} = (a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y + 1)\hbar\omega$$

e cerchiamo di riscrivere il momento angolare utilizzando gli operatori di innalzamento e di distruzione, ricordando che

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}} (a^\dagger + a) \quad \text{e} \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{\mu\hbar\omega}{2}} (a^\dagger - a)$$

Via al calcolo

$$\begin{aligned} \hat{L}_z &= \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = \frac{i\hbar}{2} (a_x^\dagger a_y^\dagger - a_x^\dagger a_y + a_x a_y^\dagger - a_x a_y) - \frac{i\hbar}{2} (a_y^\dagger a_x^\dagger - a_y^\dagger a_x + a_y a_x^\dagger - a_y a_x) = \\ &= \frac{i\hbar}{2} (-a_x^\dagger a_y + a_x a_y^\dagger + a_y^\dagger a_x - a_y a_x^\dagger) \end{aligned}$$

da cui

$$\boxed{\hat{L}_z = i\hbar(a_x a_y^\dagger - a_x^\dagger a_y)}$$

Scrivendo il momento angolare in questo modo è facile verificare che commuta con  $\hat{H}_{xy}$  ricordando che  $[a, a^\dagger] = 1$ :

$$\bullet [a_x a_y^\dagger, a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y] = 0$$

- $[a_x^\dagger a_y, a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y] = 0$

E quindi **esiste una base comune all'Hamiltoniana e al momento angolare**. Introduciamo due nuovi operatori:

$$\hat{a}_d = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x - ia_y) \quad \text{QUANTO DI MOMENTO CIRCOLARE DESTRO}$$

$$\hat{a}_g = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x + ia_y) \quad \text{QUANTO DI MOMENTO CIRCOLARE SINISTRO}$$

Si noti che  $[a_d, a_d^\dagger] = 1$  e  $[a_g, a_g^\dagger] = 1$ , cioè questi operatori hanno le stesse regole di commutazione di quelli di innalzamento e abbassamento e quindi la loro trattazione in termini di autostati e autovalori è uguale. Ora seguirà una serie di calcoli che ci permetterà di scrivere l'hamiltoniana e il momento angolare in un modo diverso che evidenzia la loro base comune.

$$\begin{aligned} a_d^\dagger a_d &= \frac{1}{2}(a_x^\dagger + ia_y^\dagger)(a_x - ia_y) = \\ &= \frac{1}{2}(a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y - ia_x^\dagger a_y + ia_x a_y^\dagger) \\ a_g^\dagger a_g &= \frac{1}{2}(a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y + ia_x^\dagger a_y - ia_x a_y^\dagger) \end{aligned}$$

Da cui segue

$$\begin{aligned} \hat{H}_{xy} &= (a_d^\dagger a_d + a_g^\dagger a_g + 1)\hbar\omega \\ \hat{L}_z &= \hbar(a_d^\dagger a_d - a_g^\dagger a_g) \end{aligned}$$

e finalmente

$$\hat{H}_{xy} = (\hat{N}_d + \hat{N}_g + 1)\hbar\omega$$

$$\hat{L}_z = (\hat{N}_d - \hat{N}_g)\hbar$$

Come già accennato sopra, per gli operatori  $\hat{N}_d$  e  $\hat{N}_g$  vale la stessa teoria dell'operato numero introdotto nell'oscillatore armonico 1D, quindi:

$$|n_d n_g\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_d!}} \frac{1}{\sqrt{n_g!}} (a_d^\dagger)^{n_d} (a_g^\dagger)^{n_g} |00\rangle$$

sono autostati (N.B. lo stato  $|00\rangle$  non è lo stesso corrispondente a  $n_x = 0, n_y = 0$ ):

$$\begin{aligned} \hat{H}_{xy} |n_d n_g\rangle &= (n+1)\hbar\omega |n_d n_g\rangle & \text{con} & \quad n = n_d + n_g \\ \hat{L}_z |n_d n_g\rangle &= \hbar m |n_d n_g\rangle & \text{con} & \quad m = n_d - n_g \end{aligned}$$

## Capitolo 5

# Particella carica senza spin in campo elettromagnetico

### 5.1 Considerazioni generali

#### 5.1.1 Meccanica Classica

In meccanica classica l'equazione del moto per una particella di massa  $m$  e carica  $q$  con velocità  $\mathbf{v}$  immersa in un campo elettromagnetico  $\mathbf{E}, \mathbf{B}$  è

$$m\ddot{\mathbf{x}} = q\mathbf{E} + q\mathbf{v} \wedge \mathbf{B}$$

Per trattare la risoluzione di questo problema generalmente si barattano i campi elettrico e magnetico con i relativi potenziali:  $\mathbf{E}, \mathbf{B} \mapsto U(\mathbf{x}, t), \mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$  che sono legati ai campi tramite le seguenti relazioni

$$\begin{cases} \mathbf{E} = -\nabla U - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \\ \mathbf{B} = \nabla \wedge \mathbf{A} \end{cases} \quad \Longrightarrow \quad \begin{cases} E_i = -\partial_i U - \frac{\partial A_i}{\partial t} \\ B_i = \varepsilon_{ijk} \partial_j A_k \end{cases} \quad (5.1.1)$$

#### Invarianza di gauge

Senza cambiare l'equazione del moto e **SODDISFACENDO LE EQUAZIONI DI MAXWELL** è possibile **CAMBIARE I POTENZIALI LASCIANDO INVARIATI I CAMPI**. Le trasformazioni per cui questo è vero si chiamano **TRASFORMAZIONI DI GAUGE** e sono:

$$\begin{cases} U(\mathbf{x}, t) \mapsto U(\mathbf{x}, t) - \frac{\partial \lambda}{\partial t}(\mathbf{x}, t) \\ \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \mapsto \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) + \nabla \lambda(\mathbf{x}, t) \end{cases} \quad \text{con } \lambda(\mathbf{x}, t) \text{ funzione arbitraria} \quad (5.1.2)$$

L'Hamiltoniana della particella è

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2m} [\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)]^2 + qU(\mathbf{x}, t) \quad (5.1.3)$$

VERIFICA che da questa Hamiltoniana si ottengano davvero le equazioni del moto

$$\begin{aligned}\frac{dx_i}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{1}{m}(p_i - qA_i) \equiv v_i \\ \frac{dp_i}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial x_i} = -\frac{1}{m}(p_j - qA_j) \left( -q \frac{\partial A_j}{\partial x_i} \right) - q \frac{\partial U}{\partial x_i} = qv_j \partial_i A_j - q \partial_i U\end{aligned}$$

Quindi

$$\begin{aligned}m \frac{d^2 x_i}{dt^2} &= \frac{dp_i}{dt} - q \frac{dA_i}{dt} = qv_j \partial_i A_j - q \partial_i U - q \left( \frac{\partial A_i}{\partial t} + \frac{\partial A_i}{\partial x_j} \frac{dx_j}{dt} \right) = \\ &= q \left( -\partial_i U - \frac{\partial A_i}{\partial t} \right) + qv_j (\partial_i A_j - \partial_j A_i) = \\ &= qE_i + q(\mathbf{v} \wedge \mathbf{B})_i\end{aligned}$$

Infatti

$$(\mathbf{v} \wedge \mathbf{B})_i = \varepsilon_{ijk} v_j B_k = \varepsilon_{ijk} v_j (\nabla \wedge \mathbf{A})_k = \varepsilon_{ijk} v_j (\varepsilon_{kls} \partial_l A_s) = \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{kls} v_j \partial_l A_s$$

Eseguendo due permutazioni sugli indici del primo simbolo di Levi-Civita e ricordando che

$$\varepsilon_{kij} \varepsilon_{kls} = \begin{vmatrix} \delta_i^l & \delta_j^l \\ \delta_i^s & \delta_j^s \end{vmatrix} = \delta_i^l \delta_j^s - \delta_i^s \delta_j^l$$

Si ottiene

$$(\mathbf{v} \wedge \mathbf{B})_i = (\delta_i^l \delta_j^s - \delta_i^s \delta_j^l) v_j \partial_l A_s = v_j (\partial_i A_j - \partial_j A_i) \quad \text{QED}$$

Continuiamo con qualche considerazione sull'invarianza di gauge. Abbiamo visto che la velocità della particella è

$$\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{1}{m} [\mathbf{p} - q\mathbf{A}] \quad \text{da cui} \quad \boxed{\mathbf{p} = m\mathbf{v} + q\mathbf{A}} \quad \text{MOMENTO CONIUGATO}$$

Infatti, dalla equazione (5.1.3) si vede che l'Hamiltoniana è nella forma

$$H = \frac{1}{2}mv^2 + qU \quad \text{cioè} \quad H = E_k + E_p$$

Quindi continua ad avere il significato di energia totale, però il momento coniugato è  $\mathbf{p} \neq m\mathbf{v}$ . Alla quantità  $m\mathbf{v}$  si dà il nome di **momento cinematico**. Questo non è quello della meccanica quantistica che rispetta la regola di commutazione  $[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$ , che invece è il momento coniugato definito sopra.

Si vede allora che

- $\mathbf{p} = m\mathbf{v} + q\mathbf{A}$  è gauge-dependent
- $H$  è gauge-dependent
- $\mathbf{v}$  è gauge-independent (a causa del suo significato fisico)

Si dimostra che in meccanica quantistica tutte le quantità fisiche sono gauge-independent.

### 5.1.2 Meccanica quantistica

In questo caso promuoviamo le osservabili a operatori:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} [\hat{\mathbf{p}} - q\hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{x}}, t)]^2 + \hat{V}(\hat{x}, t)$$

Nella rappresentazione delle coordinate

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} [-i\hbar\nabla - q\hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{x}}, t)]^2 + \hat{V}(\hat{x}, t)$$

E già qui cominciano le prime differenze con la meccanica classica, infatti

$$[\hat{\mathbf{p}} - q\hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{x}}, t)]^2 = (\hat{\mathbf{p}} - q\hat{\mathbf{A}}) \cdot (\hat{\mathbf{p}} - q\hat{\mathbf{A}}) = \hat{\mathbf{p}}^2 - q(\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{A}} + \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) + q^2 \hat{\mathbf{A}}^2$$

dato che  $\hat{\mathbf{p}}$  ed  $\hat{\mathbf{A}}$  non commutano. Procediamo studiando il comportamento dell'operatore tra parentesi su un generico stato, utilizzando la rappresentazione nello spazio delle coordinate:

$$\begin{aligned} \boxed{(-i\hbar\nabla \cdot \mathbf{A} - i\hbar\mathbf{A} \cdot \nabla) \psi(\mathbf{x}, t)} &= -i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial x_i} A_i + A_i \frac{\partial}{\partial x_i} \right) \psi(\mathbf{x}, t) = \\ &= -i\hbar \left( \psi \frac{\partial A_i}{\partial x_i} + A_i \frac{\partial \psi}{\partial x_i} + A_i \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \right) = \\ &= -i\hbar \left[ \left( \frac{\partial A_i}{\partial x_i} \right) + 2A_i \frac{\partial}{\partial x_i} \right] \psi(\mathbf{x}, t) = \\ &\boxed{= -i\hbar(\text{div}\hat{\mathbf{A}})\psi + 2\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}} \psi} \end{aligned}$$

#### Invarianza di gauge

- $\hat{H}$  è gauge-dependent
- $|\psi\rangle$  è gauge-dependent
- $\hat{\mathbf{p}}$  è gauge-dependent

**N.B.**  $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \wedge \hat{\mathbf{p}} \neq \hat{\mathbf{r}} \wedge m\hat{\mathbf{v}}$ ; anche **il momento angolare è gauge-dependent**. Ciononostante, le quantità fisiche finali non dipendono dal gauge.

## 5.2 Carica senza spin in campo magnetico: i livelli di Landau

In questa sezione trattiamo il caso particolare di una carica senza spin immersa in un campo magnetico uniforme, che immaginiamo diretto lungo l'asse  $z$ . Sia quindi  $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{u}}_z$ . La trattazione che utilizza la meccanica classica si trova nell'appendice (B.4), quindi cominciamo con la trattazione quantistica.

Ci troviamo in assenza di campo elettrico, per cui il potenziale scalare è nullo. L'Hamiltoniana della particella è quindi

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} - q\hat{\mathbf{A}})^2 = \frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}}^2 + i\hbar q\nabla \cdot \hat{\mathbf{A}} - 2q\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}} + q^2 \hat{\mathbf{A}}^2) \quad (5.2.1)$$

Tra gli infiniti possibili, noi utilizzeremo 2 gauge diversi per risolvere il problema.

## GAUGE 1

Il primo consiste nello scegliere il potenziale vettore in questo modo:

$$\boxed{\mathbf{A}(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}\mathbf{x} \wedge \mathbf{B}} \quad \Rightarrow \quad A_i = -\frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}x_j B_k$$

Prima di procedere allo studio del moto verifichiamo le seguenti cose:

a) Questo potenziale in effetti genera il campo magnetico, cioè  $\mathbf{B} = \nabla \wedge \mathbf{A}$

$$\begin{aligned} (\nabla \wedge \mathbf{A})_l &= \varepsilon_{lrs}\partial_r A_s = -\frac{1}{2}\varepsilon_{sjk}\varepsilon_{lrs}\partial_r x_j B_k = & (\partial_r x_j = \delta_{rj}) \\ &= -\frac{1}{2}\varepsilon_{sjk}\varepsilon_{ljs}B_k = +\frac{1}{2}\varepsilon_{sjk}\varepsilon_{sjl}B_k & (\varepsilon_{sjk}\varepsilon_{sjl} = 2\delta_{kl}) \\ &= \delta_{kl}B_k = B_l & QED \end{aligned}$$

b)  $\boxed{\text{div}\mathbf{A} = 0}$  infatti

$$\text{div}\mathbf{A} = \partial_i A_i = -\frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}\partial_i x_j B_k = -\frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}\delta_{ij}B_k = 0$$

Dato che stiamo contraendo un oggetto antisimmetrico sotto lo scambio tra due indici con un oggetto simmetrico sotto lo scambio degli stessi indici. QED

Ora possiamo occuparci di riscrivere l'Hamiltoniana. Partendo dalla (5.2.1) riscriviamo separatamente i vari pezzi.

$$\begin{aligned} \boxed{-\frac{q}{m}\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}} &= -\frac{q}{m}\left(-\frac{1}{2}\mathbf{x} \wedge \mathbf{B}\right) \cdot \mathbf{p} = \frac{q}{2m}\varepsilon_{ijk}x_j B_k p_i = \frac{q}{2m}B_k(-\varepsilon_{kji})x_j p_i = \\ &= -\frac{q}{2m}\mathbf{B} \cdot (\mathbf{x} \wedge \mathbf{p}) = \boxed{-\frac{q}{2m}\mathbf{B} \cdot \mathbf{L}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \boxed{\frac{1}{2m}q^2\mathbf{A}^2} &= \frac{q^2}{2m}A_i A^i = \frac{q^2}{2m}\left(-\frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}x_j B_k\right)\left(-\frac{1}{2}\varepsilon_{ils}x_l B_s\right) = \\ &= \frac{q^2}{8m}(\delta_j^l \delta_k^s - \delta_k^l \delta_j^s)x_j x_k B_k B_s = \boxed{\frac{q^2}{8m}[\mathbf{x}^2 \mathbf{B}^2 - (\mathbf{x} \cdot \mathbf{B})^2]} \end{aligned}$$

Finalmente l'Hamiltoniana **con questa scelta di gauge** diventa

$$\boxed{\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{q}{2m}\mathbf{B} \cdot \mathbf{L} + \frac{q^2}{8m}[\hat{\mathbf{x}}^2 \mathbf{B}^2 - (\hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{B})^2]}$$

Nel nostro caso, dato che  $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{u}}_z$  l'ultimo termine si semplifica a diventare

$$\hat{\mathbf{x}}^2 \mathbf{B}^2 - (\hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{B})^2 = (x^2 + y^2 + z^2)B^2 - z^2 B^2 = (x^2 + y^2)B^2$$

L'Hamiltoniana può essere scomposta in due componenti, una che si interessa del moto lungo l'asse  $z$ , quello parallelo al campo magnetico e una che si interessa del moto nel piano  $xy$ , perpendicolare al campo magnetico

$$\hat{H} = \hat{H}_{//} + \hat{H}_{\perp}$$

con

$$\hat{H}_{//} = \frac{\hat{p}_z^2}{2m}$$

$$\hat{H}_{\perp} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2) + \frac{\omega}{2}\hat{L}_z + \frac{1}{2}m\left(\frac{\omega}{2}\right)^2(\hat{x}^2 + \hat{y}^2)$$

avendo definito  $\omega = -\frac{qB}{m}$ . Dato che  $[\hat{H}_{//}, \hat{H}_{\perp}] = 0$  allora esiste una base comune di autostati. Cerchiamoli separatamente.

- $H_{//}$ : la soluzione è un'onda piana

$$\varphi(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip_z z/\hbar} \quad \text{con} \quad E_{//} = \frac{p_z^2}{2m}$$

- $H_{\perp}$ : si tratta dell'Hamiltoniana di un oscillatore armonico 2D con l'aggiunta di  $+\frac{\omega}{2}\hat{L}_z$ . Si noti che  $[\hat{H}_{\perp}, \hat{L}_z] = 0$ , infatti abbiamo già trovato gli autostati comuni a questi due operatori quando abbiamo trattato l'oscillatore armonico con gli operatori di momento circolare. In quel caso abbiamo utilizzato questa notazione:

$$\hat{H}_{\perp} = \hat{H}_{xy} + \frac{\omega}{2}\hat{L}_z$$

N.B. qua la frequenza è  $\omega/2$ . Quindi, utilizzando i risultati già ottenuti, gli autovalori sono

$$E_{xy} = (n_d + n_g + 1)\hbar\frac{\omega}{2}$$

$$L_z = (n_d - n_g)\hbar$$

$$E_{\perp} = E_{xy} + \frac{\omega}{2}$$

$$L_z = (n_d + n_g + 1)\hbar\frac{\omega}{2} + (n_d - n_g)\hbar\frac{\omega}{2}$$

$$\Rightarrow E_{\perp} = \left(n_d + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad \text{LIVELLI DI LANDAU}$$

In due dimensioni, quando gli elettroni si muovono in un campo magnetico seguono classicamente delle orbite circolari, ma se il sistema è trattato da un punto di vista della meccanica quantistica gli orbitali sono quantizzati. I livelli energetici di questi orbitali sono detti **livelli di Landau**.

Si noti che il set completo di osservabili è dato da  $|n_d n_g\rangle$  quindi questi livelli sono **degeneri**.

$$\text{L'energia totale è quindi } E = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \frac{p_z^2}{2m}$$

## GAUGE 2

Questo gauge consiste nello scegliere il potenziale vettore in questo modo:

$$\begin{cases} A_x = -By \\ A_y = A_z = 0 \end{cases}$$

a)

$$\nabla \wedge \mathbf{A} = \begin{vmatrix} \hat{u}_x & \hat{u}_y & \hat{u}_z \\ \partial_x & \partial_y & \partial_z \\ -By & 0 & 0 \end{vmatrix} = B\hat{u}_y = \mathbf{B}$$

b)  $\text{div} \mathbf{A} = 0$  ovvio.

Con questa scelta di gauge  $\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x + qB\hat{y})^2 + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m}$  Dato che  $\hat{H}$  **non dipende da  $x$  e  $z$**  significa che commuta con  $\hat{p}_x$  e con  $\hat{p}_z$ . Quindi possiamo trovare una base comune a  $\{\hat{H}, \hat{p}_x, \hat{p}_z\}$  Sappiamo che per gli ultimi due operatori la base comune è l'onda piana, quindi

$$\varphi(x, y, z) = \frac{1}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_z z)} \chi(y)$$

Sembra un problema completamente diverso da quello affrontato sopra con l'altro gauge, ma ricordiamo che avevamo notato che sia l'Hamiltoniana che la funzione d'onda sono gauge-dependent. Ora cerchiamo di capire se l'energia, cioè l'osservabile fisica, è gauge-independent come ci aspettiamo.

Ricordiamo che  $mv_i = p_i - qA_i$  quindi

- Dato che  $A_z = 0 \Rightarrow p_z = mv_z$  quindi lungo l'asse  $z$  MOMENTO CONIUGATO  $\equiv$  MOMENTO CINEMATICO. Inoltre,  $p_z$  costante del moto  $\Rightarrow v_z$  COSTANTE.
- $mv_x = p_x + qBy$ , ma  $p_x$  costante del moto  $\Rightarrow (mv_x - qBy)$  è costante, e dividendo per  $(-qB)$  si ottiene

$$y - \frac{mv_x}{qB} = \text{cost} \equiv y_0$$

è la coordinata  $y$  del centro della circonferenza! (si veda l'appendice).

Ora cerchiamo finalmente le energie risolvendo l'equazione di Schrödinger  $\hat{H}\varphi = E\varphi$  e semplificando già gli esponenziali viene

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m}(p_x + qBy)^2 \chi(y) - \frac{\hbar^2}{2m} \chi''(y) + \frac{p_z^2}{2m} \chi(y) &= E \chi(y) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \chi''(y) + \frac{1}{2} m \omega^2 \left( y - \frac{p_x}{m\omega} \right) \chi(y) &= \left( E - \frac{p_z^2}{2m} \right) \chi(y) \end{aligned}$$

Che è l'equazione di Schrödinger per un **oscillatore armonico traslato** di  $(-\frac{p_x}{m\omega})$ . Per farlo vedere meglio effettuiamo il seguente cambio di coordinate:

$$\xi = y - \frac{p_x}{m\omega} \quad \text{che implica} \quad \frac{\partial}{\partial \xi} = \frac{\partial}{\partial y}$$

In questo modo l'equazione diventa

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \chi}{d\xi^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 \xi^2 \chi = \left( E - \frac{p_z^2}{2m} \right) \chi$$

E sappiamo benissimo che la soluzione porta a

$$E - \frac{p_z^2}{2m} = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad \Rightarrow \quad E = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega + \frac{p_z^2}{2m}$$

che coincide con il risultato trovato sopra.



Parte II

Secondo parziale

## Capitolo 6

# Somma di momenti angolari

### 6.1 Introduzione

In questa sezione ci occupiamo di capire come calcolare il momento angolare totale di una particella con momento angolare orbitale e spin oppure di un sistema di particelle ognuna con il proprio momento angolare. Cominciamo con il richiamare cosa succede in meccanica classica.

#### MECCANICA CLASSICA

Consideriamo un sistema di  $N$  particelle classiche. Il momento angolare totale del sistema rispetto ad un punto fisso  $O$  è la somma vettoriale dei singoli momenti delle particelle rispetto ad  $O$ :

$$\mathbf{L} = \sum_n^N \mathbf{L}_n = \sum_n^N \mathbf{r}_n \wedge \mathbf{p}_n$$

La derivata rispetto al tempo di  $\mathbf{L}$  è il momento totale delle forze esterne rispetto ad  $O$ , per cui se il **sistema è isolato** allora  **$\mathbf{L}$  si conserva**. La cosa importante da notare è che **non si conservano i momenti angolari singoli delle particelle, ma solo quello totale**.

#### MECCANICA QUANTISTICA

In meccanica quantistica le particelle possono avere sia momento angolare orbitale che momento angolare di spin, quindi quello totale è

$$\hat{\mathbf{J}} = \sum_n \hat{\mathbf{L}}_n + \sum_n \hat{\mathbf{S}}_n$$

Dove i momenti angolari hanno le seguenti **regole di commutazione**:

- $[\hat{L}_{n_i}, \hat{S}_{n'_j}] = 0$
- $[\hat{S}_{n_i}, \hat{S}_{n'_j}] = i\hbar\delta_{nn'}\varepsilon_{ijk}\hat{S}_{n_k}$
- $[\hat{L}_{n_i}, \hat{L}_{n'_j}] = i\hbar\delta_{nn'}\varepsilon_{ijk}\hat{L}_{n_k}$

Da cui segue immediatamente che

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k \implies \hat{\mathbf{J}} \text{ è un momento angolare!}$$

Affrontiamo il caso in cui ci sono due momenti angolari da sommare.

## 6.2 Somma di 2 momenti angolari

Questo caso si adatta in realtà a due contesti diversi:

1. 1 particella con spin e momento angolare orbitale:  $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$
2. 2 particelle senza spin:  $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}}_1 + \hat{\mathbf{L}}_2$

In generale ci occupiamo di effettuare la seguente operazione:

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2$$

### 6.2.1 Spazio degli stati

Nello spazio della prima particella  $\mathcal{H}_1$  il vettore di stato è indicato dal ket  $|k_1, j_1, m_1\rangle$ , dove  $k_1$  rappresenta tutti i numeri quantici del caso tranne il momento angolare ( $j_1$ ) e lo spin ( $m_1$ ). Inoltre, richiamiamo autovalori e autovettori di alcuni operatori importanti:

$$\begin{cases} \hat{\mathbf{J}}_1^2 |k_1, j_1, m_1\rangle = j_1(j_1 + 1)\hbar^2 |k_1, j_1, m_1\rangle \\ \hat{J}_{1z} |k_1, j_1, m_1\rangle = m_1\hbar |k_1, j_1, m_1\rangle \\ \hat{J}_{1\pm} |k_1, j_1, m_1\rangle = \hbar\sqrt{j_1(j_1 + 1) - m_1(m_1 \pm 1)} |k_1, j_1, m_1 \pm 1\rangle \end{cases} \quad (6.2.1)$$

Nello spazio della seconda particella  $\mathcal{H}_2$  vale lo stesso per il ket  $|k_2, j_2, m_2\rangle$ :

$$\begin{cases} \hat{\mathbf{J}}_2^2 |k_2, j_2, m_2\rangle = j_2(j_2 + 1)\hbar^2 |k_2, j_2, m_2\rangle \\ \hat{J}_{2z} |k_2, j_2, m_2\rangle = m_2\hbar |k_2, j_2, m_2\rangle \\ \hat{J}_{2\pm} |k_2, j_2, m_2\rangle = \hbar\sqrt{j_2(j_2 + 1) - m_2(m_2 \pm 1)} |k_2, j_2, m_2 \pm 1\rangle \end{cases} \quad (6.2.2)$$

D'ora in poi verranno omissi  $k_1$  e  $k_2$  dato che dobbiamo occuparci solo dei momenti angolari. Definisco lo spazio che descrive le due particelle come prodotto tensoriale dei due spazi:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$$

La cui base sarà

$$|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$$

Ogni spazio ha dimensione  $2j + 1$  quindi

$$\dim \mathcal{H} = \dim \mathcal{H}_1 \dim \mathcal{H}_2 = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$$

### 6.2.2 Cambio di base

Dato che  $\hat{\mathbf{J}}$  soddisfa le relazioni di commutazione di un momento angolare, allora è un momento angolare. In quanto tale, è possibile **diagonalizzare simultaneamente**  $\hat{\mathbf{J}}^2$  e  $\hat{J}_z$ , da cui segue che in  $\mathcal{H}$  ci sarà una base  $|j, m\rangle$  tale che:

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

Ora ci occupiamo di trovare il legame tra  $|j, m\rangle$  e  $|j_1, m_1\rangle, |j_2, m_2\rangle$ . Ci sono **2 BASI POSSIBILI**

1. Usando (6.2.1) e (6.2.2) è possibile trovare

$$\begin{aligned} &\text{AUTOSTATI SIMULTANEI di } \hat{\mathbf{J}}_1^2, \hat{J}_{1z}, \hat{\mathbf{J}}_2^2, \hat{J}_{2z} \\ &\implies |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \text{ è sicuramente una base} \end{aligned}$$

2. E' anche possibile **COINVOLGERE**  $\hat{\mathbf{J}}^2$  e  $\hat{J}_z$ . Per farlo vediamo le relazioni di commutazione importanti. Innanzitutto  $\hat{\mathbf{J}}^2$  può essere scritto così:

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{\mathbf{J}}_1^2 + \hat{\mathbf{J}}_2^2 + 2\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2 \quad (6.2.3)$$

$$= \hat{\mathbf{J}}_1^2 + \hat{\mathbf{J}}_2^2 + 2\hat{J}_{1z}\hat{J}_{2z} + \hat{J}_{1+}\hat{J}_{2-} + \hat{J}_{1-}\hat{J}_{2+} \quad (6.2.4)$$

Dato che  $\hat{\mathbf{J}}_1$  e  $\hat{\mathbf{J}}_2$  commutano entrambi con  $\hat{\mathbf{J}}_1^2$  e  $\hat{\mathbf{J}}_1^2$ , allora anche  $\hat{\mathbf{J}}$  lo fa. In particolare,  $\hat{\mathbf{J}}^2$  e  $\hat{J}_z = \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}$  commutano con  $\hat{\mathbf{J}}_1^2$  e  $\hat{\mathbf{J}}_2^2$ :

$$[\hat{\mathbf{J}}, \hat{\mathbf{J}}_1^2] = [\hat{\mathbf{J}}, \hat{\mathbf{J}}_2^2] = 0$$

$$[\hat{J}_z, \hat{\mathbf{J}}_1^2] = [\hat{J}_z, \hat{\mathbf{J}}_2^2] = 0$$

Inoltre, anche  $\hat{J}_{1z}$  e  $\hat{J}_{2z}$  commutano con  $\hat{J}_z$

$$[\hat{J}_{1z}, \hat{J}_z] = [\hat{J}_{2z}, \hat{J}_z] = 0$$

Ma  $\hat{J}_{iz}$  **non commutano con  $\hat{\mathbf{J}}^2$** !, infatti per  $\hat{J}_{1z}$ :

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_{1z}] &= [\hat{\mathbf{J}}_1^2 + \hat{\mathbf{J}}_2^2 + 2\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2, \hat{J}_{1z}] = \\ &= 2[\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2, \hat{J}_{1z}] = [\hat{J}_{1x}\hat{J}_{2x} + \hat{J}_{1y}\hat{J}_{2y} + \hat{J}_{2y}\hat{J}_{1z}] = \\ &= 2i\hbar(-\hat{J}_{1y}\hat{J}_{2x} + \hat{J}_{1x}\hat{J}_{2y}) \neq 0 \end{aligned}$$

Allora possiamo usare questo **C.S.C.O.**  $\{\hat{\mathbf{J}}_1^2, \hat{\mathbf{J}}_2^2, \hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_z\}$

Ora, finalmente, cerchiamo il legame tra le basi 1) e 2).

$$\begin{aligned} |j_1 j_2 j m\rangle &= \mathbf{1} |j_1 j_2 j m\rangle = \\ &= \sum_{m_1, m_2} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle \end{aligned}$$

I termini

$$C_{CG} = \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle$$

Sono detti **COEFFICIENTI DI CLEBSH-GORDAN**. Il cambio di base completo è quindi:

$$|j_1 j_2 j m\rangle = \sum_{m_1, m_2} C_{CG} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$$

Alcune proprietà dei coefficienti di Clebsch-Gordan

1. I coefficienti sono 0 a meno che  $m = m_1 + m_2$

DIM.

$$\begin{aligned} \hat{J}_z = \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z} &\implies \hat{J}_z - \hat{J}_{1z} - \hat{J}_{2z} = 0 \\ \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | \hat{J}_z - \hat{J}_{1z} - \hat{J}_{2z} | j_1 j_2 j m \rangle &= 0 \end{aligned}$$

Applicando  $\hat{J}_z$  a destra e gli altri a sinistra si ottiene

$$(m - m_1 - m_2) \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle = 0$$

Quindi, se  $m \neq m_1 + m_2 \Rightarrow$  coefficiente = 0

2. I coefficienti sono 0 a meno che

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$$

Questa è spesso nota come **regola di selezione triangolare** in quanto significa che il coefficiente di Clebsh-Gordan può essere diverso da zero solo se è possibile disegnare un triangolo con lati di lunghezza  $j_1, j_2$  e  $j$ . Mostriamo la dimostrazione di questo fatto in un caso concreto, che si propone anche come esempio di somma di momenti angolari

### 6.3 Somma di due momenti di spin 1/2 di 2 particelle

In questo caso  $j_1 = j_2 = 1/2$  e sono fissati, non cambieranno mai, per cui per alleggerire la notazione facciamo il seguente cambio:

$$\begin{aligned} |j_1 j_2 j m\rangle &\mapsto |j m\rangle \\ |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle &\mapsto |\pm\pm\rangle \end{aligned}$$

Ricordiamo che  $m = m_1 + m_2$ . Partiamo da  $m_1, m_2$  più grandi possibili  $\Rightarrow m_1 = j_1, m_2 = j_2$   
 $\Rightarrow m = j_1 + j_2 = 1$ . Quindi, dato che  $\hat{\mathbf{J}}$  è un momento angolare, vale sicuramente che  $-j \leq m \leq j$ , ma dato che  $m$  è il **massimo** allora **deve esserci**  $j = 1$

$$\exists \quad |j m\rangle = |11\rangle = |++\rangle \quad (6.3.1)$$

Per trovare gli altri si applica l'operatore di abbassamento per il momento angolare seguendo la seguente procedura:

$$\hat{J}_- |11\rangle = \hbar\sqrt{1(1+1) - 1(1-1)} |10\rangle = \sqrt{2}\hbar |10\rangle$$

Ma ora utilizziamo  $\hat{J}_- = \hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-}$ . Dall'equazione sopra

$$\begin{aligned} |10\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}\hbar} \hat{J}_- |++\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\hbar} (\hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-}) |++\rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}\hbar} (\hbar|-+\rangle + \hbar|+-\rangle) \end{aligned}$$

Quindi

$$|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|-+\rangle + |+-\rangle] \quad (6.3.2)$$

Per trovare lo stato  $|1-1\rangle$  eseguiamo di nuovo gli stessi passaggi

$$\begin{aligned} \hat{J}_- |10\rangle &= \sqrt{2}\hbar |1-1\rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-}) (|-+\rangle + |+-\rangle) = \\ &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} (|--\rangle + |--\rangle) = \\ &= \sqrt{2}\hbar |--\rangle \implies |1-1\rangle = |--\rangle \end{aligned} \quad (6.3.3)$$

Questi 3 stati con  $j = 1$  sono detti **STATI DI TRIPLETTO**.

SIMMETRIA. Scambiando i ruoli dei due elettroni gli stati non cambiano. Sono **STATI SIMMETRICI**.

Ma la dimensione dello spazio è  $(2 \cdot 1/2 + 1)(2 \cdot 1/2 + 1) = 4$  quindi manca uno stato! Infatti, osserviamo che dallo stato di tripletto con  $m = 0$

$$|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|+-\rangle + |-+\rangle]$$

è possibile costruirne un altro ortogonale sempre con  $m = 0$ . Allora dovrà avere per forza  $j = 0$ . Scriviamo il più generale possibile:

$$|00\rangle = \alpha |+-\rangle + \beta |-+\rangle$$

e imponiamo le due condizioni

1.  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$
2.  $\langle 10|00\rangle = 0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha + \beta)$  da cui  $\alpha = -\beta$

Quindi, dato che tutti i coefficienti possono essere scelti reali, otteniamo

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|+-\rangle - |-+\rangle] \quad (6.3.4)$$

Lo stato con  $j = 0$  è detto **STATO DI SINGOLETTO**.

SIMMETRIA. Scambiando le due particelle in stato di singoletto succede che viene mandato nel suo opposto:  $|00\rangle \mapsto -|00\rangle$ , quindi è uno **STATO ANTISIMMETRICO**.

Le formule ricavate sopra possono essere invertite per ottenere gli stati nella base  $|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$  in funzione di quelli nella base del momento angolare totale  $|j_1 j_2 j m\rangle$ :

$$\begin{aligned} |++\rangle &= |11\rangle \\ |--\rangle &= |1-1\rangle \\ |+-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|10\rangle + |00\rangle] \\ |-+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|10\rangle - |00\rangle] \end{aligned}$$

# Capitolo 7

## Particelle identiche

### 7.1 Introduzione: principio di indistinguibilità

Tutti gli elettroni del mondo sono uguali. Si distinguono solo dalla loro posizione e dalla componente  $z$  del loro spin:  $|\uparrow\rangle$  oppure  $|\downarrow\rangle$ . Però, c'è una grande differenza con la meccanica classica.

- a) In **MECCANICA CLASSICA** le particelle sono **DISTINGUIBILI** anche se si tratta di oggetti identici e il motivo è che si può seguire la loro **TRAJETTORIA**. Per esempio, se due palline identiche si scontrano, dato che siamo in grado di seguire la loro traiettoria allora in ogni istante possiamo distinguerle.
- b) In **MECCANICA QUANTISTICA** **non esiste la traiettoria** quindi durante un'interazione tra particelle non è possibile mantenere la mappatura/etichettatura (*label*). Di conseguenza, le particelle **IDENTICHE** sono **INDISTINGUIBILI**.

Allora risulta chiaro che deve essere costruito un sistema in cui NUMERARE I GRADI DI LIBERTA' **NON IMPLICHI UNA NUMERAZIONE DELLE PARTICELLE**.

**NON DEVE FARE DIFFERENZA IN QUALE ORDINE SCRIVIAMO POSIZIONE E PROIEZIONE DELLO SPIN DI UNO STATO FISICO**, nel senso che deve essere possibile trovare la probabilità che un elettrone abbia quella posizione e quello spin e che un altro ne abbia altri, ma **NON POSSIAMO SAPERE QUALE DEI DUE**. Quindi, se

$$\psi(\mathbf{x}_1, m_1; \mathbf{x}_2, m_2; \dots) \quad \text{è lo STATO FISICO}$$

**non** possiamo dire che l'elettrone "1" ha  $(\mathbf{x}_1, m_1)$  e l'elettrone "2" ha  $(\mathbf{x}_2, m_2)$ , ma **solamente** che **un elettrone** ha  $(\mathbf{x}_1, m_1)$  e **l'altro**  $(\mathbf{x}_2, m_2)$ .

Dobbiamo quindi costruire un **formalismo insensibile all'ordine delle particelle**. Lo stato

$$\psi(\mathbf{x}_2, m_2; \mathbf{x}_1, m_1; \dots)$$

deve rappresentare lo STESSO STATO FISICO.

Dicendo meglio

Siano  $1, 2, 3, \dots$  delle particelle, dove ogni numero rappresenta un GRUPPO DI GRADI DI LIBERTA', cioè per esempio  $1 \equiv (\text{coordinate, spin, energia, } \dots)$ . Allora

$$\psi(1, 2, 3, \dots)$$

DEVE ESSERE UGUALE A

$$\begin{aligned} \psi(2, 1, 3, \dots) \\ \psi(3, 1, 2, \dots) \\ \vdots \end{aligned}$$

Ma questo NON vuol dire che gli STATI siano IDENTICI! Infatti potrebbero differire per un fattore di fase

$$\psi(2, 1, 3, \dots) = e^{i\phi} \psi(1, 2, 3, \dots) \quad (7.1.1)$$

Con  $\phi$  costante. Si noti che  $\phi$  può dipendere dalla TIPOLOGIA DI PARTICELLA ma NON PUO' DIPENDERE DA momento, posizione e spin. Inoltre, permutando un'altra volta bisogna tornare alla funzione d'onda di partenza:

$$\psi(1, 2, 3, \dots) = e^{2i\phi} \psi(1, 2, 3, \dots) \quad (7.1.2)$$

Da cui  $\alpha^2 = e^{2i\phi} = 1$  quindi ci sono 2 POSSIBILITA'.

$$1. \alpha = +1: \psi(1, 2, 3, \dots) = \psi(2, 1, 3, \dots)$$

Cioè **LO STATO E' SIMMETRICO SOTTO LO SCAMBIO DI DUE PARTICELLE**. Le particelle con questa proprietà sono chiamate **BOSONI** e sono quelle con **SPIN INTERO**.

$$2. \alpha = -1: \psi(1, 2, 3, \dots) = -\psi(2, 1, 3, \dots)$$

Cioè **LO STATO E' ANTISIMMETRICO E' SOTTO LO SCAMBIO DI DUE PARTICELLE**. Le particelle con questa proprietà sono chiamate **FERMIONI** e sono quelle con **SPIN SEMI-INTERO**.

La relazione tra spin e statistica si dimostra unendo meccanica quantistica e relatività ristretta.

### Particelle composte

Per particelle composte il ragionamento è semplice. I fermioni, antisimmetrici, annullano il loro effetto di antisimmetria a due a due, quindi la simmetria finale è data da  $(-1)^{\#fermioni}$ . Facciamo qualche esempio:

- Protone e neutrone. Entrambi hanno 3 quark tutti con spin 1/2, quindi sono FERMIONI.
- Atomo di idrogeno. Possiede un protone ed un elettrone, entrambi fermioni, quindi è un BOSONE.
- Atomo di  $\text{He}^4$ . Ha 6 fermioni per cui è un BOSONE. Questo implica che può diventare SUPERFLUIDO.
- Atomo di  $\text{He}^3$ . 2+1 fermioni nel nucleo e 2 elettroni quindi è un FERMIONE. Significa che è INCOMPRESSIBILE.

All'interno di questi sistemi le interazioni tra le particelle in gioco rendono impossibile la ricerca di soluzioni analitiche all'equazioni di Schrödinger, allora in molti casi si lavora con approssimazioni. D'ora in avanti aggiungeremo tante piccole approssimazioni che ci permetteranno di risolvere sempre più problemi.

## 7.2 Approssimazione di particella indipendente

L'approssimazione di particella indipendente è un'ipotesi aggiuntiva che consente di trattare un sistema di ELETTRONI come se fossero INDIPENDENTI. Questo vuol dire, in particolare, che un sistema di due elettroni NON è un BOSONE, ma semplicemente sono due fermioni separati. Questo si può ottenere in due modi



1. In un atomo si trascura la repulsione coulombiana tra gli elettroni (ovvio, però è un'approssimazione troppo forte)
2. Tramite l'**APPROSSIMAZIONE DI HARTREE**. Vogliamo considerare gli elettroni più esterni, che sono quelli che reagiscono con le altre sostanze. In generale essi interagiscono con la nuvola elettronica interna in un modo complicato, ma in questa approssimazione si considera il loro **potenziale medio**, che potrebbe essere del tipo  $1/r^\alpha$  con  $\alpha \neq 1$ .

In questa approssimazione lo stato  $\psi$  del sistema è **PRODOTTO DI AUTOFUNZIONI DI UN ELETTRONE SINGOLO**. L'equazione di Schrödinger generica è

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2 + \dots) + V_C(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) + \sum_{i \neq j} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \right] \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) = E\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots)$$

Dove  $V_C$  è il potenziale centrale del nucleo e il termine con la sommatoria rappresenta le interazioni con gli altri elettroni. Nell'approssimazione di Hartree barattiamo  $V_C + V_{e-}$  con il **potenziale medio**  $\tilde{V}(\mathbf{r})$  per ogni elettrone. L'equazione diventa

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i^N \nabla_i^2 + \sum_i^N \tilde{V}(\mathbf{r}_i) \right] \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) = E\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots)$$

con  $N$  numero di elettroni. Il problema è diventato **separabile** quindi la **soluzione è prodotto degli stati di particella singola**

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) = \varphi_1(\mathbf{r}_1) \varphi_2(\mathbf{r}_2) \cdots \varphi_N(\mathbf{r}_N)$$

ognuno dei quali è soluzione di

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \tilde{V}(\mathbf{r}) \right] \varphi(\mathbf{r}) = E_s \varphi(\mathbf{r})$$

In totale si tratta di  $N$  equazioni.

## Caso di due particelle

Analizziamo in particolare il caso di due particelle indipendenti. Indico il set completo di osservabili con una lettera latina minuscola: una particella ha numeri quantici "a" e l'altra "b". Per l'atomo di idrogeno, per esempio, potrebbe essere "a" = "n l m".  $\Rightarrow \psi(1, 2) = \varphi_a(1) \varphi_b(2)$ . Però questo stato **non può descrivere due particelle identiche!** Così stiamo dicendo che la particella 1 ha "a" e la particella 2 ha "b". Infatti, la funzione d'onda non è né simmetrica né antisimmetrica sotto la permutazione delle particelle

$$\psi(2, 1) = \varphi_a(2) \varphi_b(1) \neq \varphi_a(1) \varphi_b(2)$$

Allora bisogna apportare una correzione, diversa a seconda che si tratti di fermioni o di bosoni

- 2 FERMIONI  $\Rightarrow$  bisogna ANTISIMMETRIZZARE

$$\psi_F(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_a(1) \varphi_b(2) - \varphi_a(2) \varphi_b(1)] \quad (7.2.1)$$

In questo modo per costruzione viene  $\psi_F(2, 1) = -\psi_F(1, 2)$  come deve essere per i fermioni.

- 2 BOSONI  $\Rightarrow$  bisogna SIMMETRIZZARE

$$\psi_B(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_a(1) \varphi_b(2) + \varphi_a(2) \varphi_b(1)] \quad (7.2.2)$$

In questo modo per costruzione viene  $\psi_B(2, 1) = +\psi_B(1, 2)$  come deve essere per i bosoni.

OSSERVAZIONE Tutto questo deriva dal principio di indeterminazione di Heisenberg, in particolare dall'impossibilità di seguire la traiettoria delle particelle.

### CONSEGUENZE

1. Se due fermioni hanno  $a = b$ , cioè gli stessi numeri quantici, allora  $\psi_F(1, 2) = 0$ . Quindi **FERMIONI IDENTICI NON POSSONO OCCUPARE LO STESSO STATO DI PARTICELLA SINGOLA**. Questo fatto si traduce nel famoso **PRINCIPIO DI ESCLUSIONE DI PAULI**, che nei corsi base di chimica viene introdotto come un "assioma", e che in questo caso abbiamo visto derivare direttamente dall'antisimmetria.
2. Esiste **CORRELAZIONE** tra due fermioni **ANCHE SE NON INTERAGISCONO**.

## 7.3 Approssimazione di spin separabile da coordinate

Abbiamo visto che un fermione con spin  $1/2$  (come l'elettrone) può essere rappresentato da uno spinore. Con questa approssimazione aggiuntiva supponiamo che la parte delle coordinate sia separata da quella di spin in questo modo:

$$\begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{r}, t) \\ \psi_-(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} = \psi(\mathbf{r}, t) \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad \text{con } a \text{ e } b \text{ numeri}$$

Cioè la funzione d'onda spaziale non dipende da che spin ha la particella, che sia  $|\uparrow\rangle$  o  $|\downarrow\rangle$ . Supponiamo che questo succeda per più particelle:

$$\psi(1, 2) = (\text{PARTE SPAZIALE}) \times (\text{PARTE DI SPIN})$$

Un'ipotesi del genere era già stata applicata per studiare la risonanza magnetica nucleare. Allora ci sono 4 casi possibili:

POSIZIONE	SPIN
+	+
-	-
+	-
-	+

Ma globalmente sono solo 2 in realtà!  $(+, +)$  e  $(-, -)$  danno origine ad una funzione d'onda **globalmente simmetrica**, mentre  $(+, -)$  e  $(-, +)$  danno origine ad una funzione d'onda **globalmente antisimmetrica**. Quindi

$$\psi(1, 2) \div [\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) \pm \varphi_a(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1)] \otimes \chi_{spin} \quad (7.3.1)$$

### Caso di due fermioni di spin $1/2$

Ricordiamo che i 3 stati di tripletto  $|1m\rangle$  sono simmetrici sotto lo scambio delle due particelle, mentre lo stato di singoletto  $|00\rangle$  è antisimmetrico. Per due fermioni deve essere  $\psi$  globalmente antisimmetrica, quindi

- Parte spaziale simmetrica  $\iff$  stato di singoletto
- Parte spaziale antisimmetrica  $\iff$  stato di tripletto

## Ancora sulla correlazione tra fermioni: la regola di Hund

Domanda: qual è la probabilità di trovare due elettroni vicini ( $\mathbf{r}_1 \simeq \mathbf{r}_2$ )? Imponiamo  $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$  nell'equazione (7.3.1):

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1) = \begin{cases} 2\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_1) & \text{se SIMMETRICA} \\ 0 & \text{se ANTISIMMETRICA} \end{cases}$$

Quindi se PARTE SPAZIALE ANTISIMMETRICA  $\Rightarrow \mathcal{P}(e^- \text{vicini}) = 0$ . Ancora una volta **CORRELAZIONE ANCHE SENZA INTERAZIONE**. Notare che questa cosa è assurda. Si può dire che se la funzione d'onda (spaziale) è antisimmetrica allora gli elettroni tendono a respingersi.

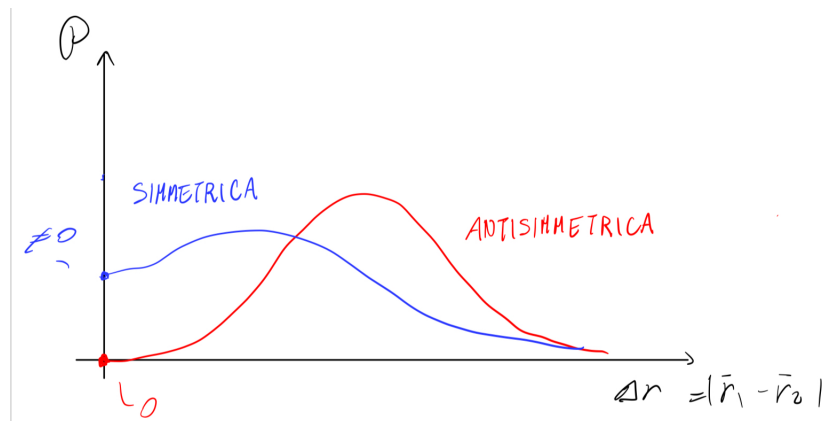


Figura 7.3.1: Probabilità in funzione della distanza: la cosa importante è che per  $\Delta r = 0$  se la funzione d'onda è antisimmetrica allora la probabilità è 0, mentre se è simmetrica no.

Allora se la parte spaziale è antisimmetrica vuol dire che gli elettroni staranno in media più lontani. Supponiamo che NON ci sia repulsione coulombiana. In questo caso può succedere che l'energia dello stato simmetrico e di quello antisimmetrico siano uguali. Se accendo la REPULSIONE allora gli elettroni si respingono.

In questo caso lo **stato energeticamente favorito** è quello che vede gli elettroni il più lontano possibile, cioè quello con **parte spaziale antisimmetrica** dato che in questo caso stanno mediamente più lontani. Allora, però, la parte di **spin deve essere simmetrica**.

Questo vuol dire che, IN GENERALE, con  $N$  particelle la natura tende a cercare la **massima antisimmetria spaziale** che, compatibilmente con una funzione d'onda globalmente antisimmetrica, corrisponde ad una **massima simmetria di spin**. Cioè la natura tende ad **allineare gli spin** quando riempie gli shell, e una volta riempiti gli shell con spin paralleli comincia a mettere quelli del verso opposto  $\Rightarrow$  **REGOLA DI HUND**.

## Ricapitolazione

1.  $\psi(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N) = \pm \psi(1, \dots, j, \dots, i, \dots, N)$  a seconda che siano bosoni (+) o fermioni (-).
2. Nell'approssimazione di particelle non interagenti  $\psi(1, 2) = \varphi_a(1)\varphi_b(2)$  va SIMMETTRIZZATA o ANTISIMMETTRIZZATA. Per i fermioni

$$\psi_F(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \varphi_a(1) & \varphi_a(2) \\ \varphi_b(1) & \varphi_b(2) \end{vmatrix}$$

E con  $N$  particelle si può generalizzare tramite il **determinante di Slater**:

$$\psi_F(1, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} = \begin{vmatrix} \varphi_a(1) & \varphi_a(2) & \cdots & \varphi_a(N) \\ \varphi_b(1) & \varphi_b(2) & \cdots & \varphi_b(N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \end{vmatrix}$$

3. Funzioni così definite sono dette **determinantali** e sono **antisimmetriche per costruzione** dato che scambiando una colonna  $\det \mapsto -\det$ .
4. Se  $a = b$  cioè due righe sono uguali allora  $\det = 0$  (Pauli).

## 7.4 Conseguenze e applicazioni

Si supponda di avere un potenziale che tiene legate le particelle. I livelli energetici si addensano sempre di più a mano a mano che ci si avvicina verso lo 0 (nell'atomo di idrogeno vanno come  $1/n^2$ ). Nei solidi questi livelli diventano **bande**.

### Fermioni

Cosa succede se si riempiono gli stati con **fermioni**? In generale si comincia a riempire il livello più basso e poi si va avanti cercando di mantenere lo spin parallelo. Ogni livello prima si riempie con tutti elettroni con lo stesso spin e POI si iniziano a mettere quelli con spin opposto. Quando si arriva ai livelli alti, la distanza tra il livello successivo è piccola e quindi l'**agitazione termica** ( $kT$ ) può causare **salti**. Questo fatto spiega la conducibilità elettrica e i calori specifici dei solidi.

Inoltre, ogni volta che si aggiungono elettroni questi vanno ad occupare livelli ad energia sempre più alta e quindi serve sempre più energia. Elettroni confinati in una buca esercitano pressione sulle pareti tramite una forza  $F = dE/dx$ . Quindi **un gas di fermioni non è comprimibile** e quindi non può diventare liquido.

### Bosoni

Con i bosoni non c'è questo problema perché tutti possono essere messi nello stato fondamentale. Se si abbassa la temperatura sufficientemente è possibile arrivare ad una configurazione in cui il primo salto  $\Delta E \gg kT$  non può essere fatto per agitazione termica e questo è alla base dei **SUPERFLUIDI** (zero viscosità).

Questo fenomeno spiega anche la **teoria BCS**, secondo la quale i metalli a basse temperature diventano **SUPERCONDUTTORI** (zero resistenza elettrica). In questo modello di metallo coppie di elettroni interagiscono tra di loro tramite le vibrazioni reticolari, la cui quantizzazione prende il nome di *fonone*. Questi fononi generano una leggera attrazione che permette di trattare gli elettroni come una coppia e quindi **il sistema diventa un bosone!** Si chiamano **coppie di Cooper**.

## 7.5 Operatori

Ci sono delle restrizioni anche sugli operatori quando si trattano sistemi di particelle identiche, infatti **non** devono fare distinzione. Per esempio per due particelle identiche la seguente Hamiltoniana

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + W(\mathbf{r}_1) + Y(\mathbf{r}_2)$$

non va bene dato che fa distinzione! Deve succedere che l'Hamiltoniana rimane uguale sotto lo scambio delle particelle, cioè  $\mathbf{r}_1 \leftrightarrow \mathbf{r}_2 \Rightarrow \hat{H}$  rimane uguale. Questo si traduce nelle seguenti condizioni:

$$\begin{cases} V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \\ W = Y \end{cases}$$

## Capitolo 8

# Teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo

Come si è visto fino a questo punto, l'applicazione della meccanica quantistica allo studio dei sistemi conservativi si basa sulla diagonalizzazione dell'operatore Hamiltoniana. I casi più semplici che si possono trattare sono l'oscillatore armonico e l'atomo idrogenoide nella sua prima approssimazione, ma nel tentativo di descrivere sistemi leggermente più complessi ci si accorge che diventa impossibile trovare una soluzione analitica dell'equazione di Schrödinger.

A questo punto si può procedere utilizzando *metodi numerici* con l'aiuto di un computer, **oppure** è possibile, in alcuni casi, trovare delle soluzioni analitiche *approssimate* dell'equazione agli autovalori. La cosiddetta **teoria delle perturbazioni** si divide in due rami:

- a) Teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo
- b) Teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo

In questo capitolo ci occuperemo di perturbazioni indipendenti dal tempo.

### 8.1 Introduzione del problema

Il problema è il seguente: trovare le soluzioni di

$$\hat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad (8.1.1)$$

quando non siamo in grado di diagonalizzare  $\hat{H}$ .

Il metodo perturbativo è applicabile sotto alcune ipotesi:

1. L'Hamiltoniana del sistema è scrivibile nella seguente forma:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_P$$

dove noi siamo in grado di diagonalizzare  $\hat{H}_0$  e  $\hat{H}_P$  rappresenta la *perturbazione* stazionaria.

2. Il termine perturbativo deve essere **piccolo** rispetto ad  $\hat{H}_0$ , cioè deve essere possibile scriverlo in questo modo:

$$\hat{H}_P = \lambda \hat{H}_1 \quad \text{con} \quad \lambda \ll 1$$

Dove  $\hat{H}_1$  sarà un generico operatore, il cui peso è dato appunto da  $\lambda$ .

3. Il sistema deve trovarsi in un equilibrio stabile, nel senso che se si spegne la perturbazione si torna alla situazione in cui c'è solo  $\hat{H}_0$ . Questo vuol dire che cerchiamo le soluzioni scrivibili come **serie di potenze in  $\lambda$** , in modo tale che per  $\lambda \rightarrow 0$  si torni alla soluzione imperturbata. Si vuole anche che la serie risulti **rapidamente convergente**, cioè che bastino pochi termini per individuarne il comportamento.

## 8.2 Metodo generale

L'ipotesi è quella di conoscere la soluzione del problema per  $\hat{H}_0$ , cioè

$$\hat{H}_0 |\varphi_n\rangle = E_n^{(0)} |\varphi_n\rangle$$

Questo vuol dire che  $|\varphi_n\rangle$  formano una base dello spazio di Hilbert e quindi può essere utilizzata per espandere ogni funzione appartenente allo spazio (tra cui la nostra soluzione finale  $|\psi\rangle$ ):

$$\boxed{|\psi_n\rangle = \sum_k d_{nk} |\varphi_k\rangle} \quad (8.2.1)$$

Si dice che **il calcolo perturbativo è portato avanti nella rappresentazione degli stati imperturbati**.

Fino a qui è tutto esatto, ma ora entra in gioco l'approssimazione: cerchiamo di espandere i **coefficienti in serie di potenze in  $\lambda$** . Decidiamo di studiare i seguenti due casi separatamente:

- a)  $|\varphi_n\rangle$  non degenerare  $\implies$  ad ogni energia corrisponde un solo stato  
 b)  $|\varphi_n^i\rangle$  degenerare  $\implies$  tutti gli stati  $i = 1, 2, \dots$  hanno la medesima energia  $E_n^{(0)}$

## 8.3 Perturbazione sugli stati non degeneri

Comincio a portare fuori dalla somma il termine *n-esimo* nell'equazione (8.2.1)

$$|\psi_n\rangle = d_{nn} |\varphi_n\rangle + \sum_{k \neq n} d_{nk} |\varphi_k\rangle$$

e ora raccolgo  $d_{nn} \equiv N(\lambda)$

$$|\psi_n\rangle = N(\lambda) \left[ |\varphi_n\rangle + \sum_{k \neq n} c_{nk} |\varphi_k\rangle \right]$$

ovviamente  $c_{nk} \equiv d_{nk}/d_{nn}$ . Ora  $N(\lambda)$  è diventato un semplice fattore di normalizzazione e verrà trovato in seguito utilizzando l'ortonormalità  $\langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1$ .

Ora cominciamo con i passi dell'approssimazione.

1. Se  $\lambda = 0$  deve essere  $\hat{H} = \hat{H}_0$ , cioè **una perturbazione infinitesima deve produrre un effetto infinitesimo**. Questo è causato dall'ipotesi di equilibrio stabile del problema. La traduzione matematica è:

$$\begin{cases} N(0) = 1 \\ c_{nk}(0) = 0 \end{cases}$$

2. Cerchiamo  $c_{nk}(\lambda)$  come **funzioni analitica in  $\lambda$**  (approssimazione), cioè:

$$c_{nk}(\lambda) = c_{nk}^{(0)} + \lambda c_{nk}^{(1)} + \lambda^2 c_{nk}^{(2)} + \dots$$

$$\text{Ma } c_{nk}(0) = 0 \Rightarrow c_{nk}^{(0)} = 0.$$

3. Allo stesso modo, cerchiamo  $E_n$  in serie di potenze:

$$E_n(\lambda) = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots$$

A questo punto siamo pronti per inserire tutte le funzioni approssimate dentro l'equazione di Schrödinger (8.1.1) per ottenere

$$\begin{aligned} (\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1) \left[ |\varphi_n\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |\varphi_k\rangle + \lambda^2 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(2)} |\varphi_k\rangle + \dots \right] = \\ = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots) \left[ |\varphi_n\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |\varphi_k\rangle + \lambda^2 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(2)} |\varphi_k\rangle + \dots \right] \end{aligned} \quad (8.3.1)$$

Viene richiesto che questa equazione sia soddisfatta per  $\lambda$  piccolo ma comunque arbitrario, quindi è necessario eguagliare i coefficienti dei diversi ordini di  $\lambda$ .

**Ordine 0**  $\rightarrow \lambda^0$

$$\hat{H}_0 |\varphi_n\rangle = E_n^{(0)} |\varphi_n\rangle$$

**Ordine 1**  $\rightarrow \lambda^1$

$$\hat{H}_1 |\varphi_n\rangle + \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} \hat{H}_0 |\varphi_k\rangle = E_n^{(1)} |\varphi_n\rangle + E_n^{(0)} \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |\varphi_k\rangle$$

da cui

$$E_n^{(1)} |\varphi_n\rangle = \hat{H}_1 |\varphi_n\rangle + \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} (E_k^{(0)} - E_n^{(0)}) |\varphi_k\rangle \quad (8.3.2)$$

Dove si rammenta che le incognite sono  $E_n^{(1)}$  e  $c_{nk}^{(1)}$ . Per ricavare l'energia applichiamo  $\langle \varphi_n |$  a entrambi i membri si ottiene

$$\boxed{E_n^{(1)} = \langle \varphi_n | \hat{H}_1 | \varphi_n \rangle} \quad (8.3.3)$$

La **correzione al 1° ordine** è data dal **valore di aspettazione della parte perturbativa** dell'hamiltoniana **calcolato sullo stato imperturbato**. Quindi

$$\boxed{E_n(\lambda) = E_n^{(0)} + \langle \varphi_n | \hat{H}_P | \varphi_n \rangle + O(\lambda^2)}$$

**Esempio.** Nella rappresentazione delle coordinate:

$$\lambda E_n^{(1)} = \int d^3x \varphi_n^*(\mathbf{x}) \lambda \hat{H}_1 \varphi_n(\mathbf{x}) = \int d^3x \hat{H}_P |\varphi_n(\mathbf{x})|^2$$

Da cui si evince che il termine correttivo dipende da quanto si sovrappongono  $\hat{H}_P(\mathbf{x})$  e la densità di probabilità. **La perturbazione ha un maggiore effetto sui livelli energetici nei punti in cui si sovrappongono.**

**Esempio.** Se la funzione  $\varphi_n(\mathbf{x})$  ha parità definita e  $\hat{H}_P(\mathbf{x})$  è dispari, allora la correzione al primo ordine dell'energia è nulla.

Per la correzione agli stati applichiamo  $\langle \varphi_m |$  con  $m \neq n$ :

$$0 = \langle \varphi_m | \hat{H}_1 | \varphi_n \rangle + c_{nm}^{(1)} (E_n^{(0)} - E_m^{(0)})$$

$$\lambda c_{nk}^{(1)} = \frac{\langle \varphi_k | \lambda \hat{H}_1 | \varphi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (8.3.4)$$

Di conseguenza, il vettore di stato  $|\psi_n\rangle$  corrispondente allo stato imperturbato  $|\varphi_n\rangle$  è

$$|\psi_n\rangle = N(\lambda) \left[ |\varphi_n\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} \frac{\langle \varphi_k | \hat{H}_P | \varphi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |\varphi_k\rangle + O(\lambda^2) \right]$$

La correzione al primo ordine del vettore di stato è una sovrapposizione lineare di tutti gli stati imperturbati: si dice che **la perturbazione mescola gli stati**. Il peso con cui avviene questo mixing è dato da

$$\text{PESO} = \frac{\text{VALORE DELLA PERTURBAZIONE TRA GLI STATI IMPERTURBATI}}{\text{DIFFERENZA TRA I LIVELLI ENERGETICI}}$$

Da qui si evince una cosa importante: **Quanto più il livello "k" è lontano, tanto meno avrà peso in questa miscela**, cioè **contano di più i livelli vicini**. Inoltre, è evidente come mai abbiamo separato i casi di degenerazione da quelli di non degenerazione: la (8.3.4) non avrebbe senso nel caso in cui  $E_n^{(0)} = E_k^{(0)}$ . A questo punto cerchiamo  $N(\lambda)$  utilizzando l'ortonormalità

$$\begin{aligned} \langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1 &= |N|^2 \left[ \langle \varphi_n | + \sum_{k \neq n} \lambda (c_{nk}^{(1)})^* \langle \varphi_k | + O(\lambda^2) \right] \left[ |\varphi_n\rangle + \sum_{k' \neq n} \lambda c_{nk'}^{(1)} |\varphi_{k'}\rangle + O(\lambda^2) \right] = \\ &= |N|^2 [1 + 0 + 0 + O(\lambda^2)] \Rightarrow \boxed{N(\lambda) = 1 + O(\lambda^2)} \end{aligned}$$

Finalmente abbiamo trovato la correzione al 1° ordine per il vettore di stato:

$$|\psi_n\rangle = |\varphi_n\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} \frac{\langle \varphi_k | \hat{H}_P | \varphi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |\varphi_k\rangle + O(\lambda^2) \quad (8.3.5)$$

Commenti - limiti di validità della teoria delle perturbazioni. Affinché la serie in  $\lambda$  sia rapidamente convergente occorre che il coefficiente di  $\lambda$  sia **piccolo**, cioè che  $\langle \hat{H}_P |$  tra gli stati imperturbati sia molto minore di  $\hat{H}_0$  sugli stessi stati. In particolare, dalla (8.3.3) si vuole che

$$E_n^{(1)} = \langle \varphi_n | \hat{H}_P | \varphi_n \rangle \ll \langle \varphi_n | \hat{H}_0 | \varphi_n \rangle$$

e dalla equazione (8.3.5) si nota che la teoria è valida se gli elementi **non diagonali della matrice  $H_P$**  sono **molto minori della differenza tra i livelli energetici imperturbati**.

## Ordine 2 $\rightarrow \lambda^2$

Si procede allo stesso modo. Partendo dalla (8.3.1) eguagliamo i termini in  $\lambda^2$ :

$$\hat{H}_0 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(2)} |\varphi_k\rangle + \hat{H}_1 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |\varphi_k\rangle = E_n^{(0)} \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(2)} |\varphi_k\rangle + E_n^{(1)} \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |\varphi_k\rangle + E_n^{(2)} |\varphi_n\rangle \quad (8.3.6)$$



Per trovare la l'energia applichiamo  $\langle \varphi_n |$  a entrambi i membri

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} \langle \varphi_n | \hat{H}_1 | \varphi_k \rangle = \sum_{k \neq n} \frac{\langle \varphi_k | \hat{H}_1 | \varphi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \langle \varphi_n | \hat{H}_1 | \varphi_k \rangle$$

Uno è il complesso coniugato dell'altro, per cui

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{\left| \langle \varphi_k | \hat{H}_1 | \varphi_n \rangle \right|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

## COMMENTI

Al 1° ordine le correzione erano gli elementi diagonali ((8.3.3)). Al 2° ordine entrano in gioco **tutti i livelli**.

1. Come nella (8.3.4) c'è il fattore  $E_n^{(0)} - E_k^{(0)}$ . Quindi, quanto più lo stato  $k$  è lontano energeticamente, tanto meno conta. Questo apre alla possibilità che la somma, che è **estesa a tutti gli stati, anche quelli liberi per ex.**, si possa troncare da un certo punto in poi.
2. Cosa succede allo **stato fondamentale**  $|\varphi_n\rangle$ ?

$$E_n^{(0)} - E_k^{(0)} < 0$$

Quindi, dato che il numeratore è positivo, **le correzioni al secondo ordine sono negative**.

3. Se lo stato  $k$  è "IMPORTANTE", cosa che può succedere perché

- Vicino in energia
- Il fattore  $\left| \langle \varphi_k | \hat{H}_1 | \varphi_n \rangle \right|^2$  è grande

Allora ci sono due casi. Se  $k$  si trova **sopra**  $n$ , le correzioni a  $E_n$  sono **negative**. Se  $k$  si trova **sotto**  $n$ , le correzione sono **positive**. Si dice che *I livelli tendono a respingersi*. N.B.: bisogna anche considerare le correzioni al primo ordine ovviamente.

Per trovare le correzioni agli stati, cioè  $c_{nk}^{(2)}$ , bisogna applicare  $\langle \varphi_m |$  con  $m \neq n$ .

$$c_{nk}^{(2)} = \dots$$

Fare attenzione al fatto che ora bisogna trovare la normalizzazione  $N(\lambda)$ . Ci era venuto  $N(\lambda) = 1 + O(\lambda^2)$  ma ora siamo all'ordine 2 quindi non si possono trascurare i termini  $O(\lambda^2)$ .

## 8.4 Perturbazione sugli stati degeneri

Ora assumiamo che il livello  $E_n^{(0)}$  di cui vogliamo calcolare le correzione sia degenerare  $g_n$  volte. In questo caso è necessario un altro indice  $i = 1, 2, \dots, g_n$  per indicare gli stati corrispondenti al livello  $n$ -esimo. Indicheremo ogni stato con

$$|\varphi_n^i\rangle \quad \text{con} \quad \langle \varphi_n^i | \varphi_{n'}^j \rangle = \delta_{nn'} \delta_{ij}$$

**Cosa cambia** rispetto al caso non degenero? Ora il generico stato corrispondente all'energia  $E_n^{(0)}$  può essere in linea di principio una generica combinazione lineare di tutti gli stati  $|\varphi_n^i\rangle$ . Cerchiamo sempre  $|\psi_n\rangle$  in serie di potenze, ma ora l'espressione si complica:

$$|\psi_n\rangle = N(\lambda) \left[ \sum_{i=1}^{g_n} \alpha_i |\varphi_n^i\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} \sum_{i=1}^{g_n} \beta_i |\varphi_k^i\rangle + \dots \right] \quad (8.4.1)$$

Inserendo questa equazione in quella di Schrodinger (8.1.1) si può procedere a eguagliare i diversi ordini di  $\lambda$  come fatto sopra.

**Ordine 0**  $\rightarrow \lambda^0$

Inutile, non fornisce informazioni.

**Ordine 1**  $\rightarrow \lambda^1$

$$\hat{H}_0 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} \sum_i \beta_i |\varphi_k^i\rangle + \hat{H}_1 \sum_i \alpha_i |\varphi_n^i\rangle = E_n^{(0)} \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} \sum_i \beta_i |\varphi_k^i\rangle + E_n^{(1)} \sum_i \alpha_i |\varphi_n^i\rangle$$

Per trovare le correzioni all'energia si applica, come sopra,  $\langle \varphi_n^j |$ , da cui

$$0 + \sum_i \alpha_i \langle \varphi_n^j | \hat{H}_1 | \varphi_n^i \rangle = 0 + E_n^{(1)} \alpha_j \quad (8.4.2)$$

Ma attenzione,  $\hat{H}_{ji} = \langle \varphi_n^j | \hat{H}_1 | \varphi_n^i \rangle$  rappresenta l'entrata  $ji$  della matrice  $\hat{H}_1$  nel sottospazio degenere (matrice  $g_n \times g_n$ ). In questa ottica, l'equazione (8.4.2) diventa un'**EQUAZIONE AGLI AUTOVALORI**:

$$\boxed{\sum_i H_{ji} \alpha_i = E_n^{(1)} \alpha_j}$$

In forma matriciale:

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1g_n} \\ H_{21} & H_{22} & \cdots & H_{2g_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{g_n 1} & H_{g_n 2} & \cdots & H_{g_n g_n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_{g_n} \end{pmatrix} = E_n^{(1)} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_{g_n} \end{pmatrix}$$

E' evidente che

- $E_n^{(1)}$  sono gli **autovalori** (correzioni alle energie)
- $\alpha_i$  sono le componenti degli **autovettori** (correzioni agli stati)

In definitiva, il problema di **trovare le perturbazioni per gli stati degeneri** si riduce a quello di **DIAGONALIZZARE LA PARTE PERTURBATIVA DELL'HAMILTONIANA ALL'INTERNO DELLO SPAZIO DEGENERE**.

NOTA BENE: NON stiamo diagonalizzando  $\hat{H}_1$  in tutto lo spazio.

COMMENTO. Dato che è un'equazione agli autovalori per una matrice  $g_n \times g_n$ , è possibile trovare fino a  $g_n$  valori **diversi** per  $E_n^{(1)}$ . Tutti gli stati degeneri partono da  $E_n^{(0)}$ , energia dovuta ad  $\hat{H}_0$ , ma **la perturbazione può separare le energie degli stati degeneri**.

**Ordine 2**  $\rightarrow \lambda^2$

I calcoli per il secondo ordine si fanno complicati quindi non verranno trattati in queste note.

## Capitolo 9

# Applicazioni della teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo

In questo capitolo vengono svolti una serie di esercizi di applicazione della teoria delle perturbazioni. Verrà messo un particolare accento sull'atomo di idrogeno.

### 9.1 Effetto Stark per l'atomo di idrogeno

Consideriamo un atomo di idrogeno posizionato all'interno di un **campo elettrico**  $\mathcal{E}$  parallelo all'asse  $z$ . La carica quindi sente un potenziale elettrico che aggiunge termine all'Hamiltoniana del tipo:

$$\hat{H}_P = -q\vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{x} = -q\mathcal{E}z$$

Anche per i campi elettrici più forti che possono essere generati in laboratorio, sarà sempre  $\hat{H}_P \ll \hat{H}_0$ , per cui è ragionevole trattare questo termine come una perturbazione. Scegliendo  $\lambda = -q\mathcal{E}$ :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - q\mathcal{E}z = \hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1 \quad \text{con} \quad \hat{H}_1 = \hat{z}$$

#### 9.1.1 Effetto Stark sullo stato fondamentale $n = 1$

La prima domanda da porsi in questo tipo di esercizi è: **lo stato su cui si vuole calcolare la perturbazione è degenere o no?** In questo caso no, infatti l'unico stato con  $n = 1$  è  $|n m l\rangle = |1 0 0\rangle$ .

**Correzione al primo ordine**

$$\begin{aligned} E_{100}^{(1)} &= (-q\mathcal{E}) \langle 100 | \hat{z} | 100 \rangle = \\ &= -q\mathcal{E} \int d^3r \, z |\varphi_{100}(r)|^2 = 0 \end{aligned}$$

per simmetria, dato che lo stato fondamentale ha parità definita quindi il suo modulo quadro è pari e  $\hat{z}$  è un operatore dispari. **Non c'è correzione al primo ordine**

**Correzione al secondo ordine**

$$E_{100}^{(2)} = q^2 \mathcal{E}^2 \sum_{n \neq 1} \sum_{l,m} \frac{|\langle n l m | \hat{z} | 100 \rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_n^{(0)}} \quad (9.1.1)$$

NOTA BENE: la somma è estesa a **tutti gli stati**, anche quelli nel continuo (se ci sono).

E' possibile semplificare di molto la somma utilizzando argomenti di simmetria. Notiamo innanzitutto che  $\hat{H}_P$  è simmetrico per rotazioni attorno all'asse  $z$ .

$$[\hat{L}_z, \hat{z}] = 0 \Rightarrow \hat{L}_z(\hat{z} |n' l' m'\rangle) = \hat{z} (\hat{L}_z |n' l' m'\rangle) = m' \hbar (\hat{z} |n' l' m'\rangle)$$

cioè  $\hat{z} |n' l' m'\rangle$  è autostato di  $\hat{L}_z$  con lo stesso  $m$  di  $|n' l' m'\rangle$ . Questo, nel nostro caso, vuol dire che lo stato  $\hat{z} |1 0 0\rangle$  ha momento angolare lungo  $z$  pari a 0, cioè ha  $m = 0$ . Allora grazie all'ortogonalità delle armoniche sferiche, nella (9.1.1) sopravvive solo il termine con  $m = 0$  e la somma diventa estesa solo a  $n \neq 1$  ed  $l$ .

Questo fatto viene generalizzato in una **REGOLA DI SELEZIONE**, secondo la quale

$$\langle n l m | \hat{z} | n' l' m' \rangle \neq 0 \Leftrightarrow m = m' \Leftrightarrow \Delta m = 0$$

Rimane ora da calcolare

$$\sum_{n \neq 1, l} \frac{|\langle n l 0 | \hat{z} | 1 0 0 \rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_n^{(0)}}$$

Allora forza e coraggio, si parte.

$$\begin{aligned} \langle n l 0 | \hat{z} | 1 0 0 \rangle &= \int_0^\infty dr r^2 \int d\Omega R_{nl}^*(r) Y_l^{0*}(\theta, \varphi) r \cos \theta R_{10}(r) Y_0^0(\vartheta, \varphi) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \int_0^\infty dr r^3 R_{nl}(r) R_{10}(r) \int d\Omega Y_l^{0*}(\theta, \varphi) Y_1^0(\theta, \varphi) \end{aligned}$$

L'integrale sull'angolo solido equivale proprio al prodotto scalare tra due armoniche sferiche

$$\int d\Omega Y_l^{0*}(\theta, \varphi) Y_1^0(\theta, \varphi) = \langle l 0 | 1 0 \rangle = \delta_{l,1}$$

dato che sono ortonormali. Quindi

$$\langle n l m | \hat{z} | 1 0 0 \rangle = \text{cost} \cdot \delta_{l,1} \delta_{m,0}$$

dove la costante risulta dall'integrale in  $r$ . NOTA BENE:  $\delta_{m,0}$  deriva dalla **simmetria cilindrica**, quindi ci sarebbe stato per ogni potenziale in cui compare  $z$  sottoforma di potenza ( $z, z^2, z^3, \dots$ );  $\delta_{l,0}$  invece è una conseguenza del fatto che la **perturbazione è lineare**. Si noti che ora la somma nella (9.1.1) diventa estesa solo agli  $n$ .

Ora, facendo dei calcoli molto difficili, si potrebbe fare l'integrale in  $r$  e trovare il valore preciso, ma ci limitiamo a estrarre la dipendenza dimensionale. Si ricorda che  $|\langle n l 0 | \hat{z} | 1 0 0 \rangle|^2$  deve avere dimensioni di una lunghezza al quadrato.

$$|\langle n l 0 | \hat{z} | 1 0 0 \rangle|^2 = a_0^2 f(n)$$

Richiamando il fatto che per l'atomo di idrogeno

$$E_n^{(0)} = -\frac{1}{2} \mu c^2 \alpha^2 \frac{1}{n^2}$$

E' finalmente possibile scrivere la correzione al secondo ordine, inserendo nella (9.1.1)

$$E_{100}^{(2)} = -q^2 \mathcal{E}^2 a_0^2 \sum_{n=2}^{\infty} \frac{f(n)}{\frac{1}{2} \mu c^2 \alpha^2 \left(1 - \frac{1}{n^2}\right)}$$

Concludiamo che, all'ordine minore possibile in  $\mathcal{E}$ , la correzione sullo stato fondamentale  $1s$  è quadratica. Ogni termine della serie è positivo, per cui lo **stato fondamentale diminuisce la sua energia** in seguito a questa perturbazione.

### 9.1.2 Effetto stark sul primo stato eccitato $n = 2$

Lo stato con  $n = 2$  è **4 volte degenere**, infatti ad esso corrispondono i seguenti *ket*:

$$|n l m\rangle = |2 0 0\rangle; \quad |2 1 0\rangle; \quad |2 1 1\rangle; \quad |2 1 -1\rangle;$$

Di conseguenza, per ottenere le correzioni al primo ordine, dobbiamo diagonalizzare  $\hat{H}_P$  nel sottospazio degenere  $4 \times 4$  generato da questi 4 stati. Ci occupiamo quindi ora di trovare gli elementi di matrice in questo spazio.

Abbiamo già notato, grazie alla **simmetria cilindrica** di  $\hat{z}$ , che vale la seguente regola di selezione

$$\langle 2 l m | \hat{z} | 2 l' m' \rangle = \cos t \cdot \delta_{mm'}$$

Quindi tutti gli elementi con  $m \neq m'$  sono nulli.

$$\hat{z} \doteq \left( \begin{array}{cc|cc} \langle 2 0 0 | z | 2 0 0 \rangle & \langle 2 0 0 | z | 2 1 0 \rangle & & \\ \langle 2 1 0 | z | 2 0 0 \rangle & \langle 2 1 0 | z | 2 1 0 \rangle & & \\ \hline & & 0 & \\ 0 & & \langle 2 1 1 | z | 2 1 1 \rangle & 0 \\ & & 0 & \langle 2 1 -1 | z | 2 1 -1 \rangle \end{array} \right)$$

Possiamo sfruttare la **parità** per semplificare ancora di più la matrice.

- Lo stato generico " $l$ " ha parità definita  $(-1)^l$
- L'operatore  $\hat{z}$  è dispari

$\Rightarrow$  se  $l_1 + l_2$  è pari allora il valore di aspettazione di  $\hat{z}$  è zero. Infatti verrebbe l'integrale su tutto lo spazio di una funzione pari per una dispari, dato che l'effetto dell'operatore  $\hat{z}$  è solo una moltiplicazione per  $z$ . Concludiamo che gli elementi sulla diagonali sono nulli ( $l + l = 2l$  pari). Gli unici elementi  $\neq 0$  sono quelli con  $l = 1$  e  $l = 0$  contemporaneamente. Inoltre, l'operatore è Hermitiano, quindi sono uno il complesso coniugato dell'altro.

$$\hat{z} \doteq \left( \begin{array}{cc|cc} 0 & A & 0 & 0 \\ A^* & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right)$$

Con  $A = \langle 2 0 0 | z | 2 1 0 \rangle$ . Gli stati con  $m = \pm 1$  non vengono modificati! Per trovare la correzione degli altri due stati procediamo a diagonalizzare il blocco in alto a sinistra. Si tratta di un'equazione agli autovalori. Reintroduciamo il fattore  $q\mathcal{E}$  per ottenere direttamente le correzioni all'energia come autovalori.

$$q\mathcal{E} \begin{pmatrix} 0 & A \\ A^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = E_2^{(1)} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}$$

Il sistema è facilmente risolvibile una volta trovato  $A$ .

$$\begin{aligned} A = \langle 2 0 0 | z | 2 1 0 \rangle &= \int_0^\infty dr r^2 \frac{1}{(2a_0)^3} e^{r/2a_0} \frac{2r}{\sqrt{3}a_0} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) r \int d\Omega Y_0^{0*} \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_1^0 Y_1^0 \\ &= -3a_0 \end{aligned}$$

Tornando al sistema e svolgendo i calcoli si ottiene

$$\boxed{E_2^{(1)} = \pm 3a_0 q\mathcal{E}} \quad \text{LO SPOSTAMENTO DELLE RIGHE SPETTRALI E' LINEARE IN } \mathcal{E}$$

Gli autovettori sono ovviamente

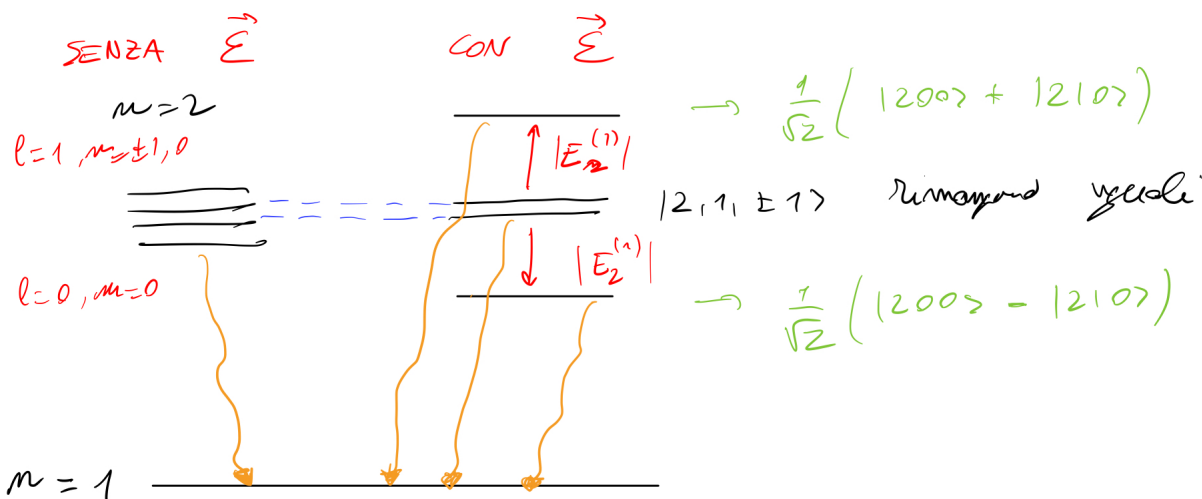
$$\mathbf{v}_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{v}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Si ricorda che questi vettori sono nel sottospazio generato da  $|2 0 0\rangle$  e  $|2 1 0\rangle$  e quindi le componenti sono relative a questa base.

## RIASSUNTO: COSA SUCCEDDE AI LIVELLI

Gli stati  $|2, 1, \pm 1\rangle$  rimangono alla stessa energia dato che le correzioni sono nulle. I due stati con  $m = 0$  vengono modificati invece.

$$\begin{aligned} |210\rangle &\mapsto \frac{1}{\sqrt{2}} (|200\rangle - |210\rangle) && \text{con energia} && E_2 \mapsto E_2 - |E_2^{(1)}| \\ |200\rangle &\mapsto \frac{1}{\sqrt{2}} (|200\rangle + |210\rangle) && \text{con energia} && E_2 \mapsto E_2 + |E_2^{(1)}| \end{aligned}$$



Questo vuol dire che **se l'atomo si può diseccitare** e quindi emettere radiazione, allora nel caso  $\mathcal{E} = 0$  si osserva una riga dovuta alla diseccitazione degli stati con  $n = 2$ , mentre con  $\mathcal{E} \neq 0$  se ne osservano 3, di cui una nella stessa posizione.

## COMMENTI SULLA SIMMETRIA

Il problema imperturbato ha **simmetria sferica**, quindi di conservano  $L_z$  e  $L^2$ , ma accendendo un campo elettrico parallelo a  $z$  la simmetria si riduce ad una **cilindrica** (cioè per rotazioni attorno all'asse  $z$ ) e quindi si conserva solo  $L_z$ . Allora il numero quantico  $m$  rimane un buon numero per descrivere il problema, dato che gli stati con  $m$  fissato mantengono questa proprietà in quanto sono **autofunzioni anche del problema perturbato**. Come conseguenza di questo, ci si poteva già aspettare che gli stati con  $m$  diverso,  $|21 + 1\rangle$  e  $|21 - 1\rangle$ , non si sarebbero combinati, mentre quelli con  $m = 0$  sì. Abbiamo ottenuto una precisa combinazione di quest'ultimi, ma in generale gli stati perturbati sarebbero potuti essere:

- 1)  $|21 + 1\rangle$
- 2)  $|21 - 1\rangle$
- 3)  $\sin \vartheta |200\rangle + \cos \vartheta e^{i\delta} |210\rangle$
- 4)  $\cos \vartheta |200\rangle - \sin \vartheta e^{-i\delta} |210\rangle$

Cioè il 3) è la più generica combinazione possibile degli stati con  $m = 0$  e il 4) è il suo ortogonale.

## 9.2 Effetti delle dimensioni finite del nucleo su un atomo idrogenoide

I livelli energetici e gli stati stazionari dell'atomo di idrogeno sono stati studiati considerando il nucleo come una carica puntiforme che genera un potenziale Coulombiano che va come  $1/r$ , però nella realtà non è così. Il nucleo non è affatto puntiforme, ma anzi la sua carica occupa un volume dell'ordine di  $10^{-15} m$  e questo modifica il potenziale sentito dall'elettrone. Per studiare gli effetti della finitezza delle dimensioni del nucleo sui livelli energetici è possibile modellizzare il nucleo in diversi modi, tre dei quali sono:

1. Il nucleo è una sfera carica uniformemente con raggio  $R \ll a_0$
2. Il nucleo è una superficie sferica con la carica distribuita uniformemente sulla superficie
3. Il nucleo è un guscio sferico caricato uniformemente, con raggio interno  $R_1$  e raggio esterno  $R_2$

Trattiamo il caso 1.

### 9.2.1 Identificazione dell'Hamiltoniana

Applicando la Legge di Gauss per il campo elettrico si ricava il potenziale generato da una sfera uniformemente carica:

$$V(r) = -Zq \int \mathbf{E} \cdot d\mathbf{r} = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{r} & r \geq R \\ \frac{Ze^2}{2R^3} (r^2 - 3R^2) & r \leq R \end{cases}$$

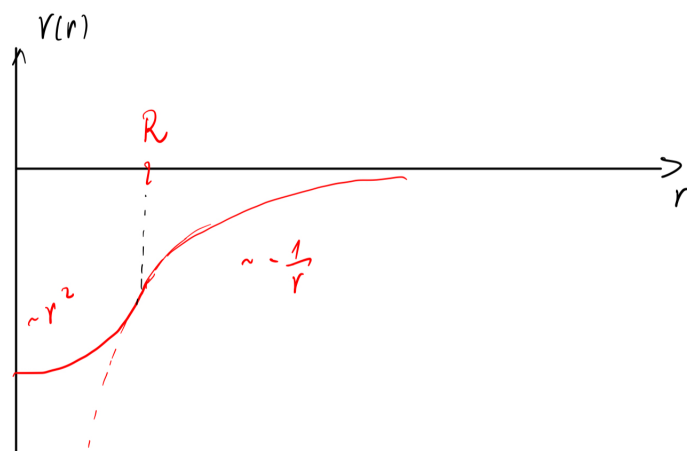


Figura 9.2.1: Potenziale generato da una sfera uniformemente carica

A questo punto possiamo scrivere l'Hamiltoniana del sistema:

$$\hat{H} = -\frac{\nabla^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} + \left[ \frac{Ze^2}{2R^3} (r^2 - 3R^2) + \frac{Ze^2}{r} \right] \theta(R - r)$$

Scrivendola in questa forma è facile utilizzare la notazione usata fin ora. Diciamo quindi che

$$\hat{H}_0 = -\frac{\nabla^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} \quad \text{e} \quad \hat{H}_P = \left[ \frac{Ze^2}{2R^3} (r^2 - 3R^2) + \frac{Ze^2}{r} \right] \theta(R - r)$$

Si noti che la parte perturbativa rappresenta proprio la differenza tra il potenziale effettivo e quello generato da una carica puntiforme.

### 9.2.2 Calcolo della correzione al primo ordine

Ci occupiamo di studiare gli effetti solo sullo stato fondamentale, che non è degenere. La sua rappresentazione sullo spazio delle coordinate (sferiche) è

$$\langle r \vartheta \varphi | 100 \rangle = R_{10}(r) Y_0^0(\vartheta, \varphi)$$

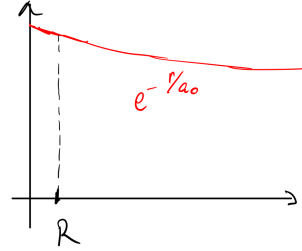
Quindi siamo pronti a calcolare la correzione

$$\begin{aligned} E_1^{(1)} &= \langle 100 | \hat{H}_P | 100 \rangle = \\ &= \int_0^\infty dr r^2 \int d\Omega H_P |R_{10}(r) Y_0^0(\vartheta, \varphi)|^2 = \\ &= 4 \frac{Z^3}{a_0^3} \int_0^R dr e^{Zr/a_0} Z e^2 \left[ \frac{1}{2R^2} (r^4 - 3R^2 r^2) + r \right] \end{aligned}$$

Dove abbiamo fatto uso del fatto che

- $\int d\Omega |Y_0^0(\vartheta, \varphi)|^2 = \langle 00 | 00 \rangle = 1$
- $R_{10} = 2 \sqrt{\frac{Z^3}{a_0^3}} e^{Zr/a_0}$

Ricordiamo che  $R \approx 10^{-15} m$  e  $a_0 \approx 10^{-10} m$ , quindi nell'intervallo  $(0, R)$  ci stiamo spostando "poco" dall'origine dal punto di vista dell'esponenziale. Allora è ragionevole risolvere l'integrale considerando l'esponenziale come costante in questa regione. Intanto ridefiniamo la variabile di integrazione come  $x = r/R$ .



$$\begin{aligned} E_1^{(1)} &= 4 \frac{Z^3}{a_0^3} Z e^2 R \int_0^1 dx \left[ \frac{1}{2R^3} (x^4 R^4 - 3R^4 x^2) + xR \right] = 2 \frac{Z^3}{a_0^3} Z e^2 R^2 \int_0^1 dx (x^4 - 3x^2 + 2x) = \\ &= 2 \frac{Z^3}{a_0^3} Z e^2 R^2 \left[ \frac{x^5}{5} - x^3 + x^2 \right]_0^1 = \frac{2}{5} \frac{Z^4 e^2 R^2}{a_0^3} \end{aligned}$$

Ora, introducendo  $E_0 = \frac{e^2}{2a_0}$  si ottiene

$$E_{100}^{(1)} = \frac{4}{5} Z^4 E_0 \left( \frac{R}{a_0} \right)^2$$

Ricordando che  $R/a_0 \approx 10^{-5}$  si può osservare che la correzione al primo ordine utilizzando questo modello di nucleo è molto piccola nel caso dell'atomo di idrogeno ( $Z = 1$ ). L'effetto è molto più intenso per ioni idrogenoidi più pesanti, dato che dipende dalla quarta potenza del numero atomico.



## Capitolo 10

# Struttura fine e iperfine dell'atomo di idrogeno

Le forze di maggiore intensità all'interno degli atomi sono quelle Coulombiane. Sono trattate scegliendo come hamiltoniana per l'atomo di idrogeno la seguente:

$$\hat{H}_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r) \quad \text{con} \quad V(r) = -\frac{e^2}{r}$$

In realtà, questa espressione è solo approssimata, infatti non tiene conto di altri effetti, come per esempio quelli relativistici e quelli dovuti allo spin dell'elettrone. Inoltre, non è ancora stato introdotto lo spin del protone.

Nella realtà dei fatti, questi errori sono molto piccoli, ma nonostante questo l'accuratezza degli esperimenti di spettroscopia ha reso possibile l'osservazione di fenomeni non spiegabili con questa hamiltoniana. In questo capitolo verranno introdotti dei termini correttivi che daranno spiegazione della cosiddetta **struttura fine** dell'atomo di idrogeno. Un piccolo paragrafo sarà dedicato ai termini di **struttura iperfine**, la cui origine non sarà dimostrata in modo formale. Alla fine verrà utilizzato il metodo perturbativo per valutare gli effetti dei termini di struttura fine sullo spettro atomico degli atomi idrogenoidi.

### 10.1 La struttura fine

#### 10.1.1 Effetti relativistici: il termine cinetico

##### Origine fisica

Partiamo dall'espressione relativistica per una particella classica di massa a riposo  $m$  e momento  $\mathbf{p}$ :

$$E = c\sqrt{p^2 + m^2c^2} = mc^2 \left[ 1 + \left( \frac{p}{mc} \right)^2 \right]^{1/2}$$

e ricordiamo che  $p/mc \ll 1$ , quindi effettuiamo un'espansione di Taylor

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

In aggiunta all'energia a riposo ( $mc^2$ ) e all'energia cinetica non relativistica ( $p^2/2m$ ) troviamo il cosiddetto **TERMINE CINETICO** della struttura iperfine

$$\hat{H}_K = -\frac{p^4}{8m^3c^2}$$

## Ordine di grandezza

Per valutare l'importanza di questo termine calcoliamone il rapporto con  $\hat{H}_0$ :

$$\frac{\hat{H}_K}{\hat{H}_0} = \frac{\frac{p^4}{8m^3c^2}}{\frac{p^2}{2m}} \simeq \left(\frac{p}{mc}\right)^2 = \left(\frac{mv}{mc}\right)^2 = \left(\frac{v}{c}\right)^2 = \alpha^2 \simeq \left(\frac{1}{137}\right)^2$$

Quindi  $\hat{H}_K$  è del **secondo ordine in  $\alpha$  rispetto a  $\hat{H}_0$** .

### 10.1.2 Spin dell'elettrone: il termine spin-orbita

#### Origine fisica

L'elettrone possiede la proprietà intrinseca dello spin, per cui si comporta come un piccolo magnete con momento

$$\boldsymbol{\mu} = g \frac{q}{2m} \mathbf{S}$$

L'elettrone si muove con velocità  $\mathbf{v}$  nel campo elettrostatico  $\mathbf{E}$  generato dal protone, quindi nel sistema di riferimento dell'elettrone c'è un campo magnetico  $\mathbf{B}'$  dato da:

$$\mathbf{B}' = -\frac{1}{c^2} \mathbf{v} \wedge \mathbf{E}$$

al primo ordine in  $v/c$ . Di conseguenza, l'elettrone ha un'energia potenziale

$$\mathcal{E}_P = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}' \quad (10.1.1)$$

Ora riscriviamo il campo elettrico  $\mathbf{E}$ :

$$q\mathbf{E} = -\frac{dV(r)}{dr} \frac{\mathbf{r}}{r} \implies \mathbf{E} = -\frac{1}{q} \frac{dV(r)}{dr} \frac{\mathbf{r}}{r}$$

Inserendo in (10.1.1) si ottiene

$$\mathcal{E}_P = -g \frac{q}{2m} \mathbf{S} \cdot \frac{1}{c^2} (\mathbf{v} \wedge \mathbf{r}) \frac{1}{q} \frac{dV(r)}{dr} \frac{1}{r} = \frac{g}{2m^2 c^2} (\mathbf{r} \wedge m\mathbf{v}) \cdot \mathbf{S} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr}$$

Da cui possiamo concludere che

$$\mathcal{E}_P = \frac{g}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$$

In realtà in questo calcolo manca un termine di correzione che nasce per ragioni puramente cinematiche, cioè dalla **precessione di Thomas**, la quale causa un contributo all'energia potenziale di questa forma:

$$\mathcal{E}_P^T = \mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\omega}_T \quad \text{con} \quad \boldsymbol{\omega}_T = -\frac{1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \mathbf{L}$$

In definitiva, tenendo conto di questo effetto e sostituendo  $V(r) = -e^2/r$ , si ottiene il **TERMINE DI INTERAZIONE SPIN-ORBIT**:

$$H_{SO} = \frac{g-1}{2m^2 c^2} \frac{e^2}{r^3} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$$

### Ordine di grandezza

In questo caso confrontiamo  $H_{SO}$  con la parte di energia potenziale di  $\hat{H}_0$  e, ricordando che sia il momento angolare orbitale che quello di spin sono dell'ordine di  $\hbar$  otteniamo:

$$\frac{H_{SO}}{H_0} = \frac{\frac{1}{m^2 c^2} \frac{e^2}{r^3} \hbar^2}{\frac{e^2}{r}} = \left( \frac{\hbar}{mcr} \right)^2$$

Ma  $r \simeq a_0 = \hbar^2 / me^2$  quindi

$$\frac{H_{SO}}{H_0} = \frac{e^4}{\hbar^2 c^2} = \alpha^2$$

Anche in questo caso, la correzione è al secondo ordine in  $\alpha$  rispetto ad  $\hat{H}_0$ .

### 10.1.3 Termine di Darwin

#### Origine fisica

Questo termine si ottiene facendo il limite non relativistico della Equazione di Dirac e quindi non verrà trattato in queste note. Il termine vale

$$\frac{\hbar^2}{8m^2 c^2} \nabla^2 V(r) = -\frac{e^2 \hbar^2}{8m^2 c^2} \nabla^2 \left( \frac{1}{r} \right)$$

E usando il fatto che il Laplaciano di  $1/r$  è uguale a  $-4\pi\delta(r)$  si ottiene

$$H_D = \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m^2 c^2} \delta^3(\mathbf{r})$$

### Ordine di grandezza

Per stimare le dimensioni di questo termine calcoliamo in valore medio su un generico stato atomico

$$\langle H_D \rangle = \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m^2 c^2} |\psi(0)|^2 \quad (10.1.2)$$

Quindi il termine di Darwin influenza solo gli elettroni  $s$ , cioè quelli con  $l = 0$ , che sono gli unici ad avere funzione d'onda valutata nell'origine diversa da 0 (Si ricorda che  $R_{nl}(r)$  va come  $r^l$  per  $r$  piccolo). L'ordine di grandezza di  $|\psi(0)|^2$  può essere stimato imponendo che l'integrale del modulo quadro della funzione d'onda su un volume dell'ordine di  $a_0^3$  sia 1. La parte esponenziale si annulla velocemente quindi la funzione può essere considerata costante in questo volume:

$$\int_0^{a_0} d^3r |\phi(r)|^2 \simeq 1 \simeq |\phi(0)|^2 \int_0^{a_0} d^3r \simeq |\phi(r)|^2 a_0^3$$

Quindi, inserendo in (10.1.2)

$$H_D \simeq \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m^2 c^2} \frac{1}{a_0^3} = \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m^2 c^2} \left( \frac{me^2}{\hbar^2} \right)^3 = mc^2 \alpha^4$$

e quindi

$$\frac{H_D}{H_0} = \frac{mc^2 \alpha^4}{mc^2 \alpha^2} = \alpha^2$$

Come gli altri due termini di struttura fine.

## RIASSUNTO: HAMILTONIANA DELLA STRUTTURA FINE

$$H_F = -\frac{p^4}{8m^3c^2} + \frac{g-1}{2m^2c^2} \frac{e^2}{r^3} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} + \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m^2c^2} \delta^3(\mathbf{r})$$

Ogni termine aggiuntivo di struttura fine è al **secondo ordine in  $\alpha$  rispetto a  $H_0$**

## 10.2 La struttura iperfine

### 10.2.1 Origine fisica

L'origine dei termini di struttura iperfine risiedono nel fatto che anche il **protone** ha spin (1/2) e di conseguenza ha un **momento magnetico** e di conseguenza l'elettrone ci interagirà. Sia  $\mathbf{I}$  l'osservabile corrispondente allo spin del protone. Il corrispondente momento magnetico è

$$\mathbf{M}_I = g_p \frac{q}{2m_p} \mathbf{I}$$

Il rapporto giromagnetico del protone vale:  $g_p \simeq 5.585$ . La principale differenza con il momento magnetico dell'elettrone è che  $m_p \simeq 2000m_e$  e quindi gli effetti del magnetismo nucleare sono molto più deboli rispetto a quelli del magnetismo elettronico.

### 10.2.2 Termine di interazione con campo magnetico

L'elettrone è una carica in moto, per cui interagisce con il campo magnetico generato dal momento del protone. Il termine che rende conto di questa interazione è

$$-\frac{\mu_0}{4\pi} \frac{q}{m_e r^3} \mathbf{L} \cdot \mathbf{M}_I$$

### 10.2.3 Termine di interazione dipolo-dipolo

L'elettrone ha un momento di dipolo magnetico, per cui interagisce con quello del protone. Il termine di interazione è

$$-\frac{\mu_0}{4\pi} \frac{1}{r^3} [3(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{n})(\mathbf{M}_I \cdot \mathbf{n}) - \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{M}_I]$$

dove  $\mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}$  è il versore che unisce protone ed elettrone.

### 10.2.4 Termine di contatto di Fermi

Nella realtà il protone non è puntiforme e il campo magnetico al suo interno è diverso da quello generato dal suo momento magnetico. Questo ultimo termine rende conto dell'interazione tra il momento magnetico dell'elettrone e il campo magnetico all'interno del protone. Vale

$$-\frac{\mu_0}{4\pi} \frac{8\pi}{3} \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{M}_I \delta^3(\mathbf{r})$$

## Ordine di grandezza

L'ordine di grandezza dei primi due termini è

$$\frac{q^2 \hbar^2}{m_p m r^3} \frac{\mu_0}{4\pi} \simeq \frac{e^2 \hbar^2}{m_p m c^2} \frac{1}{r^3}$$

Confrontandoli con il termine spin-orbit dell'hamiltoniana di struttura fine

$$H_{SO} = \frac{e^2 \hbar^3}{m^2 c^2} \frac{1}{r^3} \Rightarrow \frac{H_{HF}}{H_{SO}} = \frac{m_p}{m} \simeq \frac{1}{2000}$$

Il termine di contatto di Fermi può essere confrontato con il termine di Darwin per far vedere che il rapporto è lo stesso.

### RIASSUNTO: HAMILTONIANA DI STRUTTURA IPERFINE

$$H_{HF} = -\frac{\mu_0}{4\pi} \left\{ \frac{q}{m_e r^3} \mathbf{L} \cdot \mathbf{M}_I + \frac{1}{r^3} [3(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{n})(\mathbf{M}_I \cdot \mathbf{n}) - \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{M}_I] + \frac{8\pi}{3} \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{M}_I \delta^3(\mathbf{r}) \right\}$$

## Capitolo 11

# Teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo

### 11.1 Introduzione del problema

Fino ad ora abbiamo trattato le perturbazioni stazionarie, ma nel mondo reale si vuole anche capire come i sistemi quantistici interagiscono con il resto del mondo, e questo spesso avviene tramite interazione che hanno una durata temporale e che addirittura possono variare nel tempo. Il nostro obiettivo, in particolare, sarà quello di sviluppare una teoria che ci permetta di studiare l'interazione tra materia e radiazione. Cominciamo.

Come al solito, partiamo dall'ipotesi di saper risolvere il problema dell'Hamiltoniana imperturbata:

$$\hat{H}_0 |\varphi_n\rangle = E_n^{(0)} |\varphi_n\rangle$$

Per semplicità trattiamo solo il caso in cui

1. Lo spettro è discreto
2. Gli stati non sono degeneri

Ma la generalizzazione delle formule è facilmente ottenibile. Ovviamente  $\hat{H}_0$  non dipende dal tempo. All'istante  $t = 0$  viene accessa una perturbazione:

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}_P(t) \quad \text{con} \quad \begin{cases} \hat{H}_P(t) = \lambda \hat{W}(t) \\ \lambda \ll 1 \end{cases}$$

Assumiamo che al tempo  $t = 0$  il sistema si trovasse in un **autostato di  $\hat{H}_0$**  che chiamiamo  $|\varphi_i\rangle$ . Appena viene accessa la perturbazione il sistema evolve: in generale, non è detto che per  $t > 0$   $|\varphi_i\rangle$  sia un autostato della nuova Hamiltoniana.

**CRITERIO:** a seguito della perturbazione il sistema potrebbe finire su un altro autostato di  $\hat{H}_0$   $|\varphi_f\rangle$  (finale) e noi siamo interessati a calcolare la probabilità  $\mathcal{P}_{if}(t)$  che questo accada al tempo  $t$ . In altre parole, vogliamo studiare le **transizioni** che possono essere indotte dalla perturbazione **tra gli stati stazionari imperturbati**.

Dato che  $\hat{H} = \hat{H}(t)$  non esistono stati stazionari, quindi bisogna procedere all'utilizzo dell'equazione di Schrödinger completa.

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = (\hat{H}_0 + \lambda \hat{W}(t)) |\psi(t)\rangle \\ |\psi(0)\rangle = |\varphi_i\rangle \end{cases} \quad (11.1.1)$$

Vogliamo quindi calcolare

$$\mathcal{P}_{if}(t) = |\langle \varphi_f | \psi(t) \rangle|^2 \quad (11.1.2)$$

Tutto il problema quindi consiste nel risolvere l'equazione differenziale (11.1.1) con la sua condizione iniziale. Attenzione al fatto che qui trattiamo il caso in cui il sistema si trova in un autostato a  $t = 0$ , ma potrebbe anche succedere che si trovi in una combinazione generica di autostati. Torneremo su questo più avanti.

## 11.2 Soluzione approssimata dell'equazione di Schrodinger: metodo generale

Conosciamo già la soluzione dell'equazione differenziale nel caso di sistema imperturbato:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} |\varphi_n\rangle \quad \text{per } \lambda = 0$$

Allora ipotizziamo che i coefficienti  $c_n$  dipendano esplicitamente dal tempo e ricerchiamo la soluzione in questa famiglia

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} |\varphi_n\rangle \quad \text{per } \lambda \neq 0 \quad (11.2.1)$$

Inseriamo in (11.1.1)

$$\left[ \sum_n i\hbar \frac{dc_n(t)}{dt} + \cancel{c_n(t)E_n} \right] e^{-iE_n t/\hbar} |\varphi_n\rangle = \sum_n c_n(t) [\cancel{E_n} + \lambda \hat{W}(t)] e^{-iE_n t/\hbar} |\varphi_n\rangle$$

Come si vede, per nostra fortuna il "grosso" si semplifica. Rimane solo la parte perturbativa. Quindi partendo da

$$\sum_k i\hbar \frac{dc_k(t)}{dt} e^{-iE_k t/\hbar} |\varphi_k\rangle = \sum_k c_k(t) \lambda \hat{W}(t) e^{-iE_k t/\hbar} |\varphi_k\rangle$$

appliciamo  $\langle \varphi_n |$  a i due membri dell'equazione e ricordiamo che  $\langle \varphi_n | \varphi_k \rangle = \delta_{nk}$ :

$$i\hbar \frac{dc_n(t)}{dt} e^{-iE_n t/\hbar} = \sum_k c_k(t) \lambda \langle \varphi_n | \hat{W}(t) | \varphi_k \rangle e^{-iE_k t/\hbar}$$

Allora definendo

$$\boxed{W_{nk}(t) \equiv \langle \varphi_n | \hat{W}(t) | \varphi_k \rangle} \quad \text{e} \quad \boxed{\omega_{nk} = \frac{E_n - E_k}{\hbar}}$$

si ottiene:

$$\boxed{i\hbar \frac{dc_n(t)}{dt} = \lambda \sum_k e^{i\omega_{nk} t} W_{nk}(t) c_k(t)} \quad (11.2.2)$$

Questa equazione in realtà rappresenta un **sistema potenzialmente infinito di equazioni differenziali**. Fino ad ora è stato tutto esatto, ma adesso entra in gioco il metodo approssimativo.

Dato che  $\lambda \ll 1$  cerchiamo una soluzione  $c_n(t)$  in **serie di potenze**:

$$c_n(t) = c_n^{(0)} + \lambda c_n^{(1)}(t) + \lambda^2 c_n^{(2)}(t) + \dots \quad (11.2.3)$$

Inserendo nella (11.2.2) ed eguagliando gli stessi ordini:

**Ordine 0**  $\rightarrow \lambda^0$

$$i\hbar \frac{dc_n^{(0)}}{dt} = 0 \quad \Rightarrow \quad \boxed{c_n^{(0)} = c_n^{(0)} = \text{cost}} \quad (11.2.4)$$

**Ordine  $r$  generico**  $\rightarrow \lambda^r$

$$i\hbar \frac{dc_n^{(r)}}{dt} = \sum_k e^{i\omega_{nk}t} W_{nk}(t) c_k^{(r-1)}(t) \quad (11.2.5)$$

Diventa un'equazione alla ricorsione: conoscendo  $c_n^{(r-1)}$  si può risalire a  $c_n^{(r)}$ .

## 11.3 Soluzione al primo ordine

Abbiamo assunto che per ogni  $t < 0$  il vettore di stato è  $|\psi(t)\rangle = |\varphi_i\rangle$ , da cui segue che tra tutti i coefficienti  $c_n(t)$  solo quello con  $n = i$  è diverso da 0, e in particolare vale 1:  $c_n(t) = \delta_{ni}$ .

Al tempo  $t = 0$  viene accesa la perturbazione. La funzione  $\lambda \hat{W}(t)$  potrebbe anche avere un salto da 0 a  $\lambda \hat{W}(0)$ , ma in ogni caso la d'onda deve rimanere continua in  $t = 0$

$$\Rightarrow c_n(0) = \delta_{ni} \quad \text{PER TUTTI GLI ORDINI IN } \lambda$$

Quindi utilizzando la (11.2.4) è possibile trovare il coefficiente 0-esimo dell'espansione in serie di potenze

$$\boxed{c_n^{(0)} = c_n(0) = \delta_{ni}}$$

Per trovare il coefficiente al primo ordine utilizziamo la (11.2.5) con  $r = 1$ :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dc_n^{(1)}(t)}{dt} &= \sum_k e^{i\omega_{nk}t} W_{nk}(t) c_k^{(0)} = e^{i\omega_{ni}t} W_{ni}(t) \\ \Rightarrow \quad &\boxed{c_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i\omega_{ni}t'} W_{ni}(t')} \end{aligned} \quad (11.3.1)$$

### 11.3.1 Probabilità di transizione

Usando (11.1.2) e (11.2.1) scriviamo la probabilità di transizione:

$$\mathcal{P}_{if} = |c_f(t)|^2 = |c_f^{(0)}(t) + \lambda c_f^{(1)}(t) + \lambda^2 c_f^{(2)}(t) + \dots|^2$$

Ma in generale a noi interessa il caso  $|\psi_i\rangle \neq |\psi_f\rangle$ , cioè ci vogliamo occupare delle transizioni indotte dalla perturbazione tra due stati stazionari **differenti** di  $\hat{H}_0$ . In questo caso dalla (11.2.4) abbiamo  $c_f^{(0)}(t) = 0$  quindi

$$\boxed{\mathcal{P}_{if}(t) = \lambda^2 |c_f^{(1)}(t)|^2 + \mathcal{O}(\lambda^3) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' e^{i\omega_{fi}t'} \langle \varphi_f | \hat{H}_P | \varphi_i \rangle \right|^2 + \mathcal{O}(\lambda^3)} \quad (11.3.2)$$

## 11.4 Soluzione al secondo ordine

Per trovare le correzioni al secondo ordine si prende la (11.3.1) e la si inserisce nella (11.2.5) (utilizzando  $r = 2$ )



$$c_n^{(2)}(t) = \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \sum_k \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' e^{i\omega_{nk}t'} W_{nk}(t') e^{i\omega_{ki}t''} W_{ki}(t'') \quad (11.4.1)$$

Dei commenti su questa formula verranno fatti più avanti.

## Capitolo 12

# Applicazioni della teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo

In questo capitolo analizziamo con dettaglio gli effetti di una perturbazione costante e di una sinusoidale, per poi finire con la trattazione dell'interazione tra un'onda elettromagnetica classica ed un atomo quantistico.

### 12.1 Perturbazione costante

Supponiamo di perturbare il nostro sistema con un potenziale del tipo:

$$V(t) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ V & t \geq 0 \end{cases} \quad \text{chiamata talvolta "SUDDEN APPROXIMATION"}$$

Cerchiamo le probabilità di transizione tra gli stati utilizzando la teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo.

$$c_n^{(0)} = \delta_{ni}$$
$$c_n^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \langle \varphi_n | \hat{V} | \varphi_i \rangle \int_0^t dt' e^{i\omega_{ni}t'} = \frac{V_{ni}}{E_n - E_i} (1 - e^{i\omega_{ni}t})$$

Quindi la probabilità di transizione:

$$\mathcal{P}_{in}(t) = |c_n^{(1)}(t)|^2 = \left| \frac{V_{ni}}{E_n - E_i} \right|^2 \left| 2i e^{i\omega_{ni}t/2} \frac{e^{-i\omega_{ni}t/2} - e^{i\omega_{ni}t/2}}{2i} \right|^2 = \frac{4|V_{ni}|^2}{(E_n - E_i)^2} \sin^2 \left( \frac{E_n - E_i}{2\hbar} t \right) =$$

$$\boxed{\mathcal{P}_{in}(t) = \frac{|V_{ni}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2 \left( \frac{\omega_{ni}}{2} t \right)}{\left( \frac{\omega_{ni}}{2} \right)^2}}$$

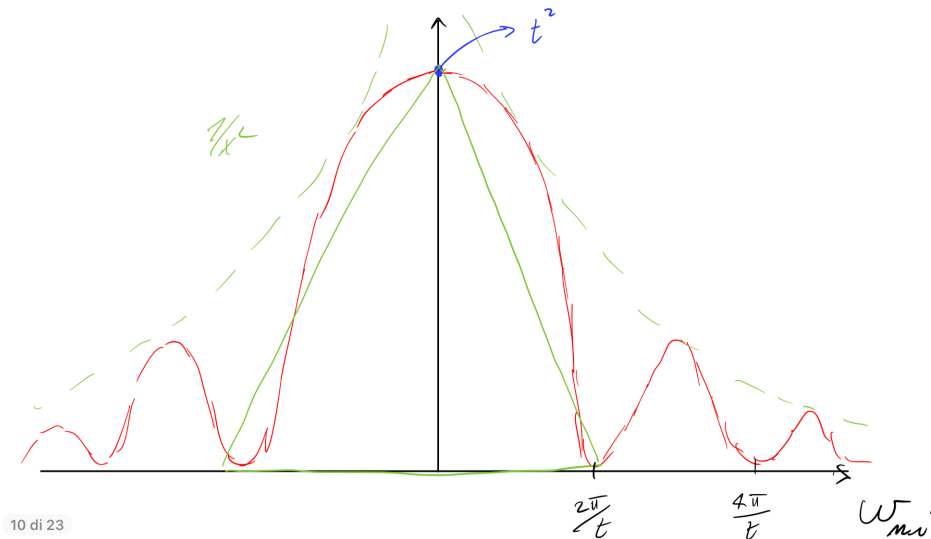


Figura 12.1.1: Probabilità di transizione per perturbazione costante

### Commento - limiti di validità della teoria perturbativa

Fino ad'ora non abbiamo discusso quali sono i casi in cui la teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo è valida, ma la formula ricavata qua sopra ci dà qualche informazione, infatti

$$\text{Probabilità totale} = \text{Area sottesa} \simeq \frac{1}{2} t^2 \cdot \frac{2\pi}{t} \simeq t$$

dato che possiamo stimarla come l'area del triangolo verde in figura (12.1). Questo risultato ovviamente è un problema, dato che secondo questo modello sembra che la probabilità possa crescere indefinitamente con il tempo  $t$ . Allora si vede che **non può valere per tempi grandi**. Successivamente riusciremo a dare una descrizione più quantitativa a questa frase.

Inoltre, la curva si chiude all'aumentare del tempo e quindi **la probabilità diventa piccata attorno al valore  $\omega_{ni} = 0$** . In particolare, per  $t \rightarrow \infty$ ,  $\mathcal{P} \rightarrow \delta(\omega_{ni}) = \delta(\omega_n - \omega_i)$

## 12.2 Perturbazione sinusoidale

### Introduzione

La perturbazione sinusoidale più generica è della forma

$$\hat{W}(t) = \hat{A}e^{i\omega t} + \hat{A}^\dagger e^{-i\omega t}$$

con  $\omega > 0$ ,  $\hat{A}$  non dipendente dal tempo e  $\hat{W}(t)$  hermitiano. Come sopra, calcoliamo le correzioni al primo ordine:

$$c_n^{(1)} = \frac{1}{i\hbar} \left[ A_{ni} \int_0^t dt' e^{i(\omega_{ni} + \omega)t'} + A_{ni}^\dagger \int_0^t dt' e^{i(\omega_{ni} - \omega)t'} \right]$$

Gli integrali sono della stessa forma di quello calcolato nel caso di perturbazione costante. Si ricorda che  $A_{ni}^\dagger = (A_{ni})^*$ .

$$c_n^{(1)} = \frac{1}{\hbar} \left[ \frac{1 - e^{i(\omega_{ni} + \omega)t}}{\omega_{ni} + \omega} A_{ni} + \frac{1 - e^{i(\omega_{ni} - \omega)t}}{\omega_{ni} - \omega} A_{ni}^\dagger \right] =$$

$$= \frac{1}{\hbar} \left[ -A_{ni} e^{i(\omega_{ni} + \omega)t/2} i \frac{\sin\left(\frac{\omega_{ni} + \omega}{2} t\right)}{\frac{\omega_{ni} + \omega}{2}} - A_{ni}^\dagger e^{i(\omega_{ni} - \omega)t/2} i \frac{\sin\left(\frac{\omega_{ni} - \omega}{2} t\right)}{\frac{\omega_{ni} - \omega}{2}} \right]$$

Si ricorda che stiamo studiando le transizioni tra i due stati  $|\varphi_i\rangle$  e  $|\varphi_n\rangle$  e la trattazione è differente se si parla di stati discreti o continui, per cui separiamo i due casi.

### 12.2.1 Accoppiamento con stati discreti: la risonanza

La probabilità di transizione è

$$\mathcal{P}_{in} = |c_n^{(1)}|^2$$

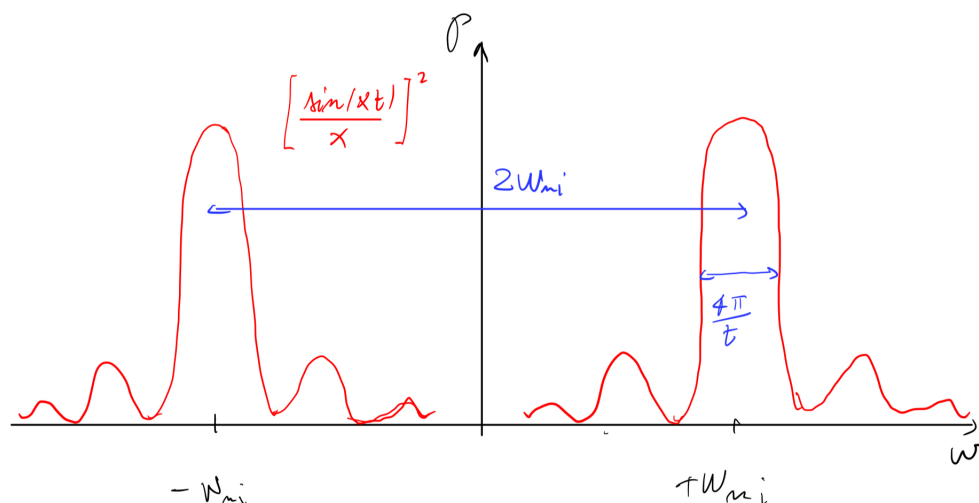


Figura 12.2.1: Probabilità di transizione per perturbazione sinusoidale

Ci si ritrova nella condizione di dover fare il modulo quadro di una somma di numeri complessi (come interferenza):

$$|z_1 + z_2|^2 = |z_1|^2 + |z_2|^2 + 2\text{Re}\{z_1 z_2^*\}$$

ma come si vede dalla figura (12.2.1), dato che i picchi di  $|z_i|^2$  hanno apertura  $\omega = \frac{4\pi}{t}$ , per tempi sufficientemente grandi la parte di "interferenza" va morendo. Quindi **la probabilità è quasi tutta su  $+\omega_{ni}$  e  $-\omega_{ni}$ .**

Si presenta quindi un fenomeno di risonanza quando la frequenza della perturbazione coincide con la frequenza di Bohr associata agli stati  $|\varphi_n\rangle$  e  $|\varphi_i\rangle$ . Allora ci sono due possibilità:

$$E_n = E_i + \hbar\omega \quad \text{nel qual caso si parla di ASSORBIMENTO}$$

$$E_n = E_i - \hbar\omega \quad \text{nel qual caso si parla di EMISSIONE STIMOLATA}$$

Nel primo caso il sistema si sposta in un livello energetico superiore tramite l'assorbimento di un quanto energetico  $\hbar\omega$ . Nel secondo caso la perturbazione stimola il passaggio del sistema ad un livello più basso tramite l'emissione di un quanto energetico  $\hbar\omega$ .

## Commenti - studio della dipendenza della probabilità dal tempo

Mettiamoci nel caso in cui

$$W(t) = W \sin \omega t = \frac{W}{2i}(e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}) \quad \text{con } \omega \simeq \omega_{ni}$$

allora

$$\mathcal{P}_{i \rightarrow n}(t) = \frac{|W_{ni}|^2}{4\hbar^2} \frac{\sin^2 \frac{\Delta\omega}{2} t}{\left(\frac{\Delta\omega}{2}\right)^2} \quad (12.2.1)$$

1. **Range di validità della teoria perturbativa al primo ordine.** Nel caso in esame  $\Delta\omega = \omega - \omega_{ni} \simeq 0$ , quindi

$$\mathcal{P}_{i \rightarrow n}(t) = \frac{|W_{ni}|^2}{4\hbar^2} t^2 \quad (12.2.2)$$

Vogliamo che questo oggetto sia  $\ll 1$  dato che è una probabilità e il suo integrale deve fare 1. Allora si vede che questa prima approssimazione è valida per

$$t \ll \frac{\hbar}{|W_{ni}|} \quad (12.2.3)$$

Per tempi grandi bisogna proseguire l'espansione con gli ordini successivi. Inoltre, la separazione tra i picchi vale  $2\omega_{ni}$  e affinché i nostri ragionamenti siano validi è necessario che questo valore sia molto maggiore dell'apertura dei picchi, cioè

$$2\omega_{ni} \gg \frac{4\pi}{t} \implies t \gg \frac{1}{\omega_{ni}} \quad (12.2.4)$$

Quindi, mettendo insieme le formule (12.2.3) e (12.2.4) si ottiene il **RANGE DI VALIDITA'**

$$\boxed{\frac{1}{\omega} \ll t \ll \frac{\hbar}{|W_{ni}|}}$$

quando  $\omega \simeq \omega_{ni}$ .

2. **Correzione alla formula** (12.2.1). Supponiamo di trattare un sistema a due livelli, come per esempio l'esperimento di Rabi sulla Risonanza Magnetica Nucleare. In questo caso è possibile diagonalizzare  $\hat{H}$  esattamente e infatti abbiamo trovato la **FORMULA DI RABI**:

$$\mathcal{P}_{i \rightarrow n}(t) = \frac{|W_{ni}|^2}{|W_{ni}|^2 + \hbar^2 \Delta\omega^2} \sin^2 \left[ \sqrt{\frac{|W_{ni}|^2}{\hbar^2} + \Delta\omega^2} \frac{t}{2} \right]$$

che rappresenta la formula **ESATTA** per la probabilità di passaggio allo stato  $n$  tramite una perturbazione sinusoidale. Allora si vede che in realtà c'è **oscillazione tra gli stati**. Cioè ci sono degli istanti di tempo in cui la probabilità si annulla e altri in cui è massima.

### 12.2.2 Nuova interpretazione della relazione di indeterminazione energia-tempo

Ora siamo in grado di dare un'altra interpretazione alla relazione  $\Delta E \Delta t \geq \hbar$ .

Possiamo pensare alla perturbazione come l'effetto di uno strumento di misura per l'energia sul sistema. Infatti, è necessario utilizzare uno strumento *delicato abbastanza* da non influire troppo sul sistema, il cui effetto può essere quindi considerato una perturbazione. Per quanto piccola sia la perturbazione, c'è una probabilità non nulla di saltare su **infiniti stati**, cioè tutti quelli all'interno della campana centrata in  $\omega_{ni}$ , dato che non è una delta precisa ma ha un'apertura  $\Delta\omega \simeq \frac{2\pi}{\Delta t}$ ; su questi stati vale  $\Delta E \simeq \hbar \Delta\omega$ . Dalle ultime due espressioni si ricava

$$\Delta E \Delta t \simeq \hbar$$

Cioè è possibile misurare l'energia con una precisione che è **inversamente proporzionale al tempo di interazione** dello strumento con il sistema.

### 12.2.3 Accoppiamento con stati dello spettro continuo: la regola d'oro di Fermi

Se  $|\varphi_n\rangle \in$  spettro continuo di  $\hat{H}_0$ , allora  $|\langle\varphi_n|\varphi_i\rangle|^2$  rappresenta una DENSITA' DI PROBABILITA' e non una probabilità. Per fare PREVISIONE FISICHE si somma/integra.

#### Caso generale

Siano  $\{|\alpha\rangle\}$  degli stati del continuo, con "α"=insieme di indici. Ovviamente  $\langle\alpha|\alpha'\rangle = \delta(\alpha - \alpha')$  per l'ortonormalità. Vogliamo calcolare la probabilità che lo stato venga sbalzato in un certo dominio  $D_f$ :

$$|\psi(t)\rangle \longrightarrow D_f$$

dove il dominio  $D_f$  è un intervallo di stati "centrato" in  $|\alpha_f\rangle$ . Allora la probabilità del salto è:

$$\delta\mathcal{P}(\alpha_f) = \int_{\alpha \in D_f} d\alpha |\langle\alpha|\psi(t)\rangle|^2$$

Per evidenziare la dipendenza dall'energia, effettuiamo un cambio di variabile  $\alpha \mapsto E, \beta$ , dove  $\{E, \beta\}$  è un C.S.C.O. Allora la misura per integrare diventa

$$d\alpha = \rho(\beta, E) d\beta dE$$

Dove  $\rho(\beta, E)$  è la **densità degli stati finali**. Se chiamiamo  $\delta\beta_f$  e  $\delta E_f$  i range di valori che i parametri  $\beta$  e  $E$  possono assumere all'interno di  $D_f$ :

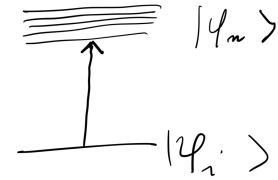
$$\delta\mathcal{P}(\alpha_f) = \int_{\substack{\beta \in \delta\beta_f \\ E \in \delta E_f}} d\beta dE \rho(\beta, E) |\langle\beta E|\psi(t)\rangle|^2$$

dove abbiamo sostituito  $|\alpha\rangle$  con  $|\beta, E\rangle$ .

#### La regola d'oro di Fermi

Lavoriamo ora con la **perturbazione costante**. Abbiamo trovato sopra che

$$|\langle\beta E|\psi(t)\rangle|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |\langle\beta E|\hat{W}|\varphi_i\rangle|^2 F\left(t, \frac{E - E_i}{\hbar}\right)$$



con

$$F(t, \omega) = \left[ \frac{\sin(\omega t/2)}{\omega/2} \right]^2$$

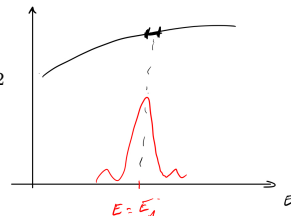
quindi

$$\delta\mathcal{P}(\alpha_f) = \frac{1}{\hbar^2} \int_{\substack{\beta \in \delta\beta_f \\ E \in \delta E_f}} d\beta dE \rho(\beta, E) |\langle \beta E | \hat{W} | \varphi_i \rangle|^2 F\left(t, \frac{E - E_i}{\hbar}\right)$$

ma per tempi sufficientemente grandi  $F$  si picca sempre di più, in particolare:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} F\left(t, \frac{E - E_i}{\hbar}\right) = \pi t \delta\left(\frac{E - E_i}{2\hbar}\right) = 2\pi\hbar t \delta(E - E_i)$$

Dall'altro lato, però, la maggior parte delle volte la funzione  $\rho(\beta, E) |\langle \beta E | \hat{W} | \varphi_i \rangle|^2$  **varia lentamente** rispetto all'oscillazione di  $F$  e in questo caso ha senso considerare  $F$  come una  $\delta$ -function. Inoltre, se  $\delta\beta_f$  è molto piccolo l'integrazione non è necessaria ed è possibile valutare l'integrando nel valore centrale. Si ottiene:



$$\begin{cases} \delta\mathcal{P}(\alpha_f) = \delta\beta_f \frac{2\pi}{\hbar} t |\langle \beta_f, E_f = E_i | \hat{W} | \varphi_i \rangle|^2 \rho(\beta_f, E_f = E_i) & \text{se } E_i \in \delta E_f \\ \delta\mathcal{P}(\alpha_f) = 0 & \text{se } E_i \notin \delta E_f \end{cases}$$

(12.2.5)

Abbiamo un'altra conferma del fatto che una perturbazione costante induce transizioni tra stati con eguale energia. N.B. l'espressione è **lineare in  $t$** . Ora introduciamo alcune quantità:

**TASSO DI TRANSIZIONE (TRANSITION RATE) - DENSITA' DI PROBABILITA' PER UNITA' DI TEMPO**

$$\delta\mathcal{W}(\varphi_i, \alpha_f) = \frac{d}{dt} \delta\mathcal{P}(\alpha_f)$$

**DENSITA' DI PROBABILITA' PER UNITA' DI TEMPO E PER UNITA' DI INTERVALLO DELLA VARIABILE  $\delta\beta_f$**

$$w(\varphi_i, \alpha_f) = \frac{\delta\mathcal{W}(\varphi_i, \alpha_f)}{\delta\beta_f}$$

che in questo caso è

$$w(\varphi_i, \alpha_f) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \beta_f, E_f = E_i | \hat{W} | \varphi_i \rangle|^2 \rho(\beta_f, E_f = E_i)$$

**PERTURBAZIONE COSTANTE**

Questa relazione è nota come **REGOLA D'ORO DI FERMI**.

**Perturbazione sinusoidale**

Se  $W$  è una perturbazione sinusoidale che accoppia uno stato  $|\varphi_i\rangle$  con un continuo di stati  $|\beta_f, E_f\rangle$  con energie  $E_f = E_i \pm \hbar\omega$  allora con gli stessi passaggi si ottiene

$$w(\varphi_i, \alpha_f) = \frac{\pi}{2\hbar} |\langle \beta_f, E_f = E_i \pm \hbar\omega | \hat{W} | \varphi_i \rangle|^2 \rho(\beta_f, E_f = E_i \pm \hbar\omega)$$

**PERTURBAZIONE SINUSOIDALE**

Si può dimostrare che uno stato discreto accoppiato ad un continuo di stati da una perturbazione costante fa sì che lo stato iniziale venga lasciato in modo irreversibile. In particolare la probabilità  $\mathcal{P}_{ii}(t)$  decresce esponenzialmente.

## 12.3 Commenti sulla correzione al secondo ordine (perturbazione costante)

Riprendiamo la formula (11.4.1) e commentiamola alla luce di quello ricavato qua sopra. Nel caso di perturbazione costante diventa:

$$c_n^{(2)}(t) = \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \sum_k W_{nk} W_{ki} \int_0^t dt' e^{i\omega_{nk}t'} \int_0^{t'} dt'' e^{i\omega_{ki}t''}$$

L'integrale in  $dt''$  dà origine al termine  $\frac{1}{i\omega_{ki}}(e^{i\omega_{ki}t'} - 1)$ , quindi

$$c_n^{(2)}(t) = \frac{i}{\hbar} \sum_k \frac{W_{nk}W_{ki}}{E_k - E_i} \int_0^t dt' (e^{i\omega_{ni}t'} - e^{i\omega_{nk}t'})$$

- Il termine  $e^{i\omega_{ni}t'}$  è lo stesso che compare nel coefficiente  $c_n^{(1)}$  e abbiamo visto che dà un contributo significativo solo quando  $E_f = E_i$ .
- Il termine  $e^{i\omega_{nk}t'}$  è **fortemente oscillante** se

$$\begin{aligned} E_k &\neq E_i \\ &\neq E_n \end{aligned}$$

Quindi sotto queste ipotesi l'unico termine importante nell'integrale è il primo (quello del I ordine). Allora il RATE DI TRANSIZIONE diventa:

$$w(\varphi_i, \alpha_f) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| W_{fi} + \sum_k \frac{W_{fk}W_{ki}}{E_k - E_i} \right|_{E_f=E_i}^2 \rho(\beta_f, E_f = E_i)$$

Il caso  $E_k = E_i$  diventa troppo complicato da trattare.

### Interpretazione

- Il primo termine nel modulo quadro rappresenta la **TRANSIZIONE DIRETTA (REALE)** tra due stati con uguale energia.
- Il secondo termine è di differente interpretazione. Le transizioni  $i \rightarrow k$  e  $k \rightarrow f$  sono dette **TRANSIZIONI VIRTUALI** e **non conservano l'energia**, che invece **si conserva globalmente**. Sono permesse se avvengono in  $\Delta t$  tali che  $\Delta E \geq \frac{\hbar}{\Delta t}$  dato che c'è questa incertezza sull'energia. Nota: questo fatto coincide con  $E^2 - p^2 \neq m^2$ .



# Parte III

# Appendici

# Appendice A

## Dimostrazioni varie

### A.1 Degenerazione dell'oscillatore armonico isotropo in 3D

I livelli energetici dell'oscillatore armonico isotropo in 3 dimensioni di frequenza  $\omega$  sono

$$E_n = \left(n + \frac{3}{2}\right) \hbar\omega$$

dove

$$n = n_x + n_y + n_z \quad (\text{A.1.1})$$

Vogliamo calcolare il grado di degenerazione  $g_n$  del livello  $n$  -esimo, che è uguale al numero di differenti terne  $\{n_x, n_y, n_z\}$  che soddisfano il vincolo (A.1.1). Procediamo così: fissato  $n$ , scegliamo prima  $n_x$  tra i seguenti valori:

$$n_x = 0, 1, 2, \dots, n$$

Fissato  $n_x$ , deve essere

$$n_y + n_z = n - n_x$$

Quindi ci sono  $(n - n_x + 1)$  possibilità per la coppia  $\{n_y, n_z\}$ :

$$\{n_y, n_z\} = \{0, n - n_x\}, \{1, n - n_x - 1\}, \{2, n - n_x - 2\}, \dots, \{n - n_x, 0\}$$

Allora il grado di degenerazione è

$$\begin{aligned} \boxed{g_n} &= \sum_{n_x=0}^n (n - n_x + 1) = (n + 1) \sum_{n_x=0}^n 1 - \sum_{n_x=0}^n n_x = \\ &= (n + 1)(n + 1) - \frac{1}{2}n(n + 1) = \frac{1}{2}(2n^2 + 4n + 2 - n^2 - n) = \frac{1}{2}(n^2 + 3n + 2) = \\ &= \boxed{\frac{1}{2}(n + 1)(n + 2)} \end{aligned}$$

## Appendice B

# Elettromagnetismo

### Ricorda

- il dipolo elettrico è definito come

$$\mathbf{p} = q\mathbf{d}$$

dove  $\mathbf{d}$  è il vettore che parte dalla carica negativa e arriva alla carica positiva.

- il dipolo magnetico è definito come

$$\boldsymbol{\mu} = ia\hat{\mathbf{n}}$$

dove  $a$  è l'area della spira e  $\hat{\mathbf{n}}$  il versore perpendicolare all'area e di verso individuato dalla regola della mano destra utilizzata rispetto al verso della corrente  $i$ .

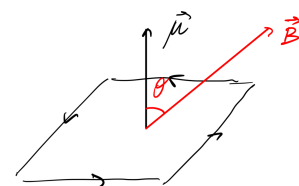
## B.1 Interazione tra dipolo magnetico e campo magnetico

### Momento torcente

Trattiamo un dipolo magnetico  $\boldsymbol{\mu}$  immerso in un campo magnetico esterno  $\mathbf{B}$ . Il dipolo viene modellizzato come una piccola spira quadrata di lato  $b$  percorsa da una corrente  $i$  in senso antiorario. La forza è data dalla legge di Laplace  $d\mathbf{F} = i d\mathbf{l} \wedge \mathbf{B}$ . Dato che tutti i tratti di circuito sono rettilinei si ottiene  $F = ibB$  e quindi è possibile calcolare il **momento torcente** agente sulla spira.

$$\tau = Fb \sin \vartheta = ib^2 B \sin \vartheta \quad \Rightarrow \quad \boxed{\tau = \boldsymbol{\mu} \wedge \mathbf{B}}$$

Dato che  $\boldsymbol{\mu} = ib^2 \hat{\mathbf{n}}$ .



### Energia potenziale

Poichè c'è un momento torcente, l'**energia meccanica** del sistema dipende dall'orientazione:  $dU_m = -\tau d\vartheta$ . Nell'intorno dell'equilibrio stabile ( $\vartheta = 0$ ) il momento di richiamo è discorde dallo scostamento:

$$\tau = -mB \sin \vartheta$$

Dunque:

$$U_m = \int_0^\vartheta d\vartheta mB \sin \vartheta = -mB \cos \vartheta + c$$

Quindi, dato che l'energia potenziale è definita a meno di una costante

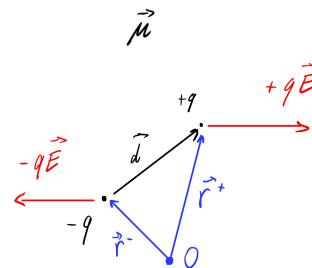
$$\boxed{U_m = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}}$$

## B.2 Interazione tra dipolo elettrico e campo elettrico

### Momento torcente

Il dipolo elettrico viene modellizzato come un sistema di due cariche uguali in modulo ma segno opposto ( $\pm q$ ) poste ad una distanza  $d$  l'una dall'altra. Quando viene immerso in un campo elettrico esterno si crea una coppia di forze che dà origine ad un momento torcente.

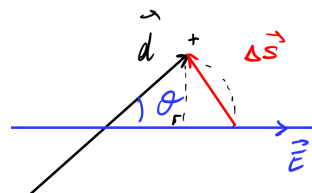
$$\begin{aligned}\boldsymbol{\tau} &= \mathbf{r}_+ \wedge \mathbf{F}_+ + \mathbf{r}_- \wedge \mathbf{F}_- = q(\mathbf{r}_+ - \mathbf{r}_-) \wedge \mathbf{E} = q\mathbf{d} \wedge \mathbf{E} \\ \Rightarrow \quad \boldsymbol{\tau} &= \mathbf{p} \wedge \mathbf{E}\end{aligned}$$



### Energia potenziale

Anche in questo caso partiamo dal lavoro fatto dal campo elettrico per ruotare il dipolo di un angolo  $\vartheta$ .

$$\begin{aligned}dW &= q\mathbf{E} \cdot d\mathbf{s} \Rightarrow W_+ = qE \left( \frac{d}{2} - \frac{d}{2} \cos \vartheta \right) = qE \frac{d}{2} (1 - \cos \vartheta) = W_- \\ \Rightarrow W &= qEd(1 - \cos \vartheta) = pE(1 - \cos \vartheta) \Rightarrow U_E = -\mathbf{p} \cdot \mathbf{E}\end{aligned}$$



## B.3 Interazione tra carica e campo elettrico uniforme

In generale, l'energia potenziale di una carica puntiforme  $q$  immersa in un campo elettrico  $\mathbf{E}$  è data da

$$U_E = -W_E = - \int_0^r \mathbf{F}_E(r') \cdot d\mathbf{r}' = -q \int_0^r \mathbf{E}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}' = -q \int_0^r E(\mathbf{r}') \cos \vartheta dr'$$

Ma nel caso di campo uniforme  $\mathbf{E}(\mathbf{r}') = \mathbf{E}$  e si può portare il campo fuori dall'integrale.

$$U_E = -qE \cos \vartheta \int_0^r dr' = -qE \cos \vartheta r \Rightarrow U_E = -q\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$$

## B.4 Moto di una carica in un campo magnetico uniforme

Si vuole risolvere la seguente equazione differenziale

$$\begin{cases} m\ddot{\mathbf{x}} = m\mathbf{v} \wedge \mathbf{B} \\ \mathbf{x}_0 = \mathbf{x}(0) = (x_0, y_0, z_0) \\ \mathbf{v}_0 = \mathbf{v}(0) = (v_{0x}, v_{0y}, v_{0z}) \end{cases}$$

Nel caso di campo magnetico uniforme diretto lungo l'asse  $z$ :  $\mathbf{B} = B\hat{u}_z$ . Andiamo a studiare le varie componenti dell'equazione differenziale vettoriale. Il membro di sinistra è banale: concentriamoci su quello

di destra calcolando le varie componenti del prodotto vettoriale

$$\begin{aligned}(q\mathbf{v} \wedge \mathbf{B})_x &= +qv_y B \\ (q\mathbf{v} \wedge \mathbf{B})_y &= -qv_x B \\ (q\mathbf{v} \wedge \mathbf{B})_z &= 0\end{aligned}$$

La componente  $z$  diventa banale:  $\ddot{z} = 0 \Rightarrow z(t) = z_0 + v_{0z}t$  Per quanto riguarda le componenti  $x$  e  $y$  dell'equazione le scrivo in termini delle velocità:

$$\begin{cases} m\dot{v}_x = qv_y B \\ m\dot{v}_y = -qv_x B \end{cases} \quad \text{definendo} \quad \omega = \frac{qB}{m} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \dot{v}_x = \omega v_y \\ \dot{v}_y = -\omega v_x \end{cases}$$

Quindi  $\dot{v}_y = \frac{\ddot{v}_x}{\omega} \Rightarrow \ddot{v}_x = -\omega^2 v_x$  di cui conosciamo la soluzione:

$$v_x(t) = A \sin \omega t + B \cos \omega t$$

Utilizzando la condizione iniziale  $v_x(0) = v_{0x} = B$ . Ora ricaviamo anche  $v_y(t)$ :

$$\begin{aligned}v_y(t) &= \frac{\dot{v}_x(t)}{\omega} = \frac{1}{\omega} [\omega A \cos \omega t - v_{0x} \omega \sin \omega t] = A \cos \omega t - v_{0x} \sin \omega t \\ v_y(0) &= v_{0y} = A\end{aligned}$$

Ora finalmente

$$v_x(t) = v_{0y} \sin \omega t + v_{0x} \cos \omega t$$

Scegliendo  $\cos \varphi_0 = \frac{v_{0x}}{v_0}$  e  $\sin \varphi_0 = \frac{v_{0y}}{v_0}$  si ottiene

$$\boxed{v_x(t) = v_0 \cos(\omega t - \varphi_0)} \quad \text{con} \quad \varphi_0 = \arctan \frac{v_{0y}}{v_{0x}}$$

Per trovare l'equazione del moto si integra la velocità

$$x(t) = x_0 + \int_0^t d\Delta v_x(\Delta) = v_0 \int_0^t d\Delta \cos(\omega \Delta - \varphi_0) = x_0 + \frac{v_0}{\omega} \sin(\omega t - \varphi_0)$$

chiamando  $R = \frac{v_0}{\omega}$  si ottiene

$$\boxed{x(t) = x_0 + R \sin(\omega t - \varphi_0)}$$

Per  $y(t)$  si eseguono gli stessi passaggi. Il risultato è la composizione di un moto circolare nel piano  $xy$  con raggio  $R$  e centro di rotazione  $(x_0, y_0)$  è di un moto rettilineo uniforme lungo  $z$ . Infatti

$$(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 = R^2$$

**N.B.** in questo problema si conservano  $H, L_z, p_z$ .

Ora verifichiamo che la quantità  $y - \frac{mv_x}{qB} = y - \frac{v_x(t)}{\omega}$  corrisponde alla coordinata  $y$  del centro di rotazione.

$$y(t) - \frac{mv_x(t)}{qB} = y_0 + R \sin(\omega t - \varphi_0) - \frac{1}{\omega} v_0 \sin(\omega t - \varphi_0) = y_0$$

# Appendice C

## Matematica

### C.1 Il laplaciano di $1/r$

Si vuole dimostrare che

$$\nabla^2 \left( \frac{1}{r} \right) = -4\pi \delta^{(3)}(\mathbf{r})$$

Cominciamo con il notare che

$$\nabla^2 \left( \frac{1}{r} \right) = \nabla \cdot \nabla \left( \frac{1}{r} \right) = -\nabla \cdot \left( \frac{\hat{\mathbf{r}}}{r^2} \right)$$

E ora separiamo due casi:

a)  $r \neq 0$

$$\nabla^2 \left( \frac{1}{r} \right) = -\nabla \cdot \left( \frac{\hat{\mathbf{r}}}{r^2} \right) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{1}{r^2} \right) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (1) = 0$$

Quindi il laplaciano di  $1/r$  è nullo per ogni punto dello spazio che non sia l'origine. Ora analizziamo cosa succede per

b)  $r = 0$

Ricordiamo innanzitutto il Teorema di Gauss (o della divergenza), secondo il quale l'integrale sul volume della divergenza di un campo vettoriale è uguale al flusso del campo attraverso la superficie che lo contiene, in formule:

$$\int_V \nabla \cdot \mathbf{F} dV = \int_{\partial V} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{a}$$

Come si fa sempre, per studiare il comportamento di questa distribuzione la si applica ad una funzione di prova  $f(\mathbf{r})$ , che si suppone essere abbastanza regolare nell'intorno di  $r = 0$ . Integriamo su una bolla sfera di raggio  $r$  e centrata nell'origine. A causa della regolarità della funzione, nel limite in cui  $r \rightarrow 0$  si può valutare la funzione in 0 e portarla fuori dall'integrale:

$$\int_{B_r(0)} f(\mathbf{r}) \nabla^2 \left( \frac{1}{r} \right) d^3r = f(0) \int_{B_r(0)} \nabla^2 \left( \frac{1}{r} \right) d^3r = -f(0) \int_{B_r(0)} \nabla \cdot \frac{\hat{\mathbf{r}}}{r^2} d^3r$$

e usando il teorema di Gauss

$$= -f(0) \int_{\partial B} \frac{\hat{\mathbf{r}}}{r^2} \cdot d\mathbf{a}$$

dove ora l'integrale è esteso alla superficie sferica di raggio  $r$ , il cui elemento di area è  $d\mathbf{a} = r^2 \sin \vartheta d\vartheta d\varphi \hat{\mathbf{r}}$ :

$$\begin{aligned} \int_{B_r(0)} f(\mathbf{r}) \nabla^2 \left( \frac{1}{r} \right) dV &= -f(0) \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \, r^2 \frac{1}{r^3} = -f(0) 2\pi \left[ -\cos \vartheta \right]_0^\pi = -f(0) 2\pi(1+1) = -4\pi f(0) = \\ &= \int_{B_r(0)} -f(\mathbf{r}) 4\pi \delta^{(3)}(\mathbf{r}) dV \end{aligned}$$

E quindi per confronto tra integrandi si conclude che

$$\nabla^2 \left( \frac{1}{r} \right) = -4\pi \delta^{(3)}(\mathbf{r})$$

## C.2 Parità delle armoniche sferiche - 1

L'obiettivo di questa sezione è di dimostrare che la parità delle armoniche sferiche  $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$  è data da  $(-1)^l$ ; si intende che se si fa un cambio  $\mathbf{x} \mapsto -\mathbf{x}$ , cioè, in coordinate sferiche

$$\begin{aligned} r &\mapsto r \\ \vartheta &\mapsto \pi - \vartheta \\ \varphi &\mapsto \pi + \varphi \end{aligned}$$

allora si ottiene

$$Y_l^m(\pi - \vartheta, \pi + \varphi) = (-1)^l Y_l^m(\vartheta, \varphi)$$

Per farlo serve prima fare qualche passaggio.

### Parità dell'operatore derivata rispetto ad $\mathbf{x}$

Si vuole dimostrare che l'operatore derivata  $n$ -esima rispetto a  $x$   $D_x^n$  ha parità definita da  $(-1)^n$ , cioè che

$$D_{-x}^n = (-1)^n D_x^n \quad \text{oppure, in una notazione più familiare} \quad \frac{d^n}{d(-x)^n} = (-1)^n \frac{d^n}{dx^n}$$

Procediamo per induzione.

- Verifichiamo che la proposizione valga per  $n = 1$ . In generale, per una derivata rispetto ad un generico  $x'$  vale

$$\frac{df}{d(x')} = \frac{df}{dx} \frac{dx}{dx'} \Big|_{x=x(x')}$$

Applicandolo ad una trasformazione del tipo  $x' = \alpha x$

$$\frac{df}{d(\alpha x)} = \frac{df}{dx} \frac{d}{dx'} \left( \frac{x'}{\alpha} \right) = \frac{1}{\alpha} \frac{df}{dx} \quad \Rightarrow \quad \text{con } \alpha = -1 \quad \boxed{\frac{d}{d(-x)} = -\frac{d}{dx}}$$

che conclude il caso  $n = 1$ .

- Ora supponiamo vera la proposizione per un generico  $n$ , cioè:

$$\frac{d^n}{d(-x)^n} F = (-1)^n \frac{d^n}{dx^n} f$$

Verifichiamo che sotto questa ipotesi la proposizione valga anche per  $n + 1$ .

$$\frac{d^{n+1}}{d(-x)^{n+1}} f = \frac{d}{d(-x)} \left[ \frac{d^n}{d(-x)^n} f \right] = -\frac{d}{dx} \left[ (-1)^n \frac{d^n}{dx^n} f \right] = (-1)^{n+1} \frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} f \quad QED$$

## Parità dei polinomi di Legendre

A questo punto è banale trovare la parità dei polinomi di Legendre, che ricordiamo essere

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} [(x^2 - 1)^n]$$

Effettuando la sostituzione  $x \mapsto -x$  e usando il risultato del punto precedente

$$P_n(-x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{d(-x)^n} [(x^2 - 1)^n] = (-1)^n \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} [(x^2 - 1)^n] \Rightarrow \boxed{P_n(-x) = (-1)^n P_n(x)}$$

## Parità delle funzioni associate di Legendre

Le funzioni associate di Legendre  $P_n^m$  hanno parità  $(-1)^{n+m}$ . Ne ricordiamo la definizione:

$$P_n^m(x) = \sqrt{(1-x^2)^m} \frac{d^m}{dx^m} P_n(x)$$

Via al calcolo.

$$\begin{aligned} P_n^m(-x) &= \sqrt{(1-x^2)^m} \frac{d^m}{d(-x)^m} [P_n(-x)] = \sqrt{(1-x^2)^m} (-1)^m \frac{d^m}{dx^m} [(-1)^n P_n(x)] = (-1)^{n+m} P_n^m(x) \\ &\Rightarrow \boxed{P_n^m(-x) = (-1)^n (-1)^m P_n^m(x)} \end{aligned}$$

## Calcolo finale

Ora è finalmente possibile concludere la dimostrazione, che risulta banale dopo aver visto i Lemmi precedenti. Ricordiamo la definizione delle armoniche sferiche

$$Y_l^m(\vartheta, \varphi) = N P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}$$

Dove  $N$  è un fattore di normalizzazione che non dipende dalle variabili in gioco e che rimarrà uguale durante ogni passaggio. Si parte:

$$\begin{aligned} Y_l^m(\pi - \vartheta, \pi + \varphi) &= N P_l^m[\cos(\pi - \vartheta)] e^{im(\pi + \varphi)} = \\ &= N P_l^m(-\cos \vartheta) e^{im\pi} e^{im\varphi} = \\ &= N P_l^m(\cos \vartheta) (-1)^m (-1)^l (-1)^m e^{im\varphi} & [(-1)^{2m} = 1] \\ &= N P_l^m(\cos \vartheta) (-1)^l e^{im\varphi} \\ &= (-1)^l Y_l^m(\vartheta, \varphi) & QED \end{aligned}$$

## C.3 Parità delle armoniche sferiche - 2

Ora dimostriamo la stessa proposizione in un modo diverso, molto più semplice, partendo dall'espressione esplicita delle armoniche sferiche.

$$Y_l^m(\vartheta, \varphi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi(l-m)!}} e^{im\varphi} (\sin \vartheta)^{-m} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \vartheta)^{l-m}} (\sin \vartheta)^{2l} \quad m \geq 0$$



Facendo la sostituzione  $\mathbf{x} \mapsto -\mathbf{x}$  si ottiene:

$$\begin{aligned}
Y_l^m(\pi - \vartheta, \pi + \varphi) &= N_{lm} e^{im(\pi + \varphi)} (\sin(\pi - \vartheta))^{-m} \frac{d^{l-m}}{d(\cos(\pi - \vartheta))^{l-m}} (\sin(\pi - \vartheta))^{2l} = \\
&= N_{lm} e^{im\pi} e^{im\varphi} (\sin \vartheta)^{-m} \frac{d^{l-m}}{d(-\cos \vartheta)^{l-m}} (\sin \vartheta)^{2l} = \\
&= N_{lm} (-1)^m e^{im\varphi} (\sin \vartheta)^{-m} (-1)^{l-m} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \vartheta)^{l-m}} (\sin \vartheta)^{2l} = \\
&= (-1)^l Y_l^m(\vartheta, \varphi)
\end{aligned}$$

Avendo posto  $N_{lm} = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)}{4\pi(l-m)!}}$  che è ovviamente invariante per lo scambio suddetto.