



UNIVERSITÀ
degli STUDI
di CATANIA

Dipartimento
di Fisica
e Astronomia
"Ettore Majorana"



ESERCITAZIONI DI MECCANICA QUANTISTICA AVANZATA

A CURA DI LUCIA OLIVA

REDATTO DA JOEY BUTCHERS

ANNO ACCADEMICO 2024-2025

Teoria perturbativa indipendente dal tempo

L'idea è che abbiamo una hamiltoniana H che è la somma di una hamiltoniana H_0 imperturbata e una perturbazione V' :

$$H = H_0 + V'$$

Il motivo per cui indichiamo la perturbazione in tal modo è che in generale la hamiltoniana imperturbata potrebbe già avere parte del potenziale, cioè potrebbe essere nella forma $H_0 = K + V$ con K termine cinetico e V termine di potenziale

Si parte dall'idea che noi conosciamo il sistema governato da H_0 , quindi conosciamo sia i livelli di energia imperturbati $E_n^{(0)}$ che gli autostati $|n^{(0)}\rangle$. In altri termini, conosciamo il problema

$$H_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle$$

Quello che ci chiediamo è qual è la correzione ai livelli di energia imperturbati e agli autostati imperturbati a causa di V' . Omettendo i passaggi visti nella teoria, quello che andiamo a guardare negli esercizi in genere è al massimo il secondo ordine. La correzione al primo ordine è data dagli elementi di matrice del potenziale V' , sugli autostati imperturbati:

$$\delta E_n^{(1)} = E_n^{(1)} - E_n^{(0)} = \langle n^{(0)} | V' | n^{(0)} \rangle$$

Per quanto riguarda la correzione al secondo ordine, essa è data da dall'elemento di matrice di V' tra lo stato imperturbato $|n^{(0)}\rangle$ e lo stato corretto al primo ordine $|n^{(1)}\rangle$

$$\delta E_n^{(2)} = \langle n^{(0)} | V' | n^{(1)} \rangle$$

Da tale espressione deduciamo che per avere una correzione all'ordine n -esimo ci servono gli autostati corretti fino all'ordine $n - 1$. In particolare, per il secondo ordine ci serve lo stato corretto al primo ordine che è dato da

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{k \neq n} |k^{(0)}\rangle \frac{V'_{k,n}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad \text{dove} \quad V'_{k,n} = \langle k^{(0)} | V' | n^{(0)} \rangle$$

Inserendo tale espressione in quella di sopra otteniamo

$$\delta E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle n^{(0)} | V' | k^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

Ci si può inoltre chiedere quando è valida la teoria perturbativa. Il criterio per stabilirlo è il seguente: il rapporto tra la correzione al primo ordine di un certo livello e la differenza tra l'energia del medesimo livello e quella del consecutivo deve essere molto minore di 1. In formule:

$$\left| \frac{\delta E_n^{(1)}}{E_n^{(0)} - E_{n+1}^{(0)}} \right| \ll 1$$

Teoria perturbativa dipendente dal tempo

Nella teoria perturbativa dipendente dal tempo consideriamo una hamiltoniana che ha un termine H_0 in cui non compare il tempo in maniera esplicita più un potenziale che dipende dal tempo:

$$H = H_0 + V(t)$$

In questo caso c'è un autostato $|j\rangle$ inizialmente popolato e la presenza del potenziale $V(t)$ può portare a delle transizioni verso uno stato $|n\rangle$ con $n \neq j$. Uno degli scopi principali della teoria perturbativa dipendente dal tempo è quindi quello di calcolare qual è la probabilità di tale transizione. L'ampiezza della transizione $d_{j \rightarrow n}$ è data da

$$d_{j \rightarrow n} = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' e^{i\omega_{n,j}t'} V_{n,j}$$

dove

$$\omega_{n,j} = \frac{E_n - E_j}{\hbar} \quad , \quad V_{n,j} = \langle n | V(t) | j \rangle$$

L'integrale è esteso dal tempo t_0 in cui viene accesa la perturbazione fino al tempo t in cui viene spenta.

Approssimazione WKB

Tale approssimazione è molto utile quando vogliamo risolvere l'equazione di Schrödinger unidimensionale (o la parte radiale dell'equazione di Schrödinger nello spazio).

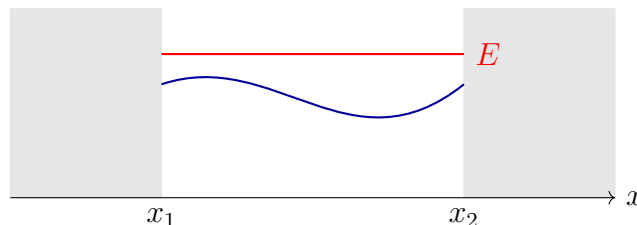
Essa considera il fatto che in generale possiamo avere un potenziale che varia debolmente (*slowly-varying potential*) rispetto alla lunghezza d'onda della particella. Quindi, quando abbiamo tante lunghezze d'onda in questa regione¹ e il potenziale varia poco, allora possiamo applicare la WKB. A differenza della teoria perturbativa che vale soltanto nel caso in cui la perturbazione è piccola, l'approssimazione WKB non necessita di questa richiesta: il potenziale può essere anche grande, ciò che conta è che vari lentamente.

Livelli di energia

La WKB è utile per trovare i livelli di energia approssimati. Vediamo allora come si trovano. Considereremo principalmente tre casi:

1. Potenziale con due pareti verticali.

Graficamente la situazione è la seguente, dove la regione classicamente permessa è quella compresa tra x_1 e x_2 , mentre le regioni proibite sono rappresentate in grigio



¹Al momento non ho idea di che cosa significhi. Work in progress.

Posto

$$p = \sqrt{2m[E - V(x)]}$$

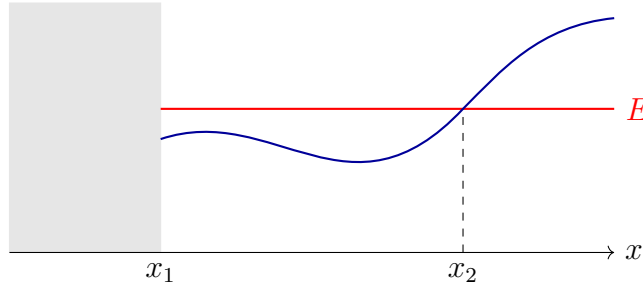
Nel caso in cui $E > V$, possiamo trovare i livelli di energia risolvendo l'integrale:

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = n\pi\hbar \quad , \quad n = 1, 2, \dots$$

dove x_1 e x_2 sono i *turning points* classici.

2. Potenziale con una sola parete verticale.

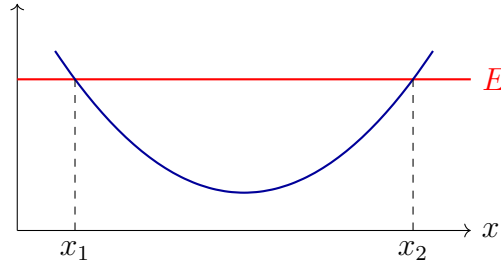
Supponendo di avere la parete verticale in x_1 , dal punto di vista grafico la situazione è la seguente



Il secondo turning point si ha nel punto x_2 , che dipende dal valore E dell'energia, in quanto per trovarlo si impone la condizione $V(x_2) = E$. In questo caso, l'integrale da risolvere è²

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = \left(n - \frac{1}{4}\right)\pi\hbar \quad , \quad n = 1, 2, \dots$$

3. Potenziale senza pareti verticali. In questo caso la situazione è la seguente:



Attenzione! potrebbe capitare di avere un potenziale con una parete verticale, ma magari questa non è da considerare perché bisogna guardare dove l'energia eguaglia il potenziale. In altre parole, i turning points sono i punti $x_{1,2}$ tali che $V(x_{1,2}) = E$.

²Attenzione! Si può utilizzare una formulazione differente in cui n parte da 0. In tal caso l'integrale da risolvere è

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = \left(n + \frac{3}{4}\right)\pi\hbar \quad , \quad n = 0, 1, \dots$$

Per non confondersi, basta ricordare che per lo stato fondamentale si deve avere $\frac{3}{4}\pi\hbar$.

In questo caso, l'integrale da risolvere per ottenere i livelli di energia approssimati è

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x) \, dx = \left(n - \frac{1}{2}\right) \pi \hbar \quad , \quad n = 1, 2, \dots$$

Penetrabilità della barriera

Nel caso in cui abbiamo una barriera di potenziale, la WKB può essere utilizzata per valutare la penetrabilità della barriera.

Per parlare di penetrabilità ci dobbiamo trovare nel caso $E < V$. Si ottiene che

$$T \simeq e^{-2\gamma} \quad \text{dove} \quad \gamma = \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} |p(x)| \, dx$$

dove x_1 e x_2 sono i classical turning points.

1 Lezione 1

Esercizio 1.1

An atom has a nucleus of charge Z and one electron. The nucleus has radius R inside which the charge is distributed. Assuming that the effect of the finite size of the nucleus can be described by the following potential:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{R} \frac{r}{R} & \text{for } r < R \\ -\frac{Ze^2}{r} & \text{for } r \geq R \end{cases}$$

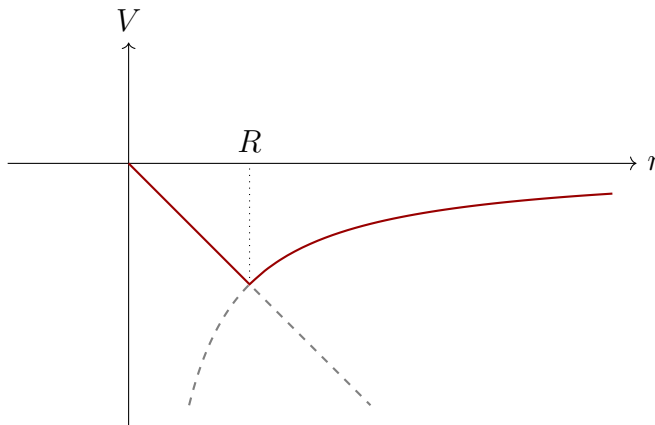
- a) Use perturbation theory to calculate the first order correction to the ground state for $Z = 8$ and $A = 16$. (It is known that $R = R_0 A^{\frac{1}{3}}$ with $R_0 = 1.2 \cdot 10^{-15} \text{ m} = 1.2 \text{ fm}$)
- b) Do you expect perturbation theory to be more valid for larger A ?³ Justify.

Hint:

$$E_1^{(0)} = -\frac{Z^2 e^2}{2a_0} \quad \text{with} \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{mc^2} \quad , \quad \frac{R^2}{2a_0} = 13.6 \text{ eV}$$
$$R_{1,0} = 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} a^{-Zr/a_0}$$

Svolgimento

Per prima cosa è conveniente, quando possibile, riportare in un grafico l'andamento del potenziale. In questo caso il potenziale assume la forma di una retta con pendenza negativa fino a $r = R$ (cioè fino alla *size* del nucleo), dopodiché diventa un'iperbole. Pertanto, graficamente il potenziale apparirà come segue:



Osserviamo adesso che il sistema in esame è un atomo idrogenoide, pertanto il problema si può affrontare nella stessa maniera con cui trattiamo l'atomo di idrogeno avendo però carica Z diversa da 1.

³Questa richiesta ci sta implicitamente dicendo di fissare il valore di Z e far variare soltanto A .

Osserviamo inoltre che per $r \geq R$ il potenziale $V(r)$ assume proprio la forma del potenziale dell'atomo idrogenoide, per cui la hamiltoniana sarà quella dell'atomo idrogenoide, che ricordiamo essere

$$H_{\text{idrogenoide}} = \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r}$$

Quello che vogliamo è che questa sia la nostra H_0 ,⁴ in quanto ne conosciamo autovalori ed autofunzioni. È in quest'ottica che capiamo come impostare il problema: nella regione 'nuova', cioè quella per $r < R$ in cui è presente il potenziale dovuto alla distribuzione di carica nella finite size del nucleo, tale potenziale deve essere considerato come perturbazione rispetto al potenziale dell'atomo idrogenoide, per cui dobbiamo esprimerlo in modo da ottenere il potenziale di H_0 più un termine perturbativo. Scriviamo dunque la hamiltoniana per la regione $r < R$:

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{R} \frac{r}{R} \quad (1)$$

Concentriamoci sul termine di potenziale e riscriviamolo aggiungendo e sottraendo il termine $\frac{Ze^2}{r}$:

$$-\frac{Ze^2}{R} \frac{r}{R} = -\frac{Ze^2}{R} \frac{r}{R} + \frac{Ze^2}{r} - \frac{Ze^2}{r}$$

Riordinando i termini e inserendoli in (1) possiamo riscrivere quest'ultima come

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} - \frac{Ze^2}{R} \frac{r}{R} + \frac{Ze^2}{r} = H_0 + V'$$

dove H_0 è la hamiltoniana dell'atomo idrogenoide e V' è il termine di perturbazione, il quale può essere riscritto come

$$V' = -\frac{Ze^2}{R} \frac{r}{R} + \frac{Ze^2}{r} = -\frac{Ze^2}{R} \left(\frac{r}{R} - \frac{R}{r} \right)$$

Il problema chiede qual è la correzione al ground state al primo ordine. Essa è data dall'elemento di matrice di V' rispetto al ground state imperturbato, cioè rispetto a $|1, 0, 0\rangle$. In formule⁵:

$$\begin{aligned} \delta E_1^{(1)} &= \langle 1, 0, 0 | V' | 1, 0, 0 \rangle = \int_0^R dr r^2 \int d\Omega \psi_{1,0,0}^*(r, \vartheta, \varphi) V'(r) \psi_{1,0,0}(r, \vartheta, \varphi) = \\ &= - \int_0^R dr r^2 \int d\Omega |Y_{0,0}(\vartheta, \varphi)|^2 |R_{1,0}(r)|^2 \frac{Ze^2}{R} \left(\frac{r}{R} - \frac{R}{r} \right) \end{aligned}$$

dove nell'ultimo passaggio abbiamo esplicitato il potenziale e la funzione d'onda.

L'espressione della parte radiale è fornita dal testo, mentre per la parte angolare si ha

$$\int d\Omega |Y_{0,0}(\vartheta, \varphi)|^2 = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega = \frac{1}{4\pi} 4\pi = 1$$

⁴Osserviamo che tale hamiltoniana ha una parte di potenziale, ma ciò non ci spaventa perché conosciamo esattamente tale problema.

⁵Notiamo che l'integrale radiale è esteso fino a $r = R$. Il motivo è che la perturbazione è nulla per $r \geq R$.

In definitiva possiamo riscrivere

$$\begin{aligned}\langle 1, 0, 0 | V' | 1, 0, 0 \rangle &= - \int_0^R dr r^2 4 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^3 e^{-2Zr/a_0} \frac{Ze^2}{R} \left(\frac{r}{R} - \frac{R}{r} \right) = \\ &= - \frac{Ze^2}{R} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^3 4 \int_0^R dr r^2 \left(\frac{r}{R} - \frac{R}{r} \right) e^{2Zr/a_0}\end{aligned}$$

Effettuiamo ora il cambio di variabile

$$x = \frac{2Zr}{a_0} \implies r = \frac{a_0}{2Z}x \implies dr = \frac{a_0}{2Z} dx$$

che modifica l'intervallo di integrazione da $[0, R]$ in $[0, \alpha]$, con $\alpha = 2ZR/a_0$. Dopo alcuni passaggi si giunge all'integrale

$$\frac{Ze^2}{2R} \int_0^\alpha dx e^{-x} \left(\alpha x - \frac{x^3}{\alpha} \right) \quad (2)$$

Questi integrali vanno risolti per parti. In particolare si trova che

$$\begin{aligned}\int_0^\alpha dx e^{-x} x &= -e^{-\alpha}(\alpha + 1) + 1 \\ \int_0^\alpha dx e^{-x} x^3 &= -e^{-\alpha}(\alpha^3 + 3\alpha^2 + 6\alpha + 6) + 6\end{aligned}$$

Da cui, inserendo tali risultati nell'espressione (2), otteniamo

$$\frac{Ze^2}{2R} \int_0^\alpha dx e^{-x} \left(\alpha x - \frac{x^3}{\alpha} \right) = \frac{Ze^2}{2R} \left[\alpha - \frac{6}{\alpha} + e^{-\alpha} \left(2\alpha + 6 + \frac{6}{\alpha} \right) \right]$$

Osserviamo adesso che il coefficiente a moltiplicare davanti la parentesi quadra può essere riscritto come

$$\frac{Ze^2}{2R} = \frac{Z^2 e^2}{a_0} \frac{a_0}{2ZR}$$

Il primo fattore è uguale all'opposto del doppio dell'energia del ground state imperturbato, mentre il secondo termine, per come abbiamo definito α , è uguale proprio ad α^{-1} . In definitiva possiamo scrivere:

$$\frac{Ze^2}{2R} = -2E_1^{(0)} \frac{1}{\alpha}$$

e quindi avremo

$$\frac{Ze^2}{2R} \left[\alpha - \frac{6}{\alpha} + e^{-\alpha} \left(2\alpha + 6 + \frac{6}{\alpha} \right) \right] = -2E_1^{(0)} \left[1 - \frac{6}{\alpha^2} + e^{-\alpha} \left(2 + \frac{6}{\alpha} + \frac{6}{\alpha^2} \right) \right] \quad (3)$$

Arrivati a questo punto possiamo rispondere alla domanda a): abbiamo infatti trovato la correzione al primo ordine allo stato fondamentale, e adesso dobbiamo trovarla in particolare

per $Z = 8$ ed $A = 16$. Cerchiamo quindi di stimare α per questi valori. Sfruttando il fatto che $R = R_0 A^{\frac{1}{3}}$ riscriviamo α come

$$\alpha = \frac{2ZR}{a_0} = \frac{3R_0}{a_0} Z A^{\frac{1}{3}}$$

dove abbiamo lasciato A e Z non espressi in modo da avere una formula che vale per qualsiasi atomo. Possiamo riscrivere ancora:

$$\frac{3R_0}{a_0} Z A^{\frac{1}{3}} = \gamma A^{\frac{1}{3}}$$

dove⁶ $\gamma = 3.6 \cdot 10^{-4}$. Segue che per $A = 16$ risulta $\alpha \approx 10^{-3} \ll 1$.

Possiamo sfruttare il fatto che $\alpha \ll 1$ per avere un'espressione analitica: sviluppando in serie di Taylor l'esponenziale otteniamo:

$$e^{-\alpha} = 1 - \alpha + \frac{\alpha^2}{2}$$

dove ci siamo fermati al secondo ordine. Prestiamo attenzione a questo fatto: il motivo per cui ci siamo fermati al secondo ordine piuttosto che al primo è che nelle parentesi quadre dell'espressione (3) abbiamo termini fino all'ordine α^{-2} . Inserendo quindi tale espansione otteniamo

$$\begin{aligned} 1 - \frac{6}{\alpha^2} + e^{-\alpha} \left(2 + \frac{6}{\alpha} + \frac{6}{\alpha^2} \right) &= 1 - \frac{6}{\alpha^2} + \left(1 - \alpha + \frac{\alpha^2}{2} \right) \left(2 + \frac{6}{\alpha} + \frac{6}{\alpha^2} \right) = \\ &= 1 - \frac{6}{\alpha^2} + 2 + \frac{6}{\alpha} + \frac{6}{\alpha^2} - 2\alpha - 6 - \frac{6}{\alpha} + \alpha^2 + 3\alpha + 3 = \alpha^2 + \alpha \approx \alpha \end{aligned}$$

dove nell'ultimo passaggio trascuriamo il termine α^2 in quanto $\alpha \ll 1$.

In definitiva abbiamo trovato un'espressione analitica semplice per la correzione al primo ordine al ground state, che è

$$\delta E_1^{(1)} = -2\alpha E_1^{(0)}$$

da cui si trova, per $Z = 8$ $A = 16$,

$$\delta E_1^{(1)} = 1.6 \text{ eV}$$

A questo punto passiamo al quesito b). Per capire se la teoria perturbativa è valida, dobbiamo verificare che si abbia

$$\left| \frac{\delta E_1^{(1)}}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \right| \ll 1$$

Abbiamo già calcolato $\delta E_1^{(1)}$, passiamo al calcolo di $E_1^{(0)} - E_2^{(0)}$: ricordando che per un atomo idrogenoide i livelli energetici sono dati da

$$E_n = -\frac{Z^2 e^2}{2a_0 n^2}$$

⁶Questo valore si trova per $Z = 8$. Il motivo per cui sostituiamo subito Z è che il problema chiede dei ragionamenti su A , per cui possiamo considerare Z fissato.

avremo

$$E_1^{(0)} - E_2^{(0)} = -\frac{Z^2 e^2}{2a_0} \left(1 - \frac{1}{4}\right) = -\frac{3}{4} \frac{Z^2 e^2}{2a_0} = -\frac{3}{4} E_1^{(0)}$$

In definitiva:

$$\left| \frac{\delta E_1^{(1)}}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \right| = \left| \frac{-2\alpha E_1^{(0)}}{-\frac{3}{4} E_1^{(0)}} \right| = \frac{8}{3} \alpha$$

Ricordiamo che abbiamo trovato

$$\alpha = \gamma A^{\frac{1}{3}}$$

da cui sembrerebbe che all'aumentare di A la teoria perturbativa sia sempre meno valida. Tuttavia, sostituendo il valore di γ , troviamo che

$$\frac{8}{3} \cdot 3.6 \cdot 10^{-4} A^{\frac{1}{3}} \ll 1 \implies A^{\frac{1}{3}} \ll 10^3 \implies A \ll 10^9$$

il che significa che, per i valori che A assume in natura, la teoria perturbativa è valida.

Esercizio 1.2

A two-level system is described by the hamiltonian

$$H_0 = \begin{pmatrix} \Omega & 0 \\ 0 & 3\Omega \end{pmatrix} \hbar$$

The system is in the excited state. At time $t = 0$ the following perturbation turned on for a long time T :

$$H_1 = \begin{pmatrix} 0 & \Omega e^{i\omega t} \\ \Omega e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix} \hbar$$

- Find the transition amplitude to the ground state at $t > T$.
- Is there a value of ω/Ω such that the probability to make transition reaches at most 0.5?

Svolgimento

In questo problema abbiamo un sistema a due livelli, quindi abbiamo solo il ground state e uno stato eccitato. Il sistema si trova nello stato eccitato, quindi l'unica transizione che può compiere è verso il ground state. Per studiare il sistema dobbiamo studiare il problema agli autovalori

$$H_0 |\varphi_n^{(0)}\rangle = E_n |\varphi_n^{(0)}\rangle \quad \text{con } n = 1, 2$$

In generale per trovare autovalori e autostati dovremmo diagonalizzare la matrice. In questo caso la matrice è già in forma diagonale, per cui possiamo dire subito che gli autostati sono:

$$\text{ground state } \varphi_1^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{con energia } E_1 = \hbar\Omega$$

$$\text{excited state } \varphi_2^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{con energia } E_2 = 3\hbar\Omega$$

Svolgiamo ora il punto a). L'ampiezza di transizione $d_{2 \rightarrow 1}$ dallo stato eccitato verso il ground state è data da

$$d_{2 \rightarrow 1} = -\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt e^{i\omega_{1,2}t} V_{1,2} \quad (1)$$

Notiamo che l'integrazione è estesa da 0, tempo in cui si accende la perturbazione, a T , tempo in cui si spegne. Il motivo è che il testo ci chiede di calcolare la probabilità per un tempo $t > T$, dunque l'integrale è non nullo fino a $t = T$.

Osserviamo adesso che

$$V_{1,2} = \langle \varphi_1^{(0)} | H_1 | \varphi_2^{(0)} \rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \hbar\Omega e^{i\omega t} \\ \hbar\Omega e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hbar\Omega e^{i\omega t} \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar\Omega e^{i\omega t}$$

e

$$\omega_{1,2} = \frac{E_1 - E_2}{\hbar} = \frac{\hbar\Omega - 3\hbar\Omega}{\hbar} = -2\Omega$$

Inserendo tali espressioni in (1) possiamo riscrivere quest'ultima come

$$d_{2 \rightarrow 1} = -\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt \hbar\Omega e^{i(\omega-2\Omega)t} = -\frac{\Omega}{\omega-2\Omega} [e^{i(\omega-2\Omega)T} - 1] \quad (2)$$

Passiamo alla domanda b). Il testo chiede qual è il valore del rapporto ω/Ω tale che la probabilità di transizione valga al massimo 0.5. Innanzitutto per calcolare la probabilità di transizione è sufficiente considerare il modulo quadro della (2):

$$P_{2 \rightarrow 1} = |d_{2 \rightarrow 1}|^2 = \frac{\Omega^2}{(\omega-2\Omega)^2} |e^{i(\omega-2\Omega)T} - 1|^2$$

Svolgiamo il prodotto ricordando che per un numero complesso si ha $|z|^2 = z^* z$

$$\begin{aligned} P_{2 \rightarrow 1} &= \frac{\Omega^2}{(\omega-2\Omega)^2} [e^{-i(\omega-2\Omega)T} - 1] [e^{i(\omega-2\Omega)T} - 1] = \\ &= \frac{\Omega^2}{(\omega-2\Omega)^2} [1 - e^{i(\omega-2\Omega)T} - e^{-i(\omega-2\Omega)T} + 1] \end{aligned}$$

Ricordando inoltre che

$$\cos \alpha = \frac{e^{i\alpha} + e^{-i\alpha}}{2}$$

otteniamo

$$P_{2 \rightarrow 1} = \frac{2\Omega^2}{(\omega-2\Omega)^2} \left\{ 1 - \cos [(\omega-2\Omega)T] \right\}$$

Sfruttando ora la formula di bisezione del seno

$$\sin \left(\frac{\alpha}{2} \right) = \pm \sqrt{\frac{1 - \cos \alpha}{2}}$$

Possiamo riscrivere ancora

$$P_{2 \rightarrow 1} = \frac{4\Omega^2}{(\omega-2\Omega)^2} \sin^2 \left[\frac{(\omega-2\Omega)T}{2} \right]$$

Osserviamo che siccome il testo ci chiede delle condizioni sui valori superiori (*at most* 0.5), possiamo considerare la seguente catena di disuguaglianze:

$$\frac{4\Omega^2}{(\omega-2\Omega)^2} \sin^2 \left[\frac{(\omega-2\Omega)T}{2} \right] \leq \frac{4\Omega^2}{(\omega-2\Omega)^2} \leq \frac{1}{2}$$

e in particolare l'ultima disuguaglianza può essere riscritta come

$$8\Omega^2 \leq \omega^2 + 4\Omega^2 - 4\omega\Omega$$

visto che dobbiamo trovare una condizione in termini del rapporto ω/Ω , dividiamo per Ω^2 :

$$\left(\frac{\omega}{\Omega} \right)^2 - 4 \left(\frac{\omega}{\Omega} \right) - 4 \geq 0 \implies \frac{\omega}{\Omega} \geq 2(1 + \sqrt{2}) \simeq 4.83$$

Esercizio 1.3

An electron is under the potential

$$V'(x) = \begin{cases} V_0 \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) & \text{for } 0 < x < L \\ +\infty & \text{otherwise} \end{cases}$$

- a) Calculate the energy levels employing first-order perturbation theory.
- b) What is the condition V_0 has to satisfy for perturbation theory to be valid for $n = 1$ level? Is it valid for $V_0 = 0.4$ eV and $L = 0.2$ nm for $n = 1$ level and/or for all the n energy levels? (Explain)
- c) At $t > 0$ the potential becomes

$$V''(x, t) = V_0 \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) \cos(\omega t)$$

Calculate the transition probability for $n = 1$ to $n = 3$ at time T at the value of ω where it is maximal.

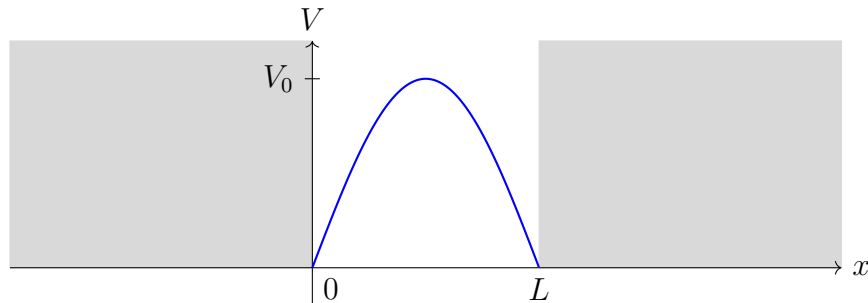
- d) For $L = 0.2$ nm and $V_0 = 0.4$ eV is time-dependent perturbation theory expected to be valid if $T = \frac{15\pi}{\omega_{1,3}}$?

Hint:

$$\int_0^L dy \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}y\right) \sin\left(\frac{\pi}{L}y\right) = \frac{L}{\pi} \frac{4n^2}{4n^2 - 1}$$
$$\int_0^L dy \sin\left(\frac{3\pi}{L}y\right) \sin^2\left(\frac{\pi}{L}y\right) = -\frac{8L}{30\pi}$$

Svolgimento

Per prima cosa rappresentiamo il potenziale prima che venga introdotta la dipendenza temporale:



Esso ha l'andamento di una sinusoide per $x \in [0, L]$, ed è infinito all'esterno (le regioni grigie in figura).

Svolgiamo il quesito a). Per questo è sufficiente applicare la teoria perturbativa indipendente dal tempo. La hamiltoniana imperturbata di questo sistema è quella di una particella confinata in una buca, cioè

$$H_0 = K + U \quad \text{dove} \quad U = \begin{cases} 0 & \text{per } 0 < x < L \\ \infty & \text{altrove} \end{cases}$$

Di questo sistema conosciamo le autofunzioni, le quali saranno le autofunzioni imperturbate e che sono date da⁷

$$\psi_n^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad , \quad n = 1, 2, \dots$$

e a cui sono associate rispettivamente le energie

$$E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} \quad , \quad n = 1, 2, \dots$$

Il potenziale

$$V' = V_0 \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)$$

costituisce la perturbazione per questo sistema. A causa della presenza di questo, la correzione al primo ordine dell'energia dell' n -esimo stato è data da

$$\delta E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | V' | \psi_n^{(0)} \rangle = \int_0^L dx V'(x) |\psi_n^{(0)}(x)|^2 = \frac{2V_0}{L} \int_0^L dx \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

dove nell'ultimo passaggio abbiamo esplicitato il potenziale e l'autofunzione.

Notiamo che l'integrale che figura è fornito come hint dal testo, per cui possiamo inserire direttamente il risultato:

$$\delta E_n^{(1)} = \frac{2V_0}{L} \frac{L}{\pi} \frac{4n^2}{4n^2 - 1} = \frac{V_0}{\pi} \frac{8n^2}{4n^2 - 1} \quad (1)$$

Per rispondere infine alla domanda dobbiamo calcolare le energie corrette al primo ordine, le quali sono date da

$$E_n^{(1)} = E_n^{(0)} + \delta E_n^{(1)} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} + \frac{V_0}{\pi} \frac{8n^2}{4n^2 - 1} \quad , \quad n = 1, 2, \dots$$

Passiamo al punto b). Cerchiamo quindi qual è la condizione che V_0 deve soddisfare affinché la teoria perturbativa sia valida per $n = 1$: per essere valida, il rapporto tra la correzione al primo ordine e la differenza tra i livelli vicini deve essere molto minore di uno:

$$\left| \frac{\delta E_1^{(1)}}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \right| \ll 1$$

Ovvero, ricordando che

$$E_1^{(0)} - E_2^{(0)} = -3 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$$

e sostituendo l'espressione (1) per $n = 1$,

⁷Attenzione! Le autofunzioni hanno questa espressione perché la particella si trova in una buca tra 0 e L . Se la buca fosse stata estesa da $-L/2$ a $L/2$ (bucca centrata all'origine), le autofunzioni avrebbero avuto un'altra espressione.

$$\left| \frac{\frac{8V_0}{3\pi}}{-\frac{3\hbar^2\pi^2}{2mL^2}} \right| = \frac{16V_0mL^2}{9\hbar^2\pi^3} \ll 1 \implies V_0 \ll \frac{9\hbar^2\pi^3}{16mL^2}$$

Possiamo esprimere tale condizione in termini di $E_1^{(0)}$:

$$V_0 \ll \frac{9\hbar^2\pi^3}{16mL^2} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} \frac{9\pi}{8} = \frac{9\pi}{8} E_1^{(0)}$$

Se V_0 soddisfa tale condizione, allora la teoria perturbativa è valida. Verifichiamo ora se è valida in particolare per $V_0 = 0.4$ eV e $L = 0.2$ nm. Per fare ciò cerchiamo di esprimere tutte le quantità in elettronVolt e nanometri⁸, inoltre cerchiamo di far apparire la quantità $\hbar c$ che sappiamo valere $200 \text{ MeV} \cdot \text{fm}$ o $200 \text{ eV} \cdot \text{nm}$. Per fare ciò sfruttiamo il fatto che per la massa dell'elettrone si ha $m_e c^2 \approx 0.5 \text{ MeV} = 0.5 \cdot 10^6 \text{ eV}$, fatto che ci suggerisce di moltiplicare e dividere per c^2 :

$$V_0 \ll \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} \frac{9\pi}{8} = \frac{(\hbar c)^2\pi^2}{2(mc^2)L^2} \frac{9\pi}{8} = \frac{4 \cdot 10^4 \text{ eV}^2 \cdot \text{nm}^2 \pi^3 9}{8 \cdot 2 \cdot 0.5 \cdot 10^6 \text{ eV} \cdot 4 \cdot 10^{-2} \text{ nm}^2} = \frac{\pi^3 9}{8} \text{ eV} = 35 \text{ eV}$$

Poiché il testo ci chiede di verificare la validità della teoria perturbativa per $V_0 = 0.4$ eV, troviamo che essa è valida per il livello con $n = 1$.

A questo punto dobbiamo controllare la validità anche per gli altri livelli di energia. Per fare ciò consideriamo il generico livello n -esimo e imponiamo la condizione di validità della teoria perturbativa per questo:

$$\begin{aligned} \left| \frac{\delta E_n^{(1)}}{E_n^{(0)} - E_{n+1}^{(0)}} \right| &= \left| \frac{\frac{V_0}{\pi} \frac{8n^2}{4n^2-1}}{\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} [n^2 - (n+1)^2]} \right| = \frac{\frac{|V_0|}{\pi} \frac{8n^2}{4n^2-1}}{\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} (2n+1)} \ll 1 \\ \implies V_0 &\ll \frac{\hbar^2\pi^2}{32mL^2} \left(4 - \frac{1}{n^2} \right) (2n+1) \end{aligned}$$

Sia il termine $4 - \frac{1}{n^2}$ che il termine $2n+1$ sono funzioni crescenti di n , per cui tutto il termine a destra della disuguaglianza cresce all'aumentare di n . Ne segue che la teoria perturbativa è sempre più valida man mano che consideriamo n maggiori.

Passiamo alla richiesta c). Qui il potenziale cambia e ottiene una dipendenza dal tempo, quindi passiamo alla teoria perturbativa dipendente dal tempo. Il problema chiede di calcolare la proprietà di transizione dal livello con $n = 1$ a quello con $n = 3$ al tempo T dove è massima. Questa è data da

$$d_{1 \rightarrow 3} = -\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt e^{i\omega_{3,1}t} V_{3,1}'' \quad (2)$$

dove

$$\omega_{3,1} = \frac{E_3 - E_1}{\hbar} = \frac{4\hbar\pi^2}{mL^2}$$

⁸In generale negli esercizi si hanno due casi: o le grandezze sono espresse in MeV e fm o eV e nm. In questo caso il testo fornisce le quantità in eV e nm, il che significa che esse sono delle quantità adeguate per il sistema.

e

$$\begin{aligned} V_{3,1}'' &= \langle \psi_3^{(0)} | V''(x, t) | \psi_1^{(0)} \rangle = V_0 \cos(\omega t) \langle \psi_3^{(0)} | \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) | \psi_1^{(0)} \rangle = \\ &= V_0 \cos(\omega t) \int_0^L dx \psi_3^{(0)}(x) \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) \psi_1^{(0)}(x) = \frac{2V_0}{L} \cos(\omega t) \int_0^L dx \sin\left(\frac{3\pi}{L}x\right) \sin^2\left(\frac{\pi}{L}x\right) \end{aligned}$$

Il risultato dell'integrale è fornito dall'hint, per cui possiamo subito scrivere

$$V_{3,1}'' = \frac{2V_0}{L} \cos(\omega t) \left(-\frac{8L}{30\pi}\right) = -\frac{8V_0}{15\pi} \cos(\omega t)$$

Per inciso, notiamo che il problema chiede la probabilità di passare da $n = 3$ a $n = 1$ e non quella da $n = 2$ a $n = 1$ perché quest'ultima avrebbe dato luogo ad un integrale nullo per ragioni di parità.

Esplicitando l'espressione di $V_{3,1}''$ in (2) otteniamo

$$d_{1 \rightarrow 3} = \frac{i}{\hbar} \frac{8V_0}{15\pi} \int_0^T dt e^{i\omega_{3,1}t} \cos(\omega t)$$

Esprimendo il coseno come

$$\cos(\omega t) = \frac{e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}}{2}$$

Possiamo riscrivere⁹

$$d_{1 \rightarrow 3} = \frac{i}{\hbar} \frac{4V_0}{15\pi} \int_0^T dt \left[e^{i(\omega_{3,1} + \omega)t} + e^{i(\omega_{3,1} - \omega)t} \right] = \frac{1}{\hbar} \frac{4V_0}{15\pi} \left[\frac{e^{i(\omega_{3,1} + \omega)T} - 1}{\omega_{3,1} + \omega} + \frac{e^{i(\omega_{3,1} - \omega)T} - 1}{\omega_{3,1} - \omega} \right]$$

I due termini che compaiono tra parentesi hanno un nome: il primo è il termine di emissione stimolata, il secondo è il termine di assorbimento¹⁰. Quando uno domina l'altro è trascurabile, quindi nella maggior parte dei casi (soprattutto quello in cui la probabilità è massima) si deve considerare solo uno dei due termini. Per capire quale termine tenere in considerazione è sufficiente andare a vedere cosa succede alle quantità al denominatore: il denominatore che è prossima a zero ci dirà quale termine tenere. In generale, data una transizione a cui corrisponde una frequenza $\omega_{f,i}$, si ha che

- Il termine di emissione stimolata domina quando $\omega_{f,i} + \omega \simeq 0$, a cui corrisponde una condizione sull'energia $E_f = E_i - \hbar\omega$, che indica il fatto che il sistema passa da un livello energeticamente più alto ad uno energeticamente più basso ($E_f < E_i$);
- Il termine di assorbimento domina quando $\omega_{f,i} - \omega \simeq 0$, a cui corrisponde una condizione sull'energia $E_f = E_i + \hbar\omega$, che indica il fatto che il sistema passa da un livello energeticamente più basso ad uno energeticamente più alto ($E_f > E_i$);

⁹Precisiamo che un risultato del genere si ottiene ogni qualvolta abbiamo una perturbazione sinusoidale.

¹⁰Non è necessario ricordarlo: il ragionamento che segue stabilisce come riconoscerli.

Applichiamo ora tale criterio al sistema in esame. Dato che passiamo dallo stato per $n = 1$ a quello per $n = 3$, e questi sono tali che $E_3 > E_1$, il termine che domina è quello di assorbimento. In questo caso il termine di assorbimento non solo domina, ma è l'unico presente, in quanto il testo ci fornisce il verso della transizione, dunque l'altro costituisce un termine non fisico. Ponendo adesso $\Delta\omega = \omega - \omega_{3,1}$ possiamo riscrivere l'ampiezza di probabilità come

$$d_{1 \rightarrow 3} = -\frac{1}{\hbar} \frac{4V_0}{15\pi} \frac{e^{-i\Delta\omega T} - 1}{\Delta\omega}$$

Sfruttando il fatto che

$$e^{-i\alpha} - 1 = e^{-i\frac{\alpha}{2}} (e^{-i\frac{\alpha}{2}} - e^{+i\frac{\alpha}{2}}) = -2ie^{-i\frac{\alpha}{2}} \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)$$

possiamo riscrivere l'ampiezza come (nel nostro caso $\alpha = \Delta\omega T$)

$$d_{1 \rightarrow 3} = \frac{i}{\hbar} \frac{4V_0}{15\pi} e^{-i\frac{\Delta\omega}{2}T} 2 \frac{\sin\left(\frac{\Delta\omega}{2}T\right)}{\Delta\omega} = \frac{i}{\hbar} \frac{4V_0 T}{15\pi} e^{-i\frac{\Delta\omega}{2}T} \frac{\sin\left(\frac{\Delta\omega}{2}T\right)}{\frac{\Delta\omega}{2}}$$

Siccome il testo chiede quando la probabilità è massima, allora ci troviamo nella situazione in cui $\Delta\omega = \omega_{3,1} - \omega \simeq 0$. In tali condizioni è valida l'approssimazione

$$\sin\left(\frac{\Delta\omega}{2}T\right) \approx \frac{\Delta\omega}{2}T$$

e pertanto il fattore del tipo $\sin \alpha / \alpha$ è circa 1. Ne segue che la probabilità sarà pari a

$$P_{1 \rightarrow 3} = \frac{16V_0^2 T^2}{\hbar^2 15^2 \pi^2}$$

Passiamo infine al punto d). Per prima cosa sostituiamo il valore di T :

$$P_{1 \rightarrow 3} = \frac{16V_0^2}{\hbar^2 15^2 \pi^2} \frac{15^2 \pi^2}{\omega_{3,1}^2} = \frac{16V_0^2 m^2 L^4}{\hbar^2 16 \hbar^2 \pi^4} = \frac{V_0^2 m^2 L^4}{\hbar^4 \pi^4}$$

dove nel secondo passaggio abbiamo sostituito il valore di $\omega_{3,1}$.

Arrivati a questo punto possiamo sostituire i valori numerici. Moltiplicando e dividendo per c^4 in modo da avere quantità note, avremo:

$$P_{1 \rightarrow 3} = \frac{V_0^2 (mc)^2 L^4}{(\hbar c)^4 \pi^4} = \frac{16 \cdot 10^{-2} \text{ eV} \cdot \frac{1}{4} \cdot 10^{12} \text{ eV}^2 \cdot 2^4 \cdot 10^{-4} \text{ nm}^2}{2^4 \cdot 10^8 \text{ eV}^4 \text{ nm}^4 \pi^4} = \frac{4}{\pi^4} \cdot 10^{-2} \simeq 4 \cdot 10^{-4} \ll 1$$

dunque la teoria perturbativa è valida.

2 Lezione 2

Esercizio 2.1

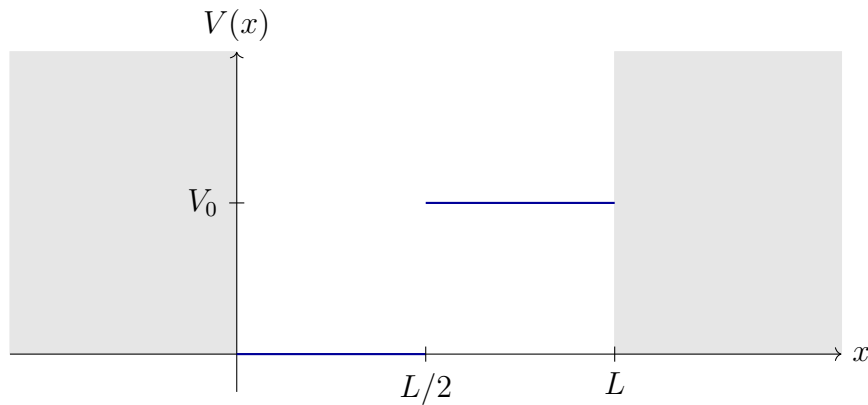
A particle of mass m is in a potential well given by

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{for } x < 0 \\ 0 & \text{for } 0 < x < \frac{L}{2} \\ V_0 & \text{for } \frac{L}{2} < x < L \\ +\infty & \text{for } x > L \end{cases}$$

- a) Use perturbation theory to calculate the energy of the ground state $E_1^{(1)}$.
- b) For $m = 1$ GeV and $L = 2$ fm what is the value of V_0 to have $V_0 = 0.2E_1^{(1)}$?
- c) Under the condition in b), ($V_0 \ll E$), calculate the ground state energy with the WKB approximation.
- d) How the result in c) compares to the result in a)? (Explain)

Svolgimento

Svolgiamo il punto a). Per prima cosa rappresentiamo il potenziale:



Siamo ancora nell'ambito della teoria perturbativa, quindi dobbiamo identificare la correzione al potenziale imperturbato. Quest'ultimo è quello della buca quadra, dato da

$$V_{\text{box}} = \begin{cases} 0 & \text{per } 0 < x < L \\ \infty & \text{altrimenti} \end{cases}$$

Le funzioni d'onda degli stati imperturbati sono date da

$$\psi_n^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad , \quad n = 1, 2, \dots$$

mentre le energie associate da

$$E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} \quad , \quad n = 1, 2, \dots$$

Riscriviamo quindi il potenziale V come il potenziale V_{box} della buca quadra più un termine perturbativo V' . In particolare, quest'ultimo può essere scritto come

$$V' = V_0 \vartheta\left(x - \frac{L}{2}\right) \vartheta(L - x)$$

dove le funzioni theta di Heaviside così fatte ci dicono che V' contribuisce con un termine V_0 soltanto nella regione per $L/2 < x < L$.

A questo punto calcoliamo l'energia al primo ordine per il ground state. Per la teoria perturbativa indipendente dal tempo al primo ordine si ha che $E_1^{(1)} = E_1^{(0)} + \delta E_1^{(1)}$, dove la correzione al primo ordine $\delta E_1^{(1)}$ è data dall'elemento di matrice della perturbazione rispetto al ground state imperturbato del sistema:

$$\delta E_1^{(1)} = \langle 1^{(0)} | V'(x) | 1^{(0)} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_1^*(x) V'(x) \psi_1(x)$$

Una volta che esplicitiamo $V(x)$, l'integrale risulta avere contribuito non nullo soltanto nella regione per $L/2 < x < L$, per cui

$$\delta E_1^{(1)} = V_0 \int_{L/2}^L dx \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) = \frac{V_0}{L} \int_{L/2}^L dx \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right)\right]$$

avendo usato la relazione trigonometrica $2 \sin^2 \alpha = 1 - \cos(2\alpha)$ nell'ultimo passaggio.

Se adesso operiamo il cambiamento di variabile

$$z = \frac{2\pi x}{L} \implies x = \frac{Lz}{2\pi} \quad , \quad dx = \frac{L dz}{2\pi}$$

Possiamo riscrivere l'integrale come

$$\frac{V_0}{L} \int_{L/2}^L dx \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right)\right] = \frac{V_0}{2\pi} \int_{\pi}^{2\pi} dz (1 - \cos z) = \frac{V_0}{2}$$

Abbiamo quindi trovato che la correzione al primo ordine al ground state imperturbato è pari a metà del potenziale. Il livello di energia corretto risulta dunque essere

$$E_1^{(1)} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} + \frac{V_0}{2}$$

Passiamo al punto b). Cerchiamo, fissati i valori forniti dal testo per la massa e per la larghezza della buca, il valore che deve avere V_0 per essere uguale a $0.2E_1^{(1)}$. Tale condizione può essere scritta come

$$E_1^{(1)} = 5V_0 \iff \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} + \frac{V_0}{2} = 5V_0 \implies V_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{9mL^2}$$

Se in tale espressione estrapoliamo l'espressione dell'energia del ground state imperturbato possiamo scrivere ancora:

$$V_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{9mL^2} = \frac{2}{9} E_1^{(0)} \simeq 0.22 E_1^{(0)}$$

Da quest'ultima espressione deduciamo che $V_0 \sim 20\%E_1^{(0)}$ e che $\delta E_1^{(1)} \sim 10\%E_1^{(1)}$.

A questo punto ricaviamo il valore di V_0 sostituendo i valori numerici. Cerchiamo di far spuntare quantità note moltiplicando e dividendo per c^2 , in modo che al denominatore abbiamo la massa della particella che è data dal testo e al numeratore abbiamo la quantità $\hbar c$, che in questo caso conviene esprimere come 0.2 GeV fm :

$$V_0 = \frac{(\hbar c)^2 \pi^2}{9(mc^2)L^2} = \frac{4 \cdot 10^{-2} \text{ GeV}^2 \text{ fm}^2 \cdot 10}{9 \cdot 1 \text{ GeV} \cdot 4 \text{ fm}^2} = \frac{1}{90} \text{ GeV} \approx 11 \text{ MeV}$$

Passiamo ora al quesito c). Nella condizione $V_0 \ll E$ (in cui siamo perché $V_0 \sim 20\%E$, dobbiamo calcolare l'energia dello stato fondamentale con l'approssimazione WKB.

In questo caso ci troviamo davanti ad una buca con due pareti verticali, quindi la condizione per ottenere i livelli di energie approssimati è

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = n\pi\hbar \quad , \quad n = 1, 2, \dots$$

Nel problema in esame i turning points x_1 e x_2 sono $x_1 = 0$ e $x_2 = L$. Sostituendo poi l'espressione del potenziale otteniamo

$$\begin{aligned} \int_0^L p(x) dx &= \int_0^L \sqrt{2m[E - V(x)]} dx = \int_0^{L/2} \sqrt{2mE} dx + \int_{L/2}^L \sqrt{2m(E - V_0)} dx = \\ &= \sqrt{2mE} \frac{L}{2} + \sqrt{2m(E - V_0)} \frac{L}{2} = \sqrt{2m} \frac{L}{2} (\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}) = n\pi\hbar \end{aligned}$$

In particolare l'ultima uguaglianza può essere riscritta come

$$\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0} = \frac{2n\pi\hbar}{\sqrt{2m}L}$$

A questo punto eleviamo entrambi i membri al quadrato:

$$E + E - V_0 + 2\sqrt{E(E - V_0)} = \frac{4n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} = 4E_n^{(0)}$$

A partire da tale relazione dobbiamo ricavare E . Per fare ciò isoliamo la radice al primo membro e poi eleviamo al quadrato:

$$\begin{aligned} 2\sqrt{E(E - V_0)} &= 4E_n^{(0)} - 2E + V_0 \\ \implies 4E(E - V_0) &= 16(E_n^{(0)})^2 + 4E^2 + V_0^2 - 16EE_n^{(0)} - 4EV_0 + 8V_0E_n^{(0)} \\ \implies 16(E_n^{(0)})^2 + V_0^2 - 16EE_n^{(0)} + 8V_0E_n^{(0)} &= 0 \end{aligned}$$

da cui infine si ottiene

$$E = E_n^{(0)} + \frac{V_0}{2} + \frac{V_0^2}{16E_n^{(0)}}$$

Notiamo che tale espressione è data dal risultato ottenuto con la teoria perturbativa più un termine aggiuntivo $\frac{V_0^2}{16E_n^{(0)}}$. Se però ora sfruttiamo la condizione $V_0 \ll E$ fornita dal testo, tale energia si riduce semplicemente a

$$E_n^{(0)} + \frac{V_0}{2}$$

Che è l'espressione che si ottiene con la teoria perturbativa.

Svolgiamo infine il punto d). Facciamo un confronto utilizzando i valori numerici ottenuti prima. Riscriviamo l'espressione dei livelli energetici ottenuti per la WKB nel caso $n = 1$ come

$$E = E_1^{(0)} + \frac{V_0}{2} \left(1 + \frac{V_0}{8E_1^{(0)}} \right)$$

Utilizzando i valori $V_0 = 1.1 \cdot 10^{-2}$ GeV, $E_1^{(0)} = 5V_0 = 5 \cdot 10^{-2}$ GeV, si trova che

$$\frac{V_0}{8E_1^{(0)}} \approx 0.03 \ll 1$$

Possiamo allora effettivamente dire che, per i valori trovati nel punto b), siamo nel caso in cui tale termine risulta trascurabile e pertanto il risultato della WKB coincide con quello della teoria perturbativa.

Esercizio 2.2

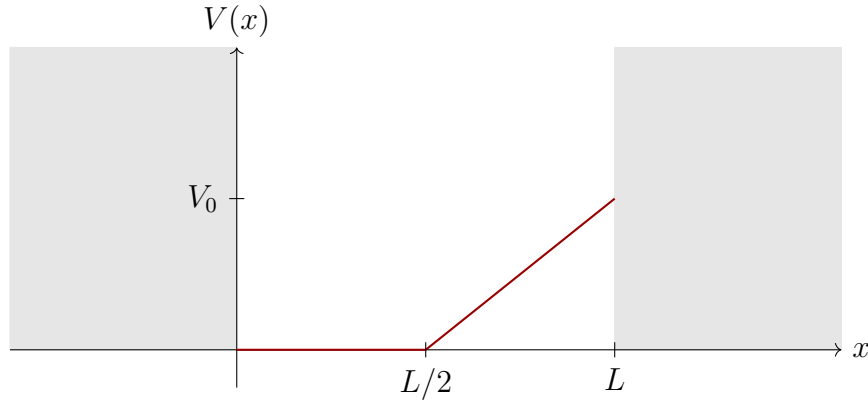
An electron is in a potential given by

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{for } x < 0 \\ 0 & \text{for } 0 < x < \frac{L}{2} \\ V_0 \left(\frac{2x}{L} - 1 \right) & \text{for } \frac{L}{2} < x < L \\ \infty & \text{for } x > L \end{cases}$$

- Use perturbation theory to calculate the energy¹¹ of the ground state.
- What is the condition on V_0 to have perturbation theory valid?
- Put $V(x) = 0$ for $x > L$ and $E < V_0$. Use WKB to calculate the penetrability of the barrier for $V_0 = 4$ MeV, $L = 10$ fm and $E = V_0/2$.

Svolgimento

Per prima cosa riportiamo in un grafico l'andamento del potenziale:



Svolgiamo il punto a). La correzione al primo ordine all'energia del ground state è data da

$$\begin{aligned} \delta E_1^{(1)} &= \langle \psi_1^{(0)} | V' | \psi_1^{(0)} \rangle = \int_{L/2}^L dx V_0 \left(\frac{2x}{L} - 1 \right) |\psi_1^{(0)}|^2 = \int_{L/2}^L dx V_0 \left(\frac{2x}{L} - 1 \right) \frac{2}{L} \sin^2 \left(\frac{\pi x}{L} \right) = \\ &= \frac{V_0}{L} \left[\int_{L/2}^L dx \left(\frac{2x}{L} - 1 \right) - \int_{L/2}^L dx \left(\frac{2x}{L} - 1 \right) \cos \left(\frac{2\pi x}{L} \right) \right] \end{aligned}$$

dove abbiamo sfruttato la relazione trigonometrica $2 \sin^2 \alpha = 1 - \cos(2\alpha)$ nell'ultimo passaggio.

Calcoliamo adesso ciascun integrale: per il primo si ha banalmente

$$\int_{L/2}^L dx \left(\frac{2x}{L} - 1 \right) = \left[\frac{x^2}{L} - x \right]_{L/2}^L = L - L - \frac{L}{4} + \frac{L}{2} = \frac{L}{4}$$

¹¹Quando nel testo non è specificato, si intende fin al primo ordine.

Per quanto riguarda il secondo integrale, esso si può ulteriormente spezzare in due integrali:

$$\int_{L/2}^L dx \left(\frac{2x}{L} - 1 \right) \cos \left(\frac{2\pi x}{L} \right) = \int_{L/2}^L dx \frac{2x}{L} \cos \left(\frac{2\pi x}{L} \right) - \int_{L/2}^L dx \cos \left(\frac{2\pi x}{L} \right)$$

i quali, ponendo

$$y = \frac{2\pi x}{L} \implies dy = \frac{2\pi dx}{L}$$

Possono esse riscritti come

$$\frac{L}{2\pi^2} \int_{\pi}^{2\pi} dy y \cos y - \frac{L}{2\pi} \int_{\pi}^{2\pi} dy \cos y$$

Per il secondo integrale otteniamo subito che

$$\frac{L}{2\pi} \int_{\pi}^{2\pi} dy \cos y = \frac{L}{2\pi} [\sin y]_{\pi}^{2\pi} = 0$$

Il primo invece va risolto per parti: ponendo $f = y$ e $g = \cos y$, si ha

$$\frac{L}{2\pi^2} \int_{\pi}^{2\pi} y \cos y dy = \frac{L}{2\pi^2} \left\{ [y \sin y]_{\pi}^{2\pi} - \int_{\pi}^{2\pi} \sin y dy \right\} = \frac{L}{2\pi^2} [\cos y]_{\pi}^{2\pi} = \frac{L}{\pi^2}$$

Mettendo insieme i vari contributi troviamo che

$$\delta E_1^{(1)} = \frac{V_0}{L} \left(\frac{L}{4} - \frac{L}{\pi^2} \right) = V_0 \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{\pi^2} \right)$$

e pertanto l'energia del ground state corretta al primo ordine risulta essere

$$E_1^{(1)} = E_1^{(0)} + \delta E_1^{(1)} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} + V_0 \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{\pi^2} \right)$$

Passiamo al punto b). Ricordiamo che la condizione affinché la teoria perturbativa sia valida è che il rapporto tra la correzione di energia e la differenza di energia tra lo stato imperturbato e quello più vicino deve essere molto minore di 1; in particolare per il ground state si deve avere

$$\left| \frac{\delta E_1^{(1)}}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \right| \ll 1$$

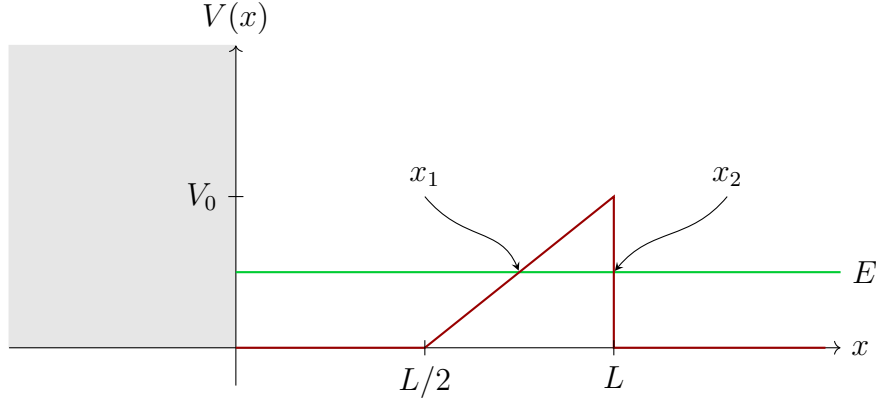
Esplicitando quanto trovato, tale condizione si riscrive come

$$\left| \frac{V_0 \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{\pi^2} \right)}{-3 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}} \right| = \frac{mL^2 V_0 (\pi^2 - 4)}{6\hbar^2} \ll 1$$

da cui si ricava che la condizione per V_0 è

$$V_0 \ll \frac{6\hbar^2}{mL^2(\pi^2 - 4)}$$

Svolgiamo ora il punto c). Adesso il potenziale cambia e diventa nullo nella regione per xL , dunque graficamente adesso la situazione è la seguente:



In questo caso dobbiamo usare la WKB per calcolare la penetrabilità della barriera (quindi siamo nel caso in cui $E < V_0$), che è data da

$$T \approx \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} dx \sqrt{2m[V(x) - E]} \right\}$$

dove x_1 e x_2 sono i turning points. La prima cosa da fare è proprio individuare questi ultimi. Si intuisce facilmente che $x_2 = L$, mentre per x_1 dobbiamo uguagliare energia e potenziale:

$$E = V_0 \left(\frac{2x_1}{L} - 1 \right) \implies x_1 = \frac{L}{2} \left(\frac{E}{V_0} + 1 \right)$$

Se adesso applichiamo la condizione fornita dal testo per cui $E = V_0/2$, troviamo che

$$x_1 = \frac{L}{2} \left(\frac{V_0}{2V_0} + 1 \right) = \frac{3}{4}L$$

Possiamo quindi calcolare

$$T = \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} dx \sqrt{2m \left[V_0 \left(\frac{2x}{L} - 1 \right) - E \right]} \right\}$$

Introduciamo la variabile

$$z = 2m \left[V_0 \left(\frac{2x}{L} - 1 \right) - E \right] \implies dz = \frac{4mV_0}{L} dx$$

da cui segue che

$$\begin{aligned} z_1 &= 2m \left[V_0 \left(\frac{2x_1}{L} - 1 \right) - E \right] = 2m \left\{ V_0 \left[\frac{2}{L} \frac{L}{2} \left(\frac{E}{V_0} + 1 \right) - 1 \right] - E \right\} = 0 \\ z_2 &= 2m \left[V_0 \left(\frac{2x_2}{L} - 1 \right) - E \right] = 2m(V_0 - E) \end{aligned}$$

Usando tale cambio di variabile, l'integrale si può riscrivere come

$$T \approx \exp \left\{ -\frac{2L}{4mV_0\hbar} \int_0^{2m(V_0-E)} dz \sqrt{z} \right\} = \exp \left\{ -\frac{L}{3m\hbar V_0} [2m(V_0 - E)]^{\frac{3}{2}} \right\}$$

Passiamo infine il punto d). Per prima cosa moltiplichiamo e dividiamo per c^3 in modo da far spuntare quantità note, in particolare $\hbar c$ e mc^2 . Sostituendo poi i valori numerici forniti dal testo, si ha

$$\begin{aligned}
 T &\approx \exp\left\{-\frac{L}{3mc^2\hbar cV_0}[2mc^2(V_0 - E)]^{\frac{3}{2}}\right\} = \\
 &= \exp\left\{-\frac{10 \text{ fm}}{0.5 \text{ MeV} \cdot 2 \cdot 10^2 \text{ MeV fm} \cdot 3 \cdot 4 \text{ MeV}}[2 \cdot 0.5 \text{ MeV}(4 - 2)\text{MeV}]^{\frac{3}{2}}\right\} = \\
 &= \exp\left\{-\frac{1}{120}2^{\frac{3}{2}}\right\} = \exp\left\{-\frac{\sqrt{2}}{60}\right\} = 0.98
 \end{aligned}$$

3 Lezione 3

4 Lezione 4

5 Lezione 5

Esercizio 5.1

A particle in a one-dimensional harmonic oscillator is subject to the potential

$$V'(t) = \hbar\omega \frac{\alpha^3 x^3 - 1}{1 + (t/\tau)^2} \quad \text{with} \quad \alpha = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}$$

Assuming the particle is in the ground state at $t = -\infty$:

- Determine all the possible transitions allowed at first order of perturbation theory.
- Calculate the probability¹² of such transitions (excluding $0 \rightarrow 0$) for $\omega = 10^{15} \text{ s}^{-1}$ and $\tau = 10^{-15} \text{ s}$.
- Is perturbation theory applicable for case b)? Briefly explain your answer.

Svolgimento

Si tratta di un problema di teoria perturbativa dipendente dal tempo.

Svolgiamo innanzitutto il punto a). Per prima cosa dobbiamo determinare le transizioni permesse. Ricordiamo innanzitutto che il potenziale dell'oscillatore armonico è

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

mentre i livelli di energia sono dati da

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

Inoltre possiamo scrivere l'operatore posizione in termini degli operatori di creazione e annichilazione come

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger)$$

Gli operatori di creazione annichilazione agiscono sugli autostati dell'oscillatore armonico nel seguente modo:

$$\begin{aligned} a |n\rangle &= \sqrt{n} |n-1\rangle \quad , \quad a |0\rangle = 0 \\ a^\dagger |n\rangle &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle \end{aligned}$$

L'ampiezza di transizione dal ground state $|0\rangle$ allo stato finale $|f\rangle$ è data da

$$d_{0 \rightarrow f} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega_{f,0}t} V'_{f,0}(t)$$

dove

$$\omega_{f,0} = \frac{E_f - E_0}{\hbar} \quad , \quad V'_{f,0} = \langle f | V' | 0 \rangle$$

¹²Il testo non lo dice esplicitamente, ma richiede di calcolare la probabilità di transizione al tempo $t = +\infty$.

Per capire quali sono le transizioni permesse dobbiamo andare a vedere quali sono quelle aventi ampiezza di transizione non nulla. Tale condizione implica che deve essere non nullo l'elemento di matrice $V'_{f,0}$. esplicitamente, tale condizione significa che

$$\begin{aligned}\langle f|V'|0\rangle &= \frac{\hbar\omega}{1+(t/\tau)^2} \langle f|\alpha^3 x^3 - 1|0\rangle \neq 0 \\ \implies \langle f|\alpha^3 x^3|0\rangle - \langle f|0\rangle &\neq 0\end{aligned}$$

Il termine $\langle f|0\rangle$ è diverso da 0 quando $|f\rangle = |0\rangle$, ma il testo diceva di escludere le transizioni $0 \rightarrow 0$, per cui bisogna soltanto ricavare in che caso si ha $\langle f|\alpha^3 x^3|0\rangle \neq 0$.

Se adesso esprimiamo x in termini degli operatori di creazione e annichilazione ma utilizzando la definizione di α fornita dal testo, abbiamo

$$x = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}(a + a^\dagger)$$

e dunque

$$x^3 = \frac{1}{2^{\frac{3}{2}}\alpha^3}(a + a^\dagger)^3$$

In questo modo la condizione da imporre diventa

$$\frac{1}{2^{\frac{3}{2}}} \langle f|(a + a^\dagger)^3|0\rangle \neq 0$$

Osserviamo che possiamo riscrivere l'operatore come

$$(a + a^\dagger)^3 = (a + a^\dagger)(a^2 + a^{\dagger 2} + aa^\dagger + a^\dagger a)$$

Piuttosto che svolgere questo prodotto e vedere poi che cosa si ottiene dall'applicazione di ciascun termine a $|0\rangle$, possiamo già fare una considerazione: ogni volta che applichiamo un prodotto di operatori che ha come ultimo termine a allo stato $|0\rangle$, esso darà 0, dunque possiamo trascurarli. Nel nostro caso operatori del genere sono a^2 e $a^\dagger a$, che per quanto detto posso essere omessi. In definitiva, possiamo considerare soltanto l'operatore

$$(a + a^\dagger)^3 = (a + a^\dagger)(a^{\dagger 2} + aa^\dagger) = aa^{\dagger 2} + a^2 a^\dagger + a^{\dagger 3} + a^\dagger aa^\dagger$$

Osserviamo che è possibile scartare anche il termine $a^2 a^\dagger$ in quanto applicandolo a $|0\rangle$ si ha

$$a^2 a^\dagger |0\rangle = a^2 |1\rangle = a |0\rangle = 0$$

Vediamo allora cosa danno gli altri termini:

$$\begin{aligned}aa^{\dagger 2} |0\rangle &= aa^\dagger |1\rangle = \sqrt{2}a |2\rangle = 2 |1\rangle \\ a^{\dagger 3} |0\rangle &= a^{\dagger 2} |1\rangle = \sqrt{2}a^\dagger |2\rangle = \sqrt{6} |3\rangle \\ a^\dagger aa^\dagger |0\rangle &= a^\dagger a |1\rangle = a^\dagger |0\rangle = |1\rangle\end{aligned}$$

In definitiva abbiamo che

$$\langle f|(a + a^\dagger)^3|0\rangle = 3 \langle f|1\rangle + \sqrt{6} \langle f|3\rangle = 3\delta_{f,1} + \sqrt{6}\delta_{f,3}$$

dove nell'ultimo passaggio abbiamo usato l'ortonormalità degli autostati dell'oscillatore armonico.

Dunque le transizioni permesse sono $0 \rightarrow 1$ e $0 \rightarrow 3$, in quanto sono le uniche per cui tale termine è non nullo. Notiamo che non è permessa la transizione $0 \rightarrow 2$, come ci si poteva aspettare per questioni di simmetria. Infatti, l'interazione è dispari, poiché dipende da x^3 , mentre gli stati $|0\rangle$ e $|2\rangle$ sono pari, dunque l'elemento di matrice corrispondente sarà nullo. Passiamo al quesito b). Dobbiamo calcolare il valore delle probabilità di tali transizioni in corrispondenza di certi valori di ω e τ .

In termini delle transizioni permesse, $V'_{f,0}$ si scrive come

$$V'_{f,0} = \frac{\hbar\omega}{1 + (t/\tau)^2} \frac{1}{2^{\frac{3}{2}}} (3\delta_{f,1} + \sqrt{6}\delta_{f,3})$$

Distinguiamo i due casi:

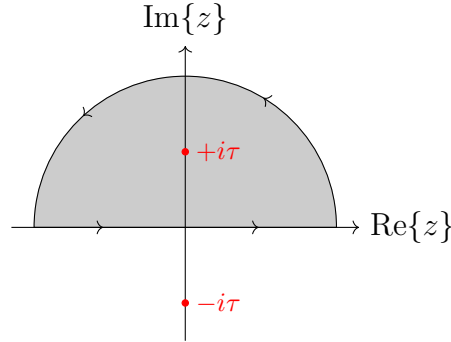
- Transizione $0 \rightarrow 1$. In questo caso abbiamo che

$$\omega_{1,0} = \frac{E_1 - E_0}{\hbar} = \frac{(1 + \frac{1}{2})\hbar\omega - \frac{1}{2}\hbar\omega}{\hbar} = \omega$$

quindi l'ampiezza di transizione sarà data da

$$d_{0 \rightarrow 1} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \frac{3}{2^{\frac{3}{2}}} \frac{\hbar\omega}{1 + (t/\tau)^2} = -i \frac{3}{2^{\frac{3}{2}}} \omega \tau^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dt \frac{e^{i\omega t}}{t^2 + \tau^2}$$

Per risolvere quest'integrale applichiamo il metodo dei residui.



In particolare, la funzione integranda ha due poli in $t = \pm i\tau$, ma poiché dobbiamo prendere il contorno superiore il teorema dei residui ci dà

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \frac{e^{i\omega t}}{t^2 + \tau^2} &= 2\pi i \operatorname{Res}_{t=i\tau} \left[\frac{e^{i\omega t}}{t^2 + \tau^2} \right] \\ &= 2\pi i \lim_{z \rightarrow i\tau} (z - i\tau) \frac{e^{i\omega z}}{(z + i\tau)(z - i\tau)} = 2\pi i \frac{e^{-\omega\tau}}{2i\tau} = \frac{\pi e^{-\omega\tau}}{\tau} \end{aligned}$$

In definitiva

$$d_{0 \rightarrow 1} = -i \frac{3}{2^{\frac{3}{2}}} \omega \tau^2 \frac{\pi e^{-\omega\tau}}{\tau} = -i \frac{3}{2^{\frac{3}{2}}} \omega \tau \pi e^{-\omega\tau}$$

e quindi la probabilità di transizione da $|0\rangle$ a $|1\rangle$ sarà pari a

$$P_{0 \rightarrow 1} = |d_{0 \rightarrow 1}|^2 = \frac{9\pi^2}{8} (\omega\tau)^2 e^{-2\omega\tau}$$

- Transizione $0 \rightarrow 3$. In questo caso abbiamo che

$$\omega_{3,0} = \frac{E_3 - E_0}{\hbar} = \frac{(3 + \frac{1}{2})\hbar\omega - \frac{1}{2}\hbar\omega}{\hbar} = 3\omega$$

quindi l'ampiezza di transizione sarà data da

$$d_{0 \rightarrow 3} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i3\omega t} \frac{\sqrt{6}}{2^{\frac{3}{2}}} \frac{\hbar\omega}{1 + (t/\tau)^2} = -i \frac{\sqrt{6}}{2^{\frac{3}{2}}} \omega \tau^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dt \frac{e^{i3\omega t}}{t^2 + \tau^2}$$

Procedendo in maniera analoga al caso precedente, il teorema dei residui ci dà

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \frac{e^{i3\omega t}}{t^2 + \tau^2} &= 2\pi i \operatorname{Res}_{t=i\tau} \left[\frac{e^{i3\omega t}}{t^2 + \tau^2} \right] \\ &= 2\pi i \lim_{z \rightarrow i\tau} (z - i\tau) \frac{e^{i3\omega z}}{(z + i\tau)(z - i\tau)} = 2\pi i \frac{e^{-3\omega\tau}}{2i\tau} = \frac{\pi e^{-3\omega\tau}}{\tau} \end{aligned}$$

In definitiva

$$d_{0 \rightarrow 3} = -i \frac{\sqrt{6}}{2^{\frac{3}{2}}} \omega \tau^2 \frac{\pi e^{-3\omega\tau}}{\tau} = -i \frac{\sqrt{6}}{2^{\frac{3}{2}}} \omega \tau \pi e^{-3\omega\tau}$$

e quindi la probabilità di transizione da $|0\rangle$ a $|3\rangle$ sarà pari a

$$P_{0 \rightarrow 3} = |d_{0 \rightarrow 3}|^2 = \frac{3\pi^2}{4} (\omega\tau)^2 e^{-6\omega\tau}$$

Troviamo adesso un valore numerico per tale probabilità con i dati forniti dal testo. Osserviamo che per tali valori si ha $\omega\tau = 1$, dunque:

$$\begin{aligned} P_{0 \rightarrow 1} &= \frac{9\pi^2}{8} e^{-2} \approx 1.5 \\ P_{0 \rightarrow 3} &= \frac{3\pi^2}{4} e^{-6} \approx 0.02 \end{aligned}$$

Svolgiamo il punto c). I valori trovati nel quesito b) ci dicono che la teoria perturbativa non è applicabile per la transizione $0 \rightarrow 1$, in quanto la probabilità di transizione è addirittura maggiore di 1¹³. Per la transizione $0 \rightarrow 3$, invece si ha che $P \ll 1$, dunque la teoria perturbativa è valida.

¹³Tale risultato può essere collegato col fatto che l'espansione perturbativa si fa attorno ad uno stato che deve essere stabile, per cui lo stato $|1\rangle$ potrebbe non essere stabile in quanto subisce continuamente transizioni verso altri stati e in conseguenza a ciò non è valida la teoria perturbativa.