



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.

# 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:

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

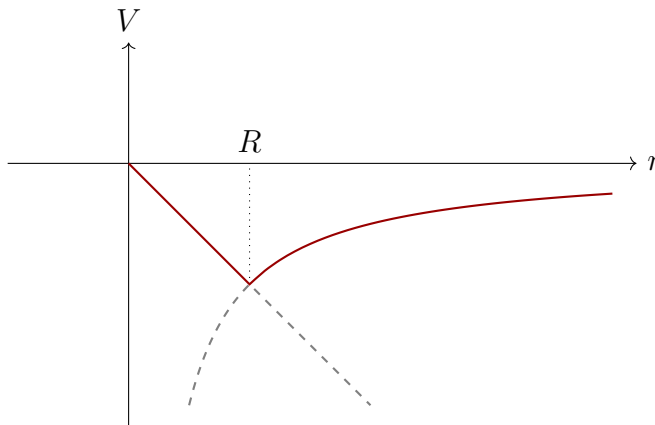
- a) Use perturbation theory to calculate the first order correction to the ground state for  $Z = 8$  and  $A = 16$ . (It is known that  $R = R_0 A^{\frac{1}{3}}$  with  $R_0 = 1.2 \cdot 10^{-15} \text{ m} = 1.2 \text{ fm}$ )
- b) Do you expect perturbation theory to be more valid for larger  $A$ ?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

---

<sup>1</sup>Questa 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  $H_0$ ,<sup>2</sup> 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 formule<sup>3</sup>:

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

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

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

---

<sup>2</sup>Osserviamo che tale hamiltoniana ha una parte di potenziale, ma ciò non ci spaventa perché conosciamo esattamente tale problema.

<sup>3</sup>Notiamo 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  $\alpha$ , è uguale proprio ad  $\alpha^{-1}$ . 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  $\alpha$  per questi valori. Sfruttando il fatto che  $R = R_0 A^{\frac{1}{3}}$  riscriviamo  $\alpha$  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:

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

dove<sup>4</sup>  $\gamma = 3.6 \cdot 10^{-4}$ . 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  $\alpha^{-2}$ . 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  $\alpha^2$  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

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

---

<sup>4</sup>Questo 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  $\gamma$ , 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  $\omega/\Omega$  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  $\omega/\Omega$  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  $\omega/\Omega$ , dividiamo per  $\Omega^2$ :

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

### 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  $\omega$  where it is maximal.

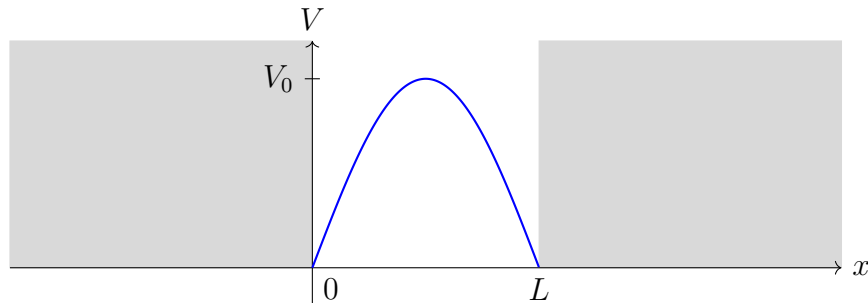
- d) For  $L = 0.2$  nm and  $V_0 = 0.4$  eV is time-dependent perturbation theory expected to be valid if  $T = \frac{15\pi}{\omega_{1,3}}$ ?

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 da<sup>5</sup>

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

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  $n = 1$ ,

---

<sup>5</sup>Attenzione! 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 nanometri<sup>6</sup>, 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

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

---

<sup>6</sup>In 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 riscrivere<sup>7</sup>

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

I due termini che compaiono tra parentesi hanno un nome: il primo è il termine di emissione stimolata, il secondo è il termine di assorbimento<sup>8</sup>. 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 ( $E_f > E_i$ );

<sup>7</sup>Precisiamo che un risultato del genere si ottiene ogni qualvolta abbiamo una perturbazione sinusoidale.

<sup>8</sup>Non 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<sup>9</sup>. 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  $\alpha = \Delta\omega T$ )

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

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.

---

<sup>9</sup>La prof dice che in questo caso il termine di assorbimento non solo domina, ma è l'unico presente. Al momento non ho ben chiaro perché. Work in progress