Esercizio

Un elettrone è vincolato a muoversi su una sfera di raggio R ed è soggetto ad un campo magnetico diretto lungo l'asse x, l'hamiltoniana del sistema è $H = \frac{L^2}{2mR^2} + \mu B (L_x + 2S_x)$

All'istante iniziale lo stato della particella è descritto dallo spinore $\chi(t=0) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \begin{pmatrix} \cos\theta \\ \cos\theta \end{pmatrix}$

1) Determinare lo spinore all'istante generico t
2) determinare in funzione del tempo i possibili risultati di una misura di L_z e J_z, dove J_z è la componente del momento angolare totale, e le loro probabilità.

μ = magnetone di Bohr

I gradi di libertà del sistema sono quelli legati a $\underline{r}$ e quelli legati allo spin.

La generica f.d.o. nello spazio delle configurazioni è $\psi(\underline{r}) = \psi(R, \theta, \varphi)$

se considero lo spin avrò $\psi_\pm(r) = \psi(R, \theta, \varphi)$

dove $\psi(r) = \psi_+(R, \theta, \varphi)|+\rangle + \psi_-(R, \theta, \varphi)|-\rangle$

N.B. quando scrivo θ parlo dell'angolo riferito all'asse z nelle coordinate polari $\Rightarrow$ lo spinore del problema è esplicitamente riferito all'asse z

$$\psi(0) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \cos\theta \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

elettrone SPIN $\frac{1}{2}$

Esaminiamo la parte spaziale $\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \cos\theta = \frac{1}{\sqrt{2}} Y_{1,0}$

$$\Rightarrow \quad |\psi\rangle_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} Y_{1,0}(\theta,\varphi) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} Y_{1,0}(\theta,\varphi) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$|\psi\rangle_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} |1,0\rangle|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1,0\rangle|-\rangle$$

$$|\psi\rangle_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} |1,0\rangle|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1,0\rangle|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle$$

$$|\psi\rangle_t = -\frac{i}{2}\,\mathrm{sen}\,\mu B t\,\left|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\cos\mu B t\left(\sqrt{\frac{2}{3}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\right) +$$

$$-\frac{i}{2}\,\mathrm{sen}\,\mu B t\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\right) - \frac{i}{2}\,\mathrm{sen}\,\mu B t\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\right) +$$

$$+\frac{1}{\sqrt{2}}\cos\mu B t\left(\sqrt{\frac{2}{3}}\left|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\right) - \frac{i}{2}\,\mathrm{sen}\,\mu B t\left|\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right\rangle$$

Possibili valori di una misura di J_z sono $\frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$

$$P\left(J_z = \frac{3}{2}\right) = \frac{1}{4}\,\mathrm{sen}^2\mu B t$$

$$P\left(J_z = \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{3}\cos^2\mu B t + \frac{1}{6}\cos^2\mu B t + \frac{1}{12}\,\mathrm{sen}^2\mu B t + \frac{1}{6}\,\mathrm{sen}^2\mu B t$$

$$P\left(J_z = -\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{12}\,\mathrm{sen}^2\mu B t + \frac{1}{6}\,\mathrm{sen}^2\mu B t + \frac{1}{3}\cos^2\mu B t + \frac{1}{6}\cos^2\mu B t$$

$$P\left(J_z = -\frac{3}{2}\right) = \frac{1}{4}\,\mathrm{sen}^2\mu B t$$

$$P\left(J_z = \frac{3}{2}, J_z = \frac{1}{2}, J_z = -\frac{3}{2}, J_z = -\frac{1}{2}\right) = 1$$

2) Riscriviamo ora $|\Psi\rangle_t$ nella base di partenza

$$|\Psi\rangle_t = \left(\frac{|+\rangle+|-\rangle}{\sqrt{2}}\right)\left[-\frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\mu B t}|1,-1\rangle_x + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\mu B t}|1,1\rangle_x\right] =$$

$$= \frac{|+\rangle+|-\rangle}{\sqrt{2}}\left[-\frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\mu B t}\left(\frac{1}{2}|1,1\rangle - \frac{\sqrt{2}}{2}|1,0\rangle + \frac{1}{2}|1,-1\rangle\right) + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\mu B t}\left(\frac{1}{2}|1,1\rangle + \frac{\sqrt{2}}{2}|1,0\rangle + \frac{1}{2}|1,-1\rangle\right)\right]$$

$$= \frac{|+\rangle+|-\rangle}{\sqrt{2}}\left[-\frac{1}{2\sqrt{2}} e^{i\mu B t}|1,1\rangle + \frac{1}{2} e^{i\mu B t}|1,0\rangle - \frac{1}{2\sqrt{2}} e^{i\mu B t}|1,-1\rangle +\right.$$

$$\left. + \frac{1}{2\sqrt{2}} e^{-i\mu B t}|1,1\rangle + \frac{1}{2} e^{-i\mu B t}|1,0\rangle + \frac{1}{2\sqrt{2}} e^{-i\mu B t}|1,-1\rangle\right] =$$

$$= \frac{|+\rangle+|-\rangle}{\sqrt{2}}\left[-\frac{i}{\sqrt{2}} \operatorname{sen}\mu B t\,|1,1\rangle + \cos\mu B t\,|1,0\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}} \operatorname{sen}\mu B t\,|1,-1\rangle\right]$$

Scrittura abbreviata $|l_z, s_z\rangle$

$$|\Psi\rangle_t = -\frac{i}{2}\operatorname{sen}\mu B t\,|1,\tfrac{1}{2}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\cos\mu B t\,|0,\tfrac{1}{2}\rangle - \frac{i}{2}\operatorname{sen}\mu B t\,|-1,\tfrac{1}{2}\rangle +$$

$$-\frac{i}{2}\operatorname{sen}\mu B t\,|1,-\tfrac{1}{2}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\cos\mu B t\,|0,-\tfrac{1}{2}\rangle - \frac{i}{2}\operatorname{sen}\mu B t\,|-1,-\tfrac{1}{2}\rangle$$

Quindi $P(l_z = 1) = \frac{1}{4}\operatorname{sen}^2\mu B t + \frac{1}{4}\operatorname{sen}^2\mu B t = \frac{1}{2}\operatorname{sen}^2\mu B t = P(l_z = -1)$

$$P(l_z = 0) = \frac{1}{2}\cos^2\mu B t + \frac{1}{2}\cos^2\mu B t = \cos^2\mu B t$$

N.B. $P(l_z = 1,\ l_z = 0,\ l_z = -1) = 1$

Sia ora $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ il momento angolare totale e $J_z = l_z + s_z$ la sua componente lungo l'asse z $\qquad l = 1,\ s = \frac{1}{2}$

Base di partenza $|L^2, S^2, l_z, s_z\rangle \Rightarrow |L^2, S^2, J^2, J_z\rangle$

Uso tavole coefficienti Clebsch-Gordan

$|1,\tfrac{1}{2}\rangle = |\tfrac{3}{2},\tfrac{3}{2}\rangle$

$|1,-\tfrac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}\rangle + \sqrt{\tfrac{2}{3}}|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle$

$|0,\tfrac{1}{2}\rangle = \sqrt{\tfrac{2}{3}}|\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle$

$|0,-\tfrac{1}{2}\rangle = \sqrt{\tfrac{2}{3}}|\tfrac{3}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle$

$|-1,\tfrac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|\tfrac{3}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle - \sqrt{\tfrac{2}{3}}|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle$

$|-1,-\tfrac{1}{2}\rangle = |\tfrac{3}{2},-\tfrac{3}{2}\rangle$

autovalori di H

$$H\overset{L^2\ S^2\ J^2\ J_z}{|1,\tfrac{1}{2},\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}\rangle} = \Big[\overbrace{2\hbar^2}^{\ell(\ell+1)\hbar^2}\Big(\frac{1}{2mR^2}-\frac{\omega}{\hbar}\Big)+\overbrace{\frac{15}{4}\hbar^2}^{J(J+1)\hbar^2}\frac{\omega}{\hbar}-\frac{\omega}{\hbar}\overbrace{\frac{3}{4}\hbar^2}^{S(S+1)\hbar^2}\Big]|1,\tfrac{1}{2},\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}\rangle$$

$$E_{3/2}=\frac{\hbar^2}{mR^2}-2\omega\hbar+\frac{15}{4}\hbar\omega-\frac{3}{4}\hbar\omega=\frac{\hbar^2}{mR^2}+\omega\hbar$$ energia dello stato $\frac{3}{2}$

$$H|1,\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle = \cdots$$

$$E_{1/2}=\frac{\hbar^2}{mR^2}-2\omega\hbar$$ energia dello stato con mom. angolare totale $\frac{1}{2}$

Quindi

$$|\psi\rangle_t=\sqrt{\frac{2}{3}}\,e^{-i\left(\frac{\hbar^2}{mR^2}+\omega\hbar\right)\frac{t}{\hbar}}|1,\tfrac{1}{2},\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}\rangle-\sqrt{\frac{1}{3}}\,e^{-i\left(\frac{\hbar^2}{mR^2}-2\omega\hbar\right)\frac{t}{\hbar}}|1,\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle$$

$$|\psi\rangle_t=\sqrt{\frac{2}{3}}\,e^{-i\omega t}|1,\tfrac{1}{2},\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}\rangle-\sqrt{\frac{1}{3}}\,e^{+2i\omega t}|1,\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle$$

Riscrivo $|\psi\rangle_t$ in termini degli stati iniziali sapendo che

$$\overset{J^2\ J_z}{|\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}\rangle}=\sqrt{\frac{1}{3}}\underset{L_z\ S_z}{|-1,-\tfrac{1}{2}\rangle}+\sqrt{\frac{2}{3}}\underset{L_z\ S_z}{|0,\tfrac{1}{2}\rangle}$$

$$|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}|-1,-\tfrac{1}{2}\rangle-\sqrt{\frac{1}{3}}|0,\tfrac{1}{2}\rangle$$

$$|\psi\rangle_t=\sqrt{\frac{2}{3}}\,e^{-i\omega t}\Big\{\sqrt{\frac{1}{3}}|-1,-\tfrac{1}{2}\rangle+\sqrt{\frac{2}{3}}|0,\tfrac{1}{2}\rangle\Big\}-\sqrt{\frac{1}{3}}\,e^{+2i\omega t}\Big\{\sqrt{\frac{2}{3}}|-1,-\tfrac{1}{2}\rangle-\sqrt{\frac{1}{3}}|0,\tfrac{1}{2}\rangle\Big\}$$

$$=\frac{\sqrt{2}}{3}e^{-i\omega t}|-1,-\tfrac{1}{2}\rangle+\frac{2}{3}e^{-i\omega t}|0,\tfrac{1}{2}\rangle-\frac{\sqrt{2}}{3}e^{+2i\omega t}|-1,-\tfrac{1}{2}\rangle+\frac{1}{3}e^{+2i\omega t}|0,\tfrac{1}{2}\rangle=$$

$$=e^{\frac{i\omega t}{2}}\Big\{\frac{\sqrt{2}}{3}e^{-\frac{3}{2}i\omega t}|-1,-\tfrac{1}{2}\rangle+\frac{2}{3}e^{-\frac{3}{2}i\omega t}|0,\tfrac{1}{2}\rangle-\frac{\sqrt{2}}{3}e^{\frac{3}{2}i\omega t}|-1,-\tfrac{1}{2}\rangle+\frac{1}{3}e^{\frac{3}{2}i\omega t}|0,\tfrac{1}{2}\rangle=$$

$$=-\frac{\sqrt{2}}{3}2i\,\mathrm{sen}\big(\tfrac{3}{2}\omega t\big)|-1,-\tfrac{1}{2}\rangle+\Big(\frac{2}{3}e^{-\frac{3}{2}i\omega t}+\frac{1}{3}e^{\frac{3}{2}i\omega t}\Big)|0,\tfrac{1}{2}\rangle$$

Esercizio (FALCIONI)

L'Hamiltoniana di una particella di spin 1/2 e massa m vincolata a muoversi sulla superficie di una sfera di raggio R

è
$$H = \frac{L^2}{2mR^2} + \frac{2\omega}{\hbar} \underline{L} \cdot \underline{S} = \frac{L^2}{2mR^2} + \frac{2\omega}{\hbar\, 2}(J^2 - L^2 - S^2)$$

All'istante t=0 lo stato della particella è rappresentato dal seguente spinore
$$\psi(t=0) = Y_1^0(\theta,\varphi)\chi_+ = |\underset{\ell^2}{1}\ \underset{s^2}{\tfrac{1}{2}}\ \underset{L_z}{0}\ \underset{S_z}{\tfrac{1}{2}}\rangle \to |\ell^2 s^2 J^2 J_z\rangle$$

essendo χ_+ autostato di $\hat{S}_z$ con autovalore $+\hbar/2$

a) Determinare l'evoluzione temporale $\psi(t)$

b) Determinare in funzione di t la probabilità di trovare la particella con $S_z = -\hbar/2$ e $\theta < \pi/3$

N.B. $2\underline{L}\cdot\underline{S} = J^2 - L^2 - S^2 \qquad J^2 = L^2 + S^2 + 2\underline{L}\cdot\underline{S}$

$\psi(0)$ è autostato di L^2, L_z, S^2, S_z essendo χ_+ autostato con autovalore $+\hbar/2$

tuttavia H non commuta né con L_z né con S_z quindi in questa base H non è diagonale

Sia $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ in tal caso H diventa

$$H = \frac{L^2}{2mR^2} + \frac{\omega}{\hbar}(J^2 - L^2 - S^2) = \left(\frac{1}{2mR^2} - \frac{\omega}{\hbar}\right)L^2 + \frac{\omega}{\hbar}J^2 - \frac{\omega}{\hbar}S^2$$

$$|\psi\rangle_0 = |\ell=1,\ \ell_z=0\rangle|+\rangle = |\underset{L^2}{1},\underset{L_z}{0}\rangle|\underset{S^2}{1/2},\underset{S_z}{1/2}\rangle$$

Ricordiamo le regole di somma dei momenti angolari $\ell + \ell' = \begin{cases} \ell+\ell' \\ \text{valori intermedi} \\ |\ell-\ell'| \end{cases}$

nel nostro caso $\ell = 1,\quad S = 1/2$

Scrivo lo stato iniziale nella base $|L^2, S^2, J^2, J_z\rangle$

Usando tavole coefficienti Clebsch-Gordan

$$|\underset{L^2}{1},\underset{S^2}{\tfrac{1}{2}},\underset{L_z}{0},\underset{S_z}{\tfrac{1}{2}}\rangle = \sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|\underset{L^2}{1},\underset{S^2}{\tfrac{1}{2}},\underset{J^2}{\tfrac{3}{2}},\underset{J_z}{\tfrac{1}{2}}\rangle - \sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|\underset{L^2}{1},\underset{S^2}{\tfrac{1}{2}},\underset{J^2}{\tfrac{1}{2}},\underset{J_z}{\tfrac{1}{2}}\rangle \equiv |\psi\rangle_0$$

$$\psi(t) = \left(\frac{2}{3} e^{-i\omega t} + \frac{1}{3} e^{2i\omega t}\right) Y_1^0 \chi_+ + \left(\frac{\sqrt{2}}{3} e^{-i\omega t} - \frac{\sqrt{2}}{3} e^{2i\omega t}\right) Y_1^{1} \chi_-$$

NO Posso anche scrivere così

$$\psi(t) = \left(\frac{2}{3} e^{-\frac{3}{2} i\omega t} + \frac{1}{3} e^{\frac{3}{2} i\omega t}\right) Y_{1,0} \chi_+ - i 2 \frac{\sqrt{2}}{3} \sin\left(\frac{3}{2}\omega t\right) Y_{1,-1} \chi_-$$

Ora devo proiettare per avere $P\left(S_z = -\frac{1}{2} \quad \theta < \frac{\pi}{3}\right)$

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\frac{\pi}{3}} d\theta \sin\theta \left|\langle \theta, \varphi | \langle S_z = -\tfrac{1}{2} | \psi(t)\rangle\right|^2 =$$

$$= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\frac{\pi}{3}} d\theta \sin\theta \left| -i 2 \frac{\sqrt{2}}{3} \sin\left(\frac{3}{2}\omega t\right)\right|^2 |Y_{1,-1}|^2 =$$

$$= \frac{8}{9} \sin^2\left(\frac{3}{2}\omega t\right) \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\frac{\pi}{3}} d\theta \sin\theta \left| \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta\, e^{-i\varphi}\right|^2 =$$

$$= \frac{8}{9} \sin^2\left(\frac{3}{2}\omega t\right) \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\frac{\pi}{3}} d\theta \sin\theta \, \frac{3}{8\pi} \sin^2\theta =$$

$$= \frac{\cancel{24}}{3\,\cancel{72}\,\pi} \sin^2\left(\frac{3}{2}\omega t\right) \int_0^{\frac{\pi}{3}} d\theta \sin^3\theta \; 2\pi =$$

$$= \frac{2}{3} \sin^2\left(\frac{3}{2}\omega t\right) \left[\frac{\cos^3\theta}{3} - \cos\theta\right]_0^{\pi/3} =$$

$$= \frac{2}{3} \sin^2\left(\frac{3}{2}\omega t\right) \left[\frac{1}{24} - \frac{1}{2} - \frac{1}{3} + 1\right] = \frac{5}{36} \sin^2\left(\frac{3}{2}\omega t\right)$$

$$P\left(S_z = -\frac{1}{2},\ \theta < \frac{\pi}{3}\right) = \frac{5}{36} \sin^2\left(\frac{3}{2}\omega t\right)$$

FARE BENE

Esercizio (FALCIONI)

L'Hamiltoniana di una particella di spin $\frac{1}{2}$ in 3 dimensioni è

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 \quad \text{(oscillatore tridimensionale isotropo)}$$

la f.d.o. all'istante iniziale è $\psi = \psi_0(\vec{r})\chi_{S_z = 1/2}$

dove $\chi_{S_z=\pm 1/2}$ è lo spinore corrispondente all'autovalore di $\hat{S}_z$, $S_z = \pm \frac{1}{2}\hbar$

e $\psi_0(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{3/4} \frac{m\omega}{\hbar}(x^2+y^2) \exp\left(-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}\right)$

determinare all'istante t generico

a) la f.d.o. del sistema

b) i possibili risultati di una misura dell'energia e le relative probabilità

c) i possibili risultati di una misura di J^2 e J_z, essendo J il momento angolare totale

$\longleftrightarrow$

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2$$

$\psi(0) = \varphi_0 \chi_+$ f.d.o stato iniziale (parte spaziale + parte di spin)

Considero la parte spaziale

$$\varphi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{m\omega}{\hbar}(x^2+y^2)\, e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}y^2} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}z^2}$$

Sia $\quad U_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$

$U_0(y) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}y^2}$

$U_0(z) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}z^2}$

$$U_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\, 2\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\, e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} x \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \quad U_1(x) = U_0(x)\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\, x$$

$$U_2(x) = \frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} 2\left(2\frac{m\omega}{\hbar}x^2-1\right)$$

$$\Rightarrow U_2(x) = U_0(x)\frac{1}{\sqrt{2}}\left(2\frac{m\omega}{\hbar}x^2-1\right) = U_0(x)\sqrt{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2-\frac{1}{\sqrt{2}}U_0(x)$$

Decompongo la f.d.o. iniziale in autoket dell'hamiltoniana

Sappiamo che le autofunzioni dell'energia dell'oscillatore tridimensionale si scrivono come $|\varphi_n\rangle = |U_n(x)\rangle|U_n(y)\rangle|U_n(z)\rangle$

Osserviamo che

$$\varphi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{m\omega}{\hbar}(x^2+y^2)U_0(x)U_0(y)U_0(z)$$

Considero $\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{m\omega}{\hbar}U_0(x)x^2$ questo stato ha 2 eccitazioni ma NON è autostato (e.f.r. $U_2(x)$) devo riscriverlo come combinazione di $U_2(x)$ e $U_0(x)$

$$\text{ora}\quad U_2(x) = \sqrt{2}\frac{m\omega}{\hbar}U_0(x)x^2-\frac{1}{\sqrt{2}}U_0(x)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{2}U_2(x) = \boxed{\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{m\omega}{\hbar}U_0(x)x^2}-\frac{1}{2\sqrt{2}}U_0(x)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{m\omega}{\hbar}x^2U_0(x) = \frac{1}{2}U_2(x)+\frac{1}{2\sqrt{2}}U_0(x)$$

analogamente $\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{m\omega}{\hbar}y^2U_0(y) = \frac{1}{2}U_2(y)+\frac{1}{2\sqrt{2}}U_0(y)$

Quindi

$$\varphi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{m\omega}{\hbar}x^2U_0(x)U_0(y)U_0(z)+\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{m\omega}{\hbar}y^2U_0(y)U_0(x)U_0(z) =$$

$$= \frac{1}{2}U_2(x)U_0(y)U_0(z)+\frac{1}{2\sqrt{2}}U_0(x)U_0(y)U_0(z)+\frac{1}{2}U_2(y)U_0(x)U_0(z)+\frac{1}{2\sqrt{2}}U_0(x)U_0(y)U_0(z)$$

$$\Rightarrow \varphi_0 = \frac{1}{2}U_2(x)U_0(y)U_0(z)+\frac{1}{2}U_0(x)U_2(y)U_0(z)+\frac{1}{\sqrt{2}}U_0(x)U_0(y)U_0(z)$$

$$\Rightarrow |\varphi_0\rangle = \frac{1}{2}|2,0,0\rangle+\frac{1}{2}|0,2,0\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}|0,0,0\rangle$$

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

$\Rightarrow$ gli stati $|2,0,0\rangle$ e $|0,2,0\rangle$ hanno energia $E_2 = \frac{7}{2}\hbar\omega$

mentre $|0,0,0\rangle$ ha energia $E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega$

$$\Rightarrow |\psi(t)\rangle = \frac{\chi_+}{\sqrt{2}}\left(\frac{|2,0,0\rangle + |0,2,0\rangle}{\sqrt{2}}\right)e^{-i\frac{7}{2}\omega t} + \frac{\chi_+}{\sqrt{2}}|0,0,0\rangle e^{-i\frac{3}{2}\omega t}$$

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{2}e^{-i\frac{7}{2}\omega t}|2,0,0\rangle|+\rangle + \frac{1}{2}e^{-i\frac{7}{2}\omega t}|0,2,0\rangle|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\frac{3}{2}\omega t}|0,0,0\rangle|+\rangle$$

Quindi i possibili risultati di una misura di energia sono

$E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega$ con probabilità $\frac{1}{2}$

$E_2 = \frac{7}{2}\hbar\omega$ con probabilità $\frac{1}{2} = \frac{1}{4} + \frac{1}{4}$

Per rispondere all'ultima domanda scrivo $|n_x\rangle|n_y\rangle|n_z\rangle$ nella base L^2, L_z usando tabelle ricavate in precedente esercizio

$$\begin{cases} |0,0,0\rangle = |n=0,\ \ell=0,\ \ell_z=0\rangle \\ |2,0,0\rangle = \frac{1}{2}|\ell=2,\ \ell_z=2\rangle + \frac{1}{2}|\ell=2,\ \ell_z=-2\rangle - \frac{1}{\sqrt{6}}|\ell=2,\ \ell_z=0\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|\ell=0,\ \ell_z=0\rangle \\ |0,2,0\rangle = -\frac{1}{2}|\ell=2,\ \ell_z=2\rangle - \frac{1}{2}|\ell=2,\ \ell_z=-2\rangle - \frac{1}{\sqrt{6}}|\ell=2,\ \ell_z=0\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|\ell=0,\ \ell_z=0\rangle \end{cases}$$

$$\psi(t) = \frac{1}{2}e^{-i\frac{7}{2}\omega t}\chi_+\left[\cancel{\frac{1}{2}|2,2\rangle} + \cancel{\frac{1}{2}|2,-2\rangle} - \frac{1}{\sqrt{6}}|2,0\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|0,0\rangle - \cancel{\frac{1}{2}|2,2\rangle} + \right.$$
$$\left. - \cancel{\frac{1}{2}|2,-2\rangle} - \frac{1}{\sqrt{6}}|2,0\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|0,0\rangle\right] + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\frac{3}{2}\omega t}|0,0\rangle$$

N.B. nella prima parentesi (perché è sottinteso $n=2$)

riscriviamo meglio

$$\psi(t) = e^{-i\frac{7}{2}\omega t}\chi_+\left[\frac{1}{\sqrt{3}}|n=2,\ \ell=0,\ \ell_z=0\rangle - \frac{1}{\sqrt{6}}|n=2,\ \ell=2,\ \ell_z=0\rangle\right] +$$
$$+ \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\frac{3}{2}\omega t}\chi_+|n=0,\ \ell=0,\ \ell_z=0\rangle$$

Sia ora $\vec{J} = (\vec{L} + \vec{S})$ il momento angolare totale

vogliamo sapere i possibili risultati di una misura di J^2 e di J_z bisogna cambiare base

$|E, L^2, S^2, L_z, S_z\rangle \longleftrightarrow |E, L^2, S^2, J^2, J_z\rangle$

N.B. se indichiamo con

$\ell =$ autovalore di L^2

$\ell_z =$ " " L_z

$j_z =$ " " J_z

$j =$ " " J^2

inoltre se $\ell = 0 \Rightarrow J^2 \equiv S^2$

$|n=0, \ell=0, s=\frac{1}{2}, \ell_z=0, s_z=\frac{1}{2}\rangle = |n=0, \ell=0, s=\frac{1}{2}, j=\frac{1}{2}, j_z=\frac{1}{2}\rangle$

$|n=2, \ell=0, s=\frac{1}{2}, \ell_z=0, s_z=\frac{1}{2}\rangle = |n=2, \ell=0, s=\frac{1}{2}, j=\frac{1}{2}, j_z=\frac{1}{2}\rangle$

mentre usando tavole coeff Clebsch-Gordan

$|n=2, \ell=2, s=\frac{1}{2}, \ell_z=0, s_z=\frac{1}{2}\rangle =$

$= \sqrt{\frac{3}{5}}\,|n=2, \ell=2, s=\frac{1}{2}, j=\frac{5}{2}, j_z=\frac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{2}{5}}\,|n=2, \ell=2, s=\frac{1}{2}, j=\frac{3}{2}, j_z=\frac{1}{2}\rangle$

Si potrebbero sostituire in $\psi(t)$ ma più si vede che

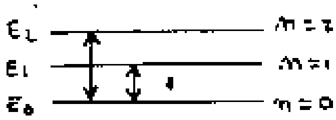
j_z può assumere solo valore $\frac{1}{2}\hbar$

mentre j assume i valori $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$

Esercizio (CASSANDRO)

La differenza tra le energie dei primi due livelli vibrazionali della molecola HCl e l'energia del livello fondamentale, espressi in numero d'onda sono $2886\ cm^{-1}$ e $5668\ cm^{-1}$. Vedere se questi dati sono compatibili con l'approssimazione di oscillatore armonico ed in caso contrario considerate la perturbazione ax^3+bx^4 determinare i valori di a, b e K per i quali si ha compatibilità con i dati forniti al primo ordine della teoria delle perturbazioni essendo $K=m\omega^2$ la costante elastica dell'oscillatore armonico.

Per l'oscillatore imperturbato $H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ $\quad E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$



Vediamo le differenze di energia dello stato fondamentale con i primi due livelli

$$E=h\nu=h\frac{c}{\lambda} \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{\lambda}=\frac{E}{hc}=\frac{E}{2\pi\hbar c}$$

$$\frac{1}{\lambda_1}=\frac{E_1-E_0}{2\pi\hbar c}=\frac{\frac{3}{2}\hbar\omega-\frac{1}{2}\hbar\omega}{2\pi\hbar c}=\frac{\hbar\omega}{\hbar 2\pi c}=\frac{\omega}{2\pi c}$$

$$\frac{1}{\lambda_2}=\frac{E_2-E_0}{2\pi\hbar c}=\frac{\frac{5}{2}\hbar\omega-\frac{1}{2}\hbar\omega}{2\pi\hbar c}=\frac{2\hbar\omega}{2\pi\hbar c}=2\left(\frac{\omega}{2\pi c}\right)=2\frac{1}{\lambda_1}$$

$$\Rightarrow \boxed{2\frac{1}{\lambda_1}=\frac{1}{\lambda_2}}\ (*)$$

Tuttavia $2\,(2886\ cm^{-1})=5772\ cm^{-1}\neq 5668\ cm^{-1}$

l'approssimazione di oscillatore armonico è quindi ammessa se si verifica la condizione (*) cosa che nel nostro caso NON è verificata

Consideriamo pertanto $H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2+ax^3+bx^4$

$$E_n^{(1)} = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \langle n| a x^3 + b x^4 |n\rangle =$$

$$= \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega + a\langle n|x^3|n\rangle + b\langle n|x^4|n\rangle$$

$\langle n|x^3|n\rangle = 0$ per considerazioni di simmetria

$$\langle n|x^4|n\rangle = \langle n|x^2 x^2|n\rangle = \langle n|x^2\, I\, x^2|n\rangle =$$

$$= \langle n|x^2 \underbrace{\left(\sum_k |k\rangle\langle k|\right)}_{\text{RELAZIONE DI CHIUSURA}} x^2|n\rangle = \sum_k \langle n|x^2|k\rangle\langle k|x^2|n\rangle =$$

$$= \sum_k |\langle n|x^2|k\rangle|^2 = \sum_k \left|\langle n|\frac{\hbar}{2m\omega}(aa + aa^\dagger + a^\dagger a + a^\dagger a^\dagger)|k\rangle\right|^2 =$$

$$= \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2}\sum_k |\langle n|aa + aa^\dagger + a^\dagger a + a^\dagger a^\dagger|k\rangle|^2 =$$ sommatoria da cui restano solo alcuni termini

$$= \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2}\left(|\langle n|aa|n+2\rangle|^2 + |\langle n|(a^\dagger a + a^\dagger a)|n\rangle|^2 + |\langle n|a^\dagger a^\dagger|n-2\rangle|^2\right)$$

N.B.
$$aa|n+2\rangle = \sqrt{n+2}\sqrt{n+1}\,|n\rangle$$
$$a^\dagger a|n\rangle = \sqrt{n}\sqrt{n}\,|n\rangle$$
$$aa^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,\sqrt{n+1}\,|n\rangle$$
$$a^\dagger a^\dagger|n-2\rangle = \sqrt{n-1}\,\sqrt{n}\,|n\rangle$$

$$\Rightarrow \langle n|x^4|n\rangle = \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2}\left[(n+2)(n+1) + (n+n+1)^2 + n(n-1)\right] =$$

$$= \frac{\hbar^2}{4m\omega^2}\left(6n^2 + 6n + 3\right)$$

quindi

$$E_n^{(1)} = E_n^{(0)} + \langle n|V'|n\rangle = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega + b\left(6n^2+6n+3\right)\frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2}$$

N.B. anziché usare la relazione di chiusura si poteva anche sviluppare
$x^4 = (a+a^\dagger)^4$

$$E_1^{(1)} - E_0^{(1)} = E_1^{(0)} + \frac{15}{4} b \frac{\hbar^2}{m^2\omega^2} - E_0^{(0)} - \frac{3}{4} b \frac{\hbar^2}{m^2\omega^2} =$$

$$= \frac{3}{2}\hbar\omega - \frac{1}{2}\hbar\omega + 3b\frac{\hbar^2}{m^2\omega^2} = \hbar\omega + 3b\frac{\hbar^2}{m^2\omega^2}$$

$$E_2^{(1)} - E_0^{(1)} = 2\hbar\omega + 9b\frac{\hbar^2}{m^2\omega^2}$$

Tenendo conto che $k = m\omega^2$

$$\Delta_1 = E_1^{(1)} - E_0^{(1)} = \hbar\sqrt{\frac{k}{m}} + 3b\left(\frac{\hbar^2}{mk}\right)$$

$$\Delta_2 = E_2^{(1)} - E_0^{(1)} = 2\hbar\sqrt{\frac{k}{m}} + 9b\left(\frac{\hbar^2}{mk}\right)$$

N.B. $\Delta_1 = 2886\ \text{cm}^{-1}$

$\Delta_2 = 5668\ \text{cm}^{-1}$

Sia per semplicità $\frac{\hbar}{\sqrt{m}} = A \Rightarrow \frac{\hbar^2}{m} = A^2$

$$\Rightarrow \begin{cases} \Delta_1 = A\sqrt{k} + 3b\frac{A^2}{k} \\ \Delta_2 = 2A\sqrt{k} + 9b\frac{A^2}{k} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \Delta_2 - 3\Delta_1 = -A\sqrt{k} \\ \Delta_2 - 2\Delta_1 = 3b\frac{A^2}{k} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \sqrt{k} = \left(\frac{3\Delta_1 - \Delta_2}{A}\right) \\ b = \frac{mk}{3\hbar^2}(\Delta_2 - 2\Delta_1) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} k = \frac{m}{\hbar^2}(3\Delta_1 - \Delta_2)^2 > 0 \\ b = \frac{m^2}{3\hbar^4}(3\Delta_1 - \Delta_2)(\Delta_2 - 2\Delta_1) < 0 \end{cases}$$

Ha senso trattare un risultato $b<0$?

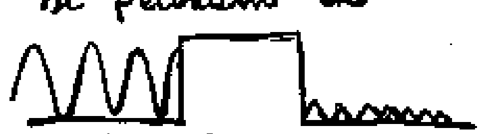
Stiamo trattando un problema che ha stati legati ed otteniamo

una hamiltoniana che non ha stati legati $b<0 \Rightarrow$

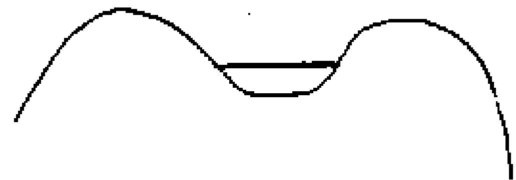
Un sistema sottoposto ad un potenziale di questo tipo

non ha stati legati. Tuttavia se pensiamo al

problema dell'effetto Tunnel



Se barriera è opportuna (opportuni coefficienti di R e T)
ho probabilità grande di trovare la particella dentro, lo stato
non è legato ma si comporta
come tale, in tali situazioni
si dice che stato è "QUASI LEGATO"



Il discorso comincia a vacillare se volessi studiare la differenza
di energia tra livelli molto alti dello stato fondamentale

se sono più la possibilità di uscire è
molto alta e l'approssimazione
sarà peggiore

Esercizio (FALCIONI)

L'hamiltoniana di una particella di spin $\frac{1}{2}$ in 3 dimensioni è

$$H_0 = \frac{E}{\hbar^2}\left(\frac{4}{3}L^2 + 2\vec{L}\cdot\vec{S} + \hbar(L_z+S_z)\right).$$

1) Determinare autostati ed autovalori di H_0

2) Si consideri ora $H_0 + V$ dove $V = \lambda E \frac{Z}{|\vec{r}|}$ con $\lambda \ll 1$

Calcolare lo spostamento dell'energia dello stato fondamentale e del 1° stato eccitato e determinare la f.d.o. dello stato fondamentale al 1° ordine della teoria delle perturbazioni

---

1) Osserviamo anzitutto che $\{L^2, S^2, L_z, S_z\}$ NON è una buona base per diagonalizzare l'hamiltoniana. La buona base è $\{L^2, S^2, J^2, J_z\}$ con $\vec{J} = \vec{L}+\vec{S} \Rightarrow 2\vec{L}\cdot\vec{S} = \vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2$

Quindi $H_0 = \frac{E}{\hbar^2}\left(\frac{4}{3}L^2 + J^2 - L^2 - S^2 + \hbar J_z\right) = \frac{E}{\hbar^2}\left(\frac{1}{3}L^2 + J^2 - S^2 + \hbar J_z\right)$

Cerco ora i coefficienti di passaggio (Clebsch-Gordan) componendo stati di momento angolare definito $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots$ e momento di spin $\frac{1}{2}$

N.B. $\ell(\ell+1)\hbar^2$ autovalore di L^2 $\qquad \hbar^2 j(j+1)$ autovalore di J^2

$s(s+1)\hbar$ autovalore di S^2

ℓ_z, s_z, j_z autovalori di L_z, S_z, J_z (moltiplicati per $\hbar$)

È noto che j può assumere tutti valori da $\ell+s$ a $|\ell-s|$

nel nostro caso $j = \begin{cases} \ell+\frac{1}{2} & \text{per } \ell = 0, 1, 2, \dots \\ \ell-\frac{1}{2} & \text{per } \ell = 1, 2, 3, \dots \end{cases}$ Se $\ell=0 \Rightarrow j=\frac{1}{2}$

Per effettuare il calcolo uso relazioni che si trovano sul COHEN 2° volume pag. 1030 e seguenti

$$\boxed{j = \ell + \tfrac{1}{2} \qquad \ell = 0,1,2,3,\dots}$$

$$\Rightarrow \left|\ell, s=\tfrac{1}{2}, j=\ell+\tfrac{1}{2}, j_z\right\rangle = \sqrt{\frac{\ell + j_z + \frac{1}{2}}{2\ell+1}}\left|\ell, \tfrac{1}{2}, \ell_z = j_z - \tfrac{1}{2}, S_z = \tfrac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{\ell - j_z + \frac{1}{2}}{2\ell+1}}\left|\ell, \tfrac{1}{2}, \ell_z = j_z + \tfrac{1}{2}, S_z = -\tfrac{1}{2}\right\rangle$$

$$\boxed{j = \ell - \tfrac{1}{2} \qquad \ell = 1,2,3,\dots}$$

$$\Rightarrow \left|\ell, s=\tfrac{1}{2}, j=\ell-\tfrac{1}{2}, j_z\right\rangle = \sqrt{\frac{\ell + j_z + \frac{1}{2}}{2\ell+1}}\left|\ell, \tfrac{1}{2}, \ell_z = j_z + \tfrac{1}{2}, S_z = -\tfrac{1}{2}\right\rangle + - \sqrt{\frac{\ell - j_z + 1/2}{2\ell+1}}\left|\ell, \tfrac{1}{2}, \ell_z = j_z - \tfrac{1}{2}, S_z = +\tfrac{1}{2}\right\rangle$$

Questi sono gli autostati di H_0, $\Rightarrow$ posso calcolare energie

$$E\left(\ell, s=\tfrac{1}{2}, j=\ell+\tfrac{1}{2}, j_z\right) = \frac{\varepsilon}{\hbar^2}\left(\frac{1}{3}\ell(\ell+1)\hbar^2 + \left(\ell+\tfrac{1}{2}\right)\left(\ell+\tfrac{3}{2}\right)\hbar^2 - \tfrac{1}{2}\left(\tfrac{1}{2}+1\right)\hbar^2 + j_z\hbar^2\right) =$$

$$= \varepsilon\left[\frac{1}{3}\ell^2 + \frac{1}{3}\ell + \ell^2 + \frac{3}{2}\ell + \frac{1}{2}\ell + \frac{3}{4} - \frac{3}{4} + j_z\right]$$

$$\Rightarrow \boxed{E\left(\ell, s=\tfrac{1}{2}, j=\ell+\tfrac{1}{2}, j_z\right) = \varepsilon\left[\frac{4}{3}\ell^2 + \frac{7}{3}\ell + j_z\right]} \qquad \ell = 0,1,2,3,\dots \qquad (1)$$

$$E\left(\ell, s=\tfrac{1}{2}, j=\ell-\tfrac{1}{2}, j_z\right) = \frac{\varepsilon}{\hbar^2}\left[\frac{1}{3}\ell(\ell+1)\hbar^2 + \left(\ell-\tfrac{1}{2}\right)\left(\ell+\tfrac{1}{2}\right)\hbar^2 - \frac{3}{4}\hbar^2 + j_z\hbar^2\right] =$$

$$= \varepsilon\left[\frac{1}{3}\ell^2 + \frac{1}{3}\ell + \ell^2 \cancel{+\frac{1}{2}\ell} \cancel{-\frac{1}{2}\ell} - \frac{1}{4} - \frac{3}{4} + j_z\right]$$

$$\Rightarrow \boxed{E\left(\ell, s=\tfrac{1}{2}, j=\ell-\tfrac{1}{2}, j_z\right) = \varepsilon\left[\frac{4}{3}\ell^2 + \frac{1}{3}\ell - 1 + j_z\right] \qquad \ell = 1,2,3,\dots} \quad (2)$$

(1) e (2) danno le espressioni degli autovalori di H_0

Cerco ora quali sono gli stati con energia più bassa

$$E\left(\ell=0,\ s=\tfrac{1}{2},\ j=\tfrac{1}{2},\ j_z=\tfrac{1}{2}\right)=\frac{\varepsilon}{2}$$

N.B. se $j=\frac{1}{2} \Rightarrow j_z=\begin{cases}+1/2\\ -1/2\end{cases}$

$$E\left(\ell=0,\ s=\tfrac{1}{2},\ j=\tfrac{1}{2},\ j_z=-\tfrac{1}{2}\right)=-\frac{\varepsilon}{2}$$

$$E\left(\ell=1,\ s=\tfrac{1}{2},\ \underbrace{j=\tfrac{1}{2}}_{1-\frac{1}{2}},\ j_z=\tfrac{1}{2}\right)=\varepsilon\left(\frac{4}{3}+\frac{1}{3}-1+\frac{1}{2}\right)=\frac{7}{6}\varepsilon$$

$$E\left(\ell=1,\ s=\tfrac{1}{2},\ j=\tfrac{1}{2},\ j_z=-\tfrac{1}{2}\right)=\varepsilon\left(\frac{4}{3}+\frac{1}{3}-1-\frac{1}{2}\right)=\frac{\varepsilon}{6}$$

N.B. $E\left(\ell=1,\ s=\tfrac{1}{2},\ j=\tfrac{3}{2},\ j_z=-\tfrac{1}{2}\right)=\frac{19}{6}\varepsilon$

I primi 4 livelli energetici sono quindi

ε

$\frac{7}{6}\varepsilon$ — $|1,\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle$

$\varepsilon/2$ — $|0,\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle \equiv |E_2\rangle$ 2° livello eccitato

$\varepsilon/6$ — $|1,\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle \equiv |E_1\rangle$ 1° livello eccitato

0

$-\frac{\varepsilon}{2}$ — $|0,\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle \equiv |E_0\rangle$ livello fondamentale

Usando ora le formule ricavate in precedenza x autostati di H_0

$$|E_0\rangle \equiv \left|\ell=0,\ s=\tfrac{1}{2},\ j=\tfrac{1}{2},\ j_z=-\tfrac{1}{2}\right\rangle=\left|\ell=0,\ s=\tfrac{1}{2},\ \ell_z=0,\ s_z=-\tfrac{1}{2}\right\rangle$$

$$|E_1\rangle \equiv \left|\ell=1,\ s=\tfrac{1}{2},\ j=\tfrac{1}{2},\ j_z=-\tfrac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}\left|\ell=1,\ s=\tfrac{1}{2},\ \ell_z=0,\ s_z=-\tfrac{1}{2}\right\rangle+$$
$$-\sqrt{\frac{2}{3}}\left|\ell=1,\ s=\tfrac{1}{2},\ \ell_z=-1,\ s_z=\tfrac{1}{2}\right\rangle$$

Il livello fondamentale ed il 1° livello eccitato sono NON DEGENERI

Consideriamo ora la perturbazione V

$$\Rightarrow V=\lambda\varepsilon\underbrace{\frac{z}{|\vec{r}|}}_{\text{C. SFERICHE}}=\lambda\varepsilon\frac{r\cos\theta}{|\vec{r}|}=\lambda\varepsilon\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\,Y_1^0 \qquad \Rightarrow V\propto Y_1^0$$

Prima di proseguire richiamiamo alcune regole di selezione
c.f.r. COHEN 1° volume pag. 195-196

Sia B_+ un operatore PARI $\Rightarrow$ gli elementi di matrice $\langle\varphi|B_+|\psi\rangle$ di un operatore pari sono NULLI tra vettori di OPPOSTA PARITÀ

Sia B_- un operatore DISPARI $\Rightarrow$ gli elementi di matrice $\langle\varphi|B_-|\psi\rangle$ di un operatore dispari sono NULLI tra vettori di STESSA PARITÀ

Calcolo correzione all'energia del livello fondamentale al 1° ordine perturbativo

$$\Delta E_0 = \langle E_0|V|E_0\rangle = \langle l=0, l_z=0|\langle S=\tfrac{1}{2}, S_z=-\tfrac{1}{2}|\,\lambda\mathcal{E}\sqrt{\tfrac{4\pi}{3}}Y_1^0\,|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle|l=0, l_z=0\rangle$$

$$= \lambda\mathcal{E}\sqrt{\tfrac{4\pi}{3}}\langle 0,0|Y_1^0|0,0\rangle\langle\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle = \lambda\mathcal{E}\sqrt{\tfrac{4\pi}{3}}\langle 0,0|\underbrace{Y_1^0}_{\text{DISPARI } l=1}|0,0\rangle = 0$$

REGOLE SELEZ.

Calcolo correzione all'energia del 1° livello fondamentale al 1° ordine perturbativo

$$\Delta E_1 = \langle E_1|V|E_1\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{3}}\langle \underset{l}{1},\underset{l_z}{0}|\langle\underset{S}{\tfrac{1}{2}},\underset{S_z}{-\tfrac{1}{2}}| - \sqrt{\tfrac{2}{3}}\langle 1,-1|\langle\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}|\right) Y_1^0\left(\frac{1}{\sqrt{3}}|1,0\rangle|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle +\right.$$

$$\left.-\sqrt{\tfrac{2}{3}}|1,-1\rangle|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle\right) = \frac{1}{3}\langle 1,0|\langle\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}|Y_1^0|1,0\rangle|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle - \frac{\sqrt{2}}{3}\langle 1,0|\langle\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}|Y_1^0$$

$$|1,-1\rangle|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle - \frac{\sqrt{2}}{3}\langle 1,-1|\langle\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}|Y_1^0|1,0\rangle|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle + \frac{2}{3}\langle 1,-1|\langle\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}|Y_1^0|1,-1\rangle|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle =$$

$$= \frac{1}{3}\langle 1,0|Y_1^0|1,0\rangle\overbrace{\langle\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle}^{1} - \frac{\sqrt{2}}{3}\langle 1,0|Y_1^0|1,-1\rangle\underbrace{\langle\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle}_{zero} +$$

$$- \frac{\sqrt{2}}{3}\langle 1,-1|Y_1^0|1,0\rangle\underbrace{\langle\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle}_{zero} + \frac{2}{3}\langle 1,-1|Y_1^0|1,-1\rangle\underbrace{\langle\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle}_{1} =$$

$$= \frac{1}{3}\langle 1,0|Y_1^0|1,0\rangle + \frac{2}{3}\langle 1,-1|Y_1^0|1,-1\rangle = 0$$

per le regole di selezione viste sopra

Quindi il 1° livello eccitato e quello fondamentale NON hanno correzione al 1° ordine

Calcolo la correzione al 1° ordine del ket dello stato fondamentale

$$|E_f\rangle = |E_0\rangle + \sum_{i\neq 0} \frac{\langle E_i|V|E_0\rangle}{E_0 - E_i}|E_i\rangle$$

E_f energia dello stato fondamentale corretta

Avrei in generale una infinità di contributi ma quello che conta è come è fatto l'operatore della perturbazione

Sia $|E_0'\rangle = V|E_0\rangle = \alpha Y_1^0 |l=0, l_z=0\rangle |s=\frac{1}{2}, s_z=-\frac{1}{2}\rangle$

Considero $|l=0, s=\frac{1}{2}, l_z=0, s_z=-\frac{1}{2}\rangle = |j_2=\frac{1}{2}, j_{2z}=-\frac{1}{2}\rangle$

Considero Y_1^0 come $|j_1=l=1, j_{1z}=l_z=0\rangle$

$\Rightarrow |j_1=1, j_{1z}=0\rangle |j_2=\frac{1}{2}, j_{2z}=-\frac{1}{2}\rangle = \left(\begin{matrix} j=\frac{3}{2} \\ j=\frac{1}{2}\end{matrix} \quad j_z = j_{1z}+j_{2z} = -\frac{1}{2}\right)$

quindi il m. singolare j ha in questo caso 2 soluzioni possibili $\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$

e pertanto $|E_0'\rangle$ sarà combinazione di questi due ket

$\Rightarrow |E_0'\rangle = a|j=\frac{3}{2}, j_z=-\frac{1}{2}\rangle + b|j=\frac{1}{2}, j_z=-\frac{1}{2}\rangle$

Pertanto della serie solo due contributi risultano $\neq 0$ e sono

tenendo conto che $|E_0'\rangle = a|l=1, s=\frac{1}{2}, j=\frac{3}{2}, j_z=-\frac{1}{2}\rangle + b|l=1, s=\frac{1}{2}, j=\frac{1}{2}, j_z=-\frac{1}{2}\rangle$

$$|l=1, s=\tfrac{1}{2}, j=\tfrac{3}{2}, j_z=-\tfrac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|1, \tfrac{1}{2}, l_z=-1, s_z=\tfrac{1}{2}\rangle + \sqrt{\tfrac{2}{3}}|1, \tfrac{1}{2}, l_z=0, s_z=-\tfrac{1}{2}\rangle \equiv |\tilde{E}\rangle$$

con $\tilde{E} = \frac{19}{6}\varepsilon$

l'altro stato che su bene è il 1° livello eccitato

$|l=1, s=\frac{1}{2}, j=\frac{1}{2}, j_z=-\frac{1}{2}\rangle$ con energia $\frac{\varepsilon}{6}$

Tutti gli altri anche con $j=\frac{1}{2}$, $j=\frac{3}{2}$ danno contributo nullo a causa dell'ortogonalità

Calcolo ora le quantità $\langle E_1|V|E_0\rangle$ e $\langle\tilde{E}|V|E_0\rangle$

$|1, 1/2, 1, -1/2\rangle =$

In definitiva per il 1° livello eccitato abbiamo

$$|E_1, l=1, l_z=1, \pm\rangle = \sqrt{\frac{8\pi}{3}}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x\, u_0(x)\, Y_{1,1}\, \chi_\pm$$

$$|E_1, l=1, l_z=0, \pm\rangle = \sqrt{\frac{8\pi}{3}}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x\, u_0(x)\, Y_{1,0}\, \chi_\pm$$

$$|E_1, l=1, l_z=-1, \pm\rangle = \sqrt{\frac{8\pi}{3}}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x\, u_0(x)\, Y_{1,-1}\, \chi_\pm$$

Si hanno così $3\cdot(2)=6$ stati degeneri per il 1° livello eccitato imperturbato

Introduciamo ora la perturbazione λV

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \lambda\sqrt{\frac{m\omega^3}{\hbar^3}}\, x\, \vec{L}\cdot\vec{S} =$$

$$= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \lambda\sqrt{\frac{m\omega^3}{\hbar^3}}\, x\frac{1}{2}\left(\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2\right)$$

So che λV è invariante sotto rotazioni, $\Rightarrow$ base che diagonalizza $\vec{L}$ Devo passare è la base su cui è definito il m. angolare totale
nella base in cui è diagonale il m. angolare totale

N.B. lo stato fondamentale ha mom. angolare totale definito e pari a $1/2$

$|E_0, l=0, l_z=0, s=\frac{1}{2}, \pm\rangle = |E_0, l=0, s=\frac{1}{2}, j=\frac{1}{2}, j_z=\pm\frac{1}{2}\rangle$

ovvero ora che gli stati a energia più bassa differiscono solo per J_z, ma H (o meglio λV) non dipende da J_z

la degenerazione quindi al 1° ordine non è rimossa ed inoltre la correzione risulta essere nulla $\Delta E_0 = 0$

Calcoliamo infatti l'elemento di matrice (solo parte angolare)

$$\langle \ell=0, s=\tfrac{1}{2}, j=\tfrac{1}{2}, j_z=\pm\tfrac{1}{2} | \vec{J}^2-L^2-S^2 | \ell=0, s=\tfrac{1}{2}, j=\tfrac{1}{2}, j_z=\pm\tfrac{1}{2}\rangle =$$
$$= \frac{3}{4}\hbar^2 - 0 - \frac{3}{4}\hbar^2 = 0$$

Vediamo per il 1° livello eccitato, per tutti gli stati si ha

$$|\ell=1\rangle|s=\tfrac{1}{2}\rangle = \begin{cases} j=1/2 & j_z=\pm\frac{1}{2} & 2 \text{ stati} \\ j=3/2 & j_z=\pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2} & 4 \text{ stati}\end{cases}$$

effettuando cambiamento di base nella base in cui è diagonale J^2 e J_z osserviamo che l'hamiltoniana perturbata dipende solo da J^2 ed a noi interessano le sole correzioni all'energia (è inutile passare per la diagonalizzazione della matrice 6×6)
Sostituendo nell'hamiltoniana si vede che il livello 6 volte degenere si divide in 2 livelli, uno due volte degenere (corrispondente al sottospazio con $j=1/2$) ed uno quattro volte degenere (corrispondente al sottospazio con $j=\frac{3}{2}$) Devo calcolare le correzioni sui due insiemi

$$\langle E_1, \ell=1, \chi_\pm | \frac{\lambda}{2}\sqrt{\frac{m\omega^3}{\hbar^3}}\, r\,(\vec{J}^2-\vec{L}^2-\vec{S}^2) | E_1, \ell=1, \chi_+\rangle =$$
$$= \frac{\lambda}{2}\sqrt{\frac{m\omega^3}{\hbar^3}}\int_0^\infty r^2 dr\, |R_1(r)|^2 r \,\langle \ell=1, s=\tfrac{1}{2}, j, j_z | \vec{J}^2-\vec{L}^2-\vec{S}^2 | \ell=1, s=\tfrac{1}{2}, j, j_z\rangle$$

insieme $j=\frac{3}{2}$

$$\Delta E\left(\tfrac{3}{2}\right) = \frac{\lambda}{2}\sqrt{\frac{m\omega^3}{\hbar^3}}\int_0^\infty r^2 dr\, \frac{8\pi}{3}\frac{m\omega}{\hbar} r^2 \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{3/2} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}r^2} r \langle \ell=1, s=\tfrac{1}{2}, j=\tfrac{3}{2} | \vec{J}^2-\vec{L}^2 +$$
$$-\vec{S}^2 | \ell=1, s=\tfrac{1}{2}, j=\tfrac{3}{2}\rangle =$$
$$= \lambda\frac{4}{6}\left(\frac{m^2\omega^3}{\hbar^3}\right)\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty 2\frac{m\omega}{\hbar} r^5 e^{-\frac{m\omega}{\hbar}r^2} dr \,\langle \ell=1, s=\tfrac{1}{2}, j=\tfrac{3}{2} | J^2-L^2-S^2 | \cdots\rangle$$

$=$ (poniamo nell'integrale $\frac{m\omega}{\hbar}r^2 = t$ $\quad 2r\frac{m\omega}{\hbar}dr = dt$

$$= \lambda\frac{4}{6}\left(\frac{m^2\omega^3}{\hbar^3}\right)\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int dt\, e^{-t}\frac{\hbar^2}{m^2\omega^2}t^2 \langle \ell=1, s=\tfrac{1}{2}, j=\tfrac{3}{2} | J^2-L^2-S^2 | \cdots\rangle =$$

Ricordando che $\int_0^\infty x^n e^{-x} dx = n!$

$$= \frac{8}{6}\lambda \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\omega}{\hbar} \langle l=1, s=\tfrac{1}{2}, j=\tfrac{3}{2}, j_z | J^2 - L^2 - S^2 | l=1, s=\tfrac{1}{2}, j=\tfrac{3}{2}, j_z \rangle =$$

$$= \frac{8}{6}\lambda \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\omega}{\hbar} \left[\frac{15}{4} - 2 - \frac{3}{4}\right]\hbar^2 = \frac{4}{3} \frac{\lambda}{\sqrt{\pi}} \hbar\omega$$

mentre $j = \frac{1}{2}$

$$\Delta E\left(\tfrac{1}{2}\right) = \frac{8\lambda}{6} \frac{1}{\sqrt{\pi}} [-2]\, \hbar\omega = -\frac{8}{3} \frac{\lambda}{\sqrt{\pi}} \hbar\omega$$

Esercizio (CASSANDRO)

Due particelle identiche di spin $\frac{1}{2}$ e massa m sono su un segmento di lunghezza l ed interagiscono attraverso una energia potenziale $\epsilon\,\delta(x_1-x_2)$

Le due particelle si trovano entrambe con lo spin orientato secondo l'asse z.

Quale è l'energia minima se si trascura l'interazione?

Come si modifica questa energia al 1° ordine in ϵ?

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\,\mathrm{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \qquad E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \qquad n=1,2,3\ldots$$

In assenza di interazione (perturbazione) $H=H_1+H_2$

$|S_z=\frac{\hbar}{2}\rangle_1\,|S_z=\frac{\hbar}{2}\rangle_2=|++\rangle$ parte di spin è già simmetrica

$\psi_{n_1n_2}=\psi_{n_1}(x_1)\,\psi_{n_2}(x_2)$ mi servono f.d.o. ANTISIMMETRICHE

↳ NON HA SIMMETRIA DEFINITA x SCAMBIO DI PARTICELLE

perché ho fermioni. La parte di spin è simmetrica, devo quindi costruire f.d.o. con parte spaziale antisimmetrica

Scambiare particelle ⇒ scambiare x_1 con x_2

$$\frac{\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2)-\psi_{n_1}(x_2)\psi_{n_2}(x_1)}{\sqrt{2}}|++\rangle=$$

$$=\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{2}{L}}\right)^2\left(\mathrm{sen}\frac{n_1\pi x_1}{L}\cdot\mathrm{sen}\left(\frac{n_2\pi x_2}{L}\right)\right)-\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{2}{L}\right)\mathrm{sen}\left(\frac{n_1\pi x_2}{L}\right)\mathrm{sen}\left(\frac{n_2\pi x_1}{L}\right)\right]|++\rangle$$

$$E_{n_1n_2}=E_{n_1}+E_{n_2}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(n_1^2+n_2^2)$$

osserviamo che deve necessariamente essere $n_1\neq n_2$ (perché sono fermioni)

(N.B. l'energia minima se non aver fatto ipotesi fermioni sarebbe stata $\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}2$)

L'energia dello stato fondamentale è in questo caso

$$E_{min}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}5$$

Lo stato fondamentale imperturbato è descritto dalla f.d.o.

$$|\psi_0\rangle = \frac{\psi_1(x_1)\psi_2(x_2) - \psi_1(x_2)\psi_2(x_1)}{\sqrt{2}}|++\rangle$$

Consideriamo ora la perturbazione $c\delta(x_1-x_2)$ e calcoliamo la correzione all'energia al 1° ordine in λ

$$\Delta^{(1)}E = c\int dx_1 dx_2\, \delta(x_1-x_2)\left|\frac{\psi_1(x_1)\psi_2(x_2) - \psi_1(x_2)\psi_2(x_1)}{\sqrt{2}}\right|^2 \langle ++|++\rangle = 0$$

quindi la correzione al 1° ordine è zero

ovvio: sto considerando stati di spin del tipo $|++\rangle$, in questo caso il principio di PAULI si realizza dicendo che le due particelle non si possono trovare nello stesso punto dello spazio fisico, ma l'interazione che considero ha effetto solo se le due particelle interagiscono ("si vedono") quando si trovano nello stesso punto

~~Esercizio~~ (FALCIONI)

Un sistema quantistico è costituito da due particelle identiche di spin $\frac{1}{2}$. L'operatore hamiltoniano del sistema è

$$H_0 = \frac{1}{2I}\left(\vec{J}_1^{\,2} + \vec{J}_2^{\,2}\right) \qquad \text{ove} \quad \vec{J}_i = \vec{L}_i + \vec{S}_i$$

le due particelle si trovano in un autostato del momento angolare ~~totale~~ orbitale con $\ell_2 = \ell_1 = 1$

1) Determinare i possibili autovalori dell'energia e il loro grado di degenerazione e la forma degli autostati di H_0.

2) Dire quali sono i possibili risultati di una misura di $\vec{J}^{\,2} = (\vec{J}_1 + \vec{J}_2)^2$ negli stati determinati al punto precedente

3) Se all'hamiltoniana si aggiunge la perturbazione $\delta V = \frac{\lambda}{I}\vec{\ell}_1 \cdot \vec{\ell}_2$ calcolare lo spostamento dell'autovalore più basso tra quelli calcolati precedentemente al 1° ordine perturbativo

---

H_0 è somma di due hamiltoniane indipendenti

quindi $\psi(x) = \psi_1(x)\psi_2(x) \qquad E = E_1 + E_2$

ciascuna particella è descritta da una f.d.o. $|\ell = 1\rangle|\chi\rangle$

per ciascuna particella si hanno 6 stati

bisogna passare nella base in cui H_0 è diagonale

6 stati di singola particella $|\ell=1\rangle|\chi\rangle \Rightarrow \quad 1 \otimes \frac{1}{2} = \begin{cases} 2 \text{ stati } j = 1/2 \\ 4 \text{ stati } j = 3/2 \end{cases} \qquad g = (2j+1)$

$|j = \frac{3}{2}, j_z\rangle \quad , \quad |j = \frac{1}{2}, j_z\rangle$

Quando metto insieme le particelle ho un totale di $6 \times 6 = 36$ stati

devo comporre gli stati sapendo che ho 2 FERMIONI e che quindi la f.d.o. deve essere totalmente ANTISIMMETRICA.

$1°$ caso $\qquad |j_1 = \frac{1}{2}, j_{1z}\rangle |j_2 = \frac{1}{2}, j_{2z}\rangle$

componendo due momenti angolari pari a $1/2$ $1/2$ si ottiene

$(2\cdot 1+1)$ { 3 STATI con $j_{TOT} = 1$ (TRIPLETTO) so essere simmetrico

$(2\cdot 0+1)$ { 1 STATO con $j_{TOT} = 0$ (SINGOLETTO) so essere antisimmetrico

quindi va bene solo stato singoletto. ($S = \frac{1}{2}$ semintero)

$$|j_{TOT} = 0\rangle \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|j_1 = \frac{1}{2}, j_{1z} = \frac{1}{2}\rangle_1 |j_2 = \frac{1}{2}, j_{2z} = -\frac{1}{2}\rangle_2 - |\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle_1 |\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\rangle_2\right)$$

Dei ~~36~~ 4 stati di partenza va bene solo $\boxed{\text{uno con } j_{TOT} = 0}$

l'energia di questo stato è $\quad E = \frac{1}{2I}\left(\frac{3}{4} + \frac{3}{4}\right)\hbar^2 = \frac{3}{4}\frac{\hbar^2}{I}$

$$E = \left[j_1(j_1+1)\hbar^2 + j_2(j_2+1)\hbar^2\right]\frac{1}{2I}$$

$2°$ caso $\quad |j_1 = \frac{3}{2}, j_{1z}\rangle |j_2 = \frac{3}{2}, j_{2z}\rangle \quad |j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \qquad 0 \leq j \leq 3 \Rightarrow j$ 3, 2, 1, 0

si ha ora

$$\begin{cases} 7 \text{ STATI con } j_{TOT} = 3 \Rightarrow (3\cdot 2+1) \\ 5 \text{ STATI con } j_{TOT} = 2 \Rightarrow (2\cdot 2+1) \\ 3 \text{ STATI con } j_{TOT} = 1 \Rightarrow (1\cdot 2+1) \\ 1 \text{ STATO con } j_{TOT} = 0 \Rightarrow (1\cdot 0+1) \end{cases}$$

ci sono sicuramente stati che non vanno bene. Costruisco la matrice degli stati $|j_1 = \frac{3}{2}, j_{1z}\rangle |j_2 = \frac{3}{2}\rangle |j_{2z}\rangle$ per brevità $|j_{1z}\rangle_1 |j_{2z}\rangle_2$

$$\begin{pmatrix} |\frac{3}{2}\rangle_1|\frac{3}{2}\rangle_2 & |\frac{3}{2}\rangle_1|\frac{1}{2}\rangle_2 & |\frac{3}{2}\rangle_1|-\frac{1}{2}\rangle_2 & |\frac{3}{2}\rangle_1|-\frac{3}{2}\rangle_2 \\ |\frac{1}{2}\rangle_1|\frac{3}{2}\rangle_2 & |\frac{1}{2}\rangle_1|\frac{1}{2}\rangle_2 & |\frac{1}{2}\rangle_1|-\frac{1}{2}\rangle_2 & |\frac{1}{2}\rangle_1|-\frac{3}{2}\rangle_2 \\ |-\frac{1}{2}\rangle_1|\frac{3}{2}\rangle_2 & |-\frac{1}{2}\rangle_1|\frac{1}{2}\rangle_2 & |-\frac{1}{2}\rangle_1|-\frac{1}{2}\rangle_2 & |-\frac{1}{2}\rangle_1|-\frac{3}{2}\rangle_2 \\ |-\frac{3}{2}\rangle_1|\frac{3}{2}\rangle_2 & |-\frac{3}{2}\rangle_1|\frac{1}{2}\rangle_2 & |-\frac{3}{2}\rangle_1|-\frac{1}{2}\rangle_2 & |-\frac{3}{2}\rangle_1|-\frac{3}{2}\rangle_2 \end{pmatrix}$$

Matrice 4×4

osserviamo anzitutto che i 4 stati che sono sulla diagonale hanno tutti simmetria definita per scambio di particelle, sono infatti SIMMETRICI e non vanno bene, rimangono i $(16-4)=12$ stati che sono fuori dalla diagonale che NON hanno simmetria definita, accoppiando stati fuori diagonale posso ottenere
6 combinazioni di stati simmetrici (non vanno bene)
6 combinazioni di stati antisimmetrici (vanno bene)

ora 6 stati posso averli solo combinando

$$\boxed{J_{TOT} = 2 \quad \text{che mi da } 5 \text{ stati}}$$
$$\boxed{J_{TOT} = 0 \quad \text{che mi da uno stato}}$$

Se non ci credo posso andare a controllare su tabelle gli sviluppi e verificare che
$J_{TOT}=3 \Rightarrow 7$ stati simmetrici ← sic
$J_{TOT}=2 \Rightarrow 5$ stati antisimmetrici ok
$J_{TOT}=1 \Rightarrow 3$ stati simmetrici
$J_{TOT}=0 \Rightarrow 1$ stato antisimmetrico ok

$\Big\} 6$

in totale 6 stati con $E=\frac{1}{2I}\left[\frac{3}{2}\left(\frac{3}{2}+1\right)+\frac{3}{2}\left(\frac{3}{2}+1\right)\right]\hbar^2=\frac{15}{4}\frac{\hbar^2}{I}$

3° caso $|j_1=\frac{1}{2},j_{12}\rangle|j_2=\frac{3}{2},j_{22}\rangle$ e $|j_1=\frac{3}{2},j_{12}\rangle|j_2=\frac{1}{2},j_{22}\rangle$

si ha $\begin{cases} 5 \text{ STATI con } J_{TOT}=2 & (2\cdot 2)+1 \\ 3 \text{ STATI con } J_{TOT}=1 & (1\cdot 2)+1 \end{cases}$

Considerando $|j_1=\frac{1}{2},j_{12}\rangle_1|j_2=3/2,j_{22}\rangle_2$ gli stati che ottengo sono

$|\frac{1}{2},\frac{3}{2}\rangle_1|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\rangle_2$ $\quad |\frac{1}{2},\frac{3}{2}\rangle_1|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\rangle_2$ $\quad |\frac{1}{2},+\frac{1}{2}\rangle_1|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\rangle_2$ $\quad |\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle_1|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\rangle_2$

$|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle_1|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\rangle_2$ $\quad |\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle_1|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\rangle_2$ $\quad |\frac{1}{2},-\frac{3}{2}\rangle_1|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\rangle_2$ $\quad |\frac{1}{2},-\frac{3}{2}\rangle_1|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\rangle_2$

questi 8 stati NON hanno simmetria definita
$\Rightarrow$ posso costruire quindi 4 combinazioni simmetriche

e 4 combinazioni antisimmetriche

Stesso caso avviene con $|j_1=\frac{3}{2}, j_{1z}\rangle|j_2=\frac{1}{2}, j_{2z}\rangle$

In totale nei due casi considerati 8 stati simmetrici e 8 stati antisimmetrici ; devo escludere 8 stati simmetrici

(N.B. $8+8=16$ stati che rimangono $36-4-16=16$)

Concludendo

$\boxed{j_{TOT}=2 \quad J_{TOT}=1 \quad 8 \text{ stati}}$ con energia $E=\frac{\hbar^2}{2I}\left(\frac{3}{4}+\frac{15}{4}\right)=\frac{9}{4}\frac{\hbar^2}{I}$

2) Una misura di J^2 può fornire solamente i seguenti valori $j_{TOT}=2$, $j_{TOT}=1$, $j_{TOT}=0$

N.B. il valore $j_{TOT}=3$ a priori possibile NON c'è

3) L'autovalore più basso è $\frac{3}{4}\frac{\hbar^2}{I}$ corrispondente all'unico stato $|E_0\rangle$

$$\Delta E_0=\langle E_0|\frac{\lambda}{I}\vec{\ell}_1\cdot\vec{\ell}_2|E_0\rangle=\langle E_0|\frac{\lambda}{I}\ell_{1z}\ell_{2z}+\frac{\lambda}{2I}(\ell_{1+}\ell_{2-}+\ell_{1-}\ell_{2+})|E_0\rangle$$

$$|E_0\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\ell_1=1\ S=\tfrac{1}{2}\ j_1=\tfrac{1}{2}\ j_{1z}=\tfrac{1}{2}\rangle_1|1,\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_2-|1,\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_1|1,\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_2\right]$$

devo esplicitare

$$\underset{\ell\ S\ j\ j_z}{|1,\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle}=\sqrt{\tfrac{2}{3}}\,\underset{\ell\ \ell_z}{|1,1\rangle}\overset{|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle}{\underset{S_z}{|\chi_-\rangle}}-\frac{1}{\sqrt{3}}|1,0\rangle\overset{|1/2,1/2\rangle}{|\chi_+\rangle}$$

$$|1,\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}|1,0\rangle|\chi_-\rangle-\sqrt{\tfrac{2}{3}}|1,-1\rangle|\chi_+\rangle \Longrightarrow$$

$$|L^2,S^2,J^2,J_z\rangle\longrightarrow|L^2,S^2,L_z,S_z\rangle=|L^2,L_z\rangle\cdot\chi_\pm$$
$$=|L^2,L_z\rangle|S^2,S_z\rangle$$

Quindi

$$|E_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big\{\Big[\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}\,\underset{l_1\ l_{2z}\ s_{1z}}{|1,1\rangle}|\chi_-\rangle_1 - \frac{1}{\sqrt{3}}|1,0\rangle_1|\chi_+\rangle_1\Big]\Big[\frac{1}{\sqrt{3}}|1,0\rangle_2|\chi_-\rangle_2 - \sqrt{\frac{2}{3}}\,|1,-1\rangle_2|\chi_+\rangle_2\Big] +$$

$$-\Big[\frac{1}{\sqrt{3}}|1,0\rangle_1|\chi_-\rangle_1 - \sqrt{\frac{2}{3}}|1,-1\rangle_1|\chi_+\rangle_1\Big]\Big[\sqrt{\frac{2}{3}}|1,1\rangle|\chi_-\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}|1,0\rangle|\chi_+\rangle\Big] =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big\{\frac{\sqrt{2}}{3}\,\underset{l_{1z}\ s_{1z}}{|1,\chi_-\rangle_1}\,\underset{l_{2z}\ s_{2z}}{|0,\chi_-\rangle} - \frac{2}{3}|1,\chi_-\rangle|-1,\chi_+\rangle - \frac{1}{3}|0,\chi_+\rangle|0,\chi_-\rangle + \frac{\sqrt{2}}{3}|0,\chi_+\rangle|-1,\chi$$

$$-\frac{\sqrt{2}}{3}|0\,\chi_-\rangle|1,\chi_-\rangle\ \frac{1}{3}|0,\chi_-\rangle|0,\chi_+\rangle + \frac{2}{3}|-1,\chi_+\rangle|1,\chi_-\rangle + \frac{\sqrt{2}}{3}|-1,\chi_+\rangle|0,\chi_+\rangle$$

Possiamo ora scrivere l'elemento di matrice

tenendo conto che $\vec{l}_1\cdot\vec{l}_2 = l_{1z}l_{2z} + \frac{1}{2}\big(\underbrace{l_{1+}}_{\text{innalzamento}}\,\underbrace{l_{2-}}_{\text{abbassamento}} + l_{1-}\,l_{2+}\big)$

$$\Rightarrow\quad \Delta E_0 = \frac{\alpha}{I}\langle E_0|\vec{l}_1\cdot\vec{l}_2|E_0\rangle = -11\alpha\frac{\hbar^2}{I}$$

Esercizio

Nel sistema di riferimento del baricentro, due particelle identiche di spin 1/2 interagiscono tra di loro con una forza elastica di richiamo e l'hamiltoniana è:

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2$$

($\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ coordinate relative e $\mu = \frac{m}{2}$ è la massa ridotta)

Determinare autovalori ed autofunzioni dello stato fondamentale e del 1° stato eccitato e il loro grado di degenerazione.

Nel sistema del baricentro il problema è formalmente ricondotto allo studio di un opportuno oscillatore tridimensionale isotropo di massa μ

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

la f.d.o. del sistema deve essere ANTISIMMETRICA (fermioni)

STATO FONDAMENTALE

$E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega \qquad |n_x\rangle|n_y\rangle|n_z\rangle$

$|\varphi_0\rangle = |0\rangle|0\rangle|0\rangle$ per la parte spaziale

ove $|0\rangle|0\rangle|0\rangle = \varphi_0(\vec{r}) = \alpha e^{-\beta r^2} = \alpha e^{-\beta(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2)} = \varphi_0(\vec{r})$ che è simmetrica rispetto allo scambio delle 2 particelle

per avere f.d.o. TOTALM. ANTISIMMETRICA devo moltiplicare per lo stato di SINGOLETTO che è antisim

$\Rightarrow |\psi_0\rangle = |\varphi_0\rangle_S |\chi_0\rangle_A$

in tale livello NON C'È DEGENERAZIONE

PRIMO STATO ECCITATO

$E_1 = 5/2\, \hbar\omega \qquad n = 1$

autovalore è degenere 3 volte le f.d.o. spaziali si può ottenere in 3 modi diversi

$|1\rangle|0\rangle|0\rangle \Rightarrow U_0(\vec{r})\, a\, x = U_0(\vec{r})\, a\,(x_1 - x_2)$

$|0\rangle|1\rangle|0\rangle \Rightarrow U_0(\vec{r})\, a\, y = U_0(\vec{r})\, a\,(y_1 - y_2)$

$|0\rangle|0\rangle|1\rangle \Rightarrow U_0(\vec{r})\, a\, z = U_0(\vec{r})\, a\,(z_1 - z_2)$

$\downarrow$

a = ampiezza costante $\qquad$ N.B. $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$

ora $|1\rangle|0\rangle|0\rangle$ è antisimmetrica rispetto allo scambio delle 2 particelle perché $U_0(\vec{r})$ è simm mentre $(x - x_2) = -(x_2 - x_1)$

quindi per tale stato x avere f.d.o. totalm. antisimm devo moltiplicare per stato di TRIPLETTO che è simmetrico e degenere 3 volte

$|1\rangle|0\rangle|0\rangle|\chi_1\rangle_S \longrightarrow$ degenerazione 3

analogo per gli altri stati

$|0\rangle|1\rangle|0\rangle|\chi_1\rangle_S \longrightarrow$ deg. 3

$|0\rangle|0\rangle|1\rangle|\chi_1\rangle_S \longrightarrow$ deg. 3

Le autofunzioni del 1° livello eccitato sono dunque

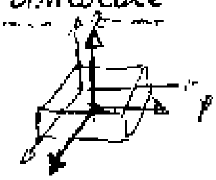
$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle_A\,|\chi_1\rangle_S$

il grado di degenerazione è $3+3+3 = 9$ NOVE

Esercizio

Due particelle identiche che non interagiscono sono vincolate a rimanere all'interno di un parallelepipedo

$|x|<a \quad |y|<b \quad |z|<c$ con $a>b>c$



$H = H_1 + H_2$

1) Determinare autovalori ed autofunzioni dell'energia precisando il grado di degenerazione per il livello fondamentale e per il 1° livello eccitato nel caso $S=0$ ed $S=\frac{1}{2}$

2) Supponendo che le particelle si trovino in uno degli autostati corrispondenti al 1° livello eccitato determinare le probabilità di trovare le particelle entrambe con $x>0$ (cioè $x_1>0$ $x_2>0$) ovvero $P_{E_1}(x_1>0, x_2>0)$

3) Supponendo di aggiungere la perturbazione $\lambda V = \frac{\lambda \pi^2 \hbar^2}{8 m a^4} \vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2$ all'hamiltoniano $H_0 = H_1 + H_2$ determinare le correzioni ai livelli determinati al punto 1.

Particelle non interagiscono, l'hamiltoniano è separabile $H = H_x + H_y + H_z$

$$\Rightarrow \psi_{n_x, n_y, n_z}(x,y,z) = \psi_{n_x}(x)\, \psi_{n_y}(y)\, \psi_{n_z}(z)$$

dove
$$\psi_{n_x}(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left((2k_x - 1)\frac{\pi x}{2a}\right) \\ \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left((2k_x)\frac{\pi x}{2a}\right) \end{cases} \qquad k_x = 1, 2, 3, \dots$$

con $E_{n_x} = (n_x)^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m(2a)^2} \equiv (n_x)^2 \mathcal{E}_x$

analoghe espressioni si hanno per ψ_{n_y} e ψ_{n_z}

N.B. gli indici $n_x\, n_y\, n_z$ partono da 1 altrimenti la f.d.o. risulta identicamente nulla

Lo stato fondamentale per una singola particella sarà

$\psi_{111}(x,y,z) = \psi_1(x)\,\psi_1(y)\,\psi_1(z) \Rightarrow E_{111} = \mathcal{E}_x + \mathcal{E}_y + \mathcal{E}_z$

Il 1° stato eccitato per una particella è quello in cui la particella è eccitata lungo x perché lungo x il quanto di eccitazione è più piccolo di tutti $(a>b>c)$

Considero ora le due particelle

CASO BOSONI $(S=0)$ (Spin intero f.d.o. simmetrica)

la f.d.o. per l'insieme delle due particelle è $\psi_{111}(1)\,\psi_{111}(2)$ e risulta simmetrica rispetto allo scambio $1 \leftrightarrow 2$ è quindi una buona f.d.o. x descrivere lo stato fondamentale per bosoni

lo stato è NON DEGENERE e l'energia $E_{0,B} = 2E_{111}$

CASO FERMIONI $(S=\frac{1}{2})$ (Spin semintero f.d.o. antisimmetrica)

ora compare anche lo spin, $\psi_{111}(1)\,\psi_{111}(2)$ è la parte spaziale che è simmetrica, devo considerare solo f.d.o. antisimmetriche quindi gli appioppo il SINGOLETTO DI SPIN che è antisimmetrico

$\Rightarrow \quad |E_{0,F}\rangle = \psi_{111}(1)\,\psi_{111}(2)\,|S_{TOT}=0\rangle$

anche lo stato fondamentale fermionico è non degenere con $E_{0,F} = 2E_{111}$

1° STATO ECCITATO

CASO BOSONI $S=0$

Posso considerare $\psi_{211}(1)\,\psi_{111}(2)$ oppure $\psi_{111}(1)\,\psi_{211}(2)$

Devo costruire funzioni a simmetria definita e precisamente totalmente simmetriche

$$|E_{1,B}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\psi_{211}(1)\psi_{111}(2) + \psi_{111}(1)\psi_{211}(2)\right\}$$

però uno stato ed anche il 1° livello eccitato bosonico è NON DEG

$$E_{1,B} = 4\varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z + \varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z$$

CASO FERMIONI $s = 1/2$

Vanno ora bene entrambe le combinazioni simmetrica ed antisimmetrica che vanno rispettivamente associate ad una parte di spin antisimmetrica (SINGOLETTO) e simmetrica (TRIPLETTO)

Quindi

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\psi_{211}(1)\psi_{111}(1) + \psi_{111}(1)\psi_{211}(2)\right\}|S_{TOT}=0\rangle \quad \text{1 stato}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\psi_{211}(1)\psi_{111}(1) - \psi_{111}(1)\psi_{211}(2)\right\}|S_{TOT}=1\rangle \quad \text{3 stati}$$

quindi il 1° livello eccitato fermionico è 4 volte degenere.

2)

$$P(x_1>0, x_2>0) = \int |\psi^{\pm}_{E_1}|^2 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 =$$

$$= \int_{-b}^{b} dy_1 dy_2 \int_{-c}^{c} dz_1 dz_2 \int_{-a}^{a} dx_1 dx_2 \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi_{211}(1)\psi_{111}(2) \pm \psi_{111}(1)\psi_{211}(2)\right|^2 =$$

$$= \frac{1}{2}\int_{-b}^{b} dy_1 dy_2 \int_{-c}^{c} dz_1 dz_2 \int_{0} dx_1 dx_2 \left(\psi_{211}^2(1)\psi_{111}^2(2) + \psi_{111}^2(1)\psi_{211}^2(2) \pm 2\psi_{211}(1)\psi_{111}(2)\psi_{111}(1)\psi_{211}(2)\right) =$$

$$= \frac{1}{2}\underbrace{\int_{-b}^{b}\psi_1^2(y_1)dy_1}_{*}\underbrace{\int_{-b}^{b}\psi_1^2(y_2)dy_2}_{*}\underbrace{\int_{-c}^{c}\psi_1^2(z_1)dz_1}_{*}\underbrace{\int_{-c}^{c}\psi_1^2(z_2)dz_2}_{*}\int_0^a dx_1\psi_2^2(x_1)\int_0^a dx_2\psi_1^2(x_2) +$$

$$+ \frac{1}{2}(\text{analogo}) \pm \frac{2}{2}\int \psi_2(x_1)\psi_1(y_1)\psi_1(z_1)\psi_1(x_2)\psi_1(y_2)\psi_1(z_2)\psi_1(x_1)\psi_1(y_1)\psi_1(z_1)\psi_2(x_2)\psi_1(y_2)\psi_1(z_2)\,dx_1dy_1dz_1dx_2dy_2dz_2$$

N.B. Tutti integrali del tipo * fanno 1 a causa della normalizzazione $\Rightarrow$

$$=\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\right)\int_0^a dx_1\,\psi_2^2(x_1)\int_0^a dx_2\,\psi_1^2(x_2)\ \pm\cancel{2}\int_0^a \psi_2(x_1)\psi_1(x_1)\,dx_1\int_0^a \psi_1(x_2)\psi_2^*(x_2)\,dx_1 =$$

$$= \int_0^a \frac{1}{a}\,\text{sen}^2\left(\frac{\pi x_1}{a}\right)dx_1 \int_0^a \frac{1}{a}\cos^2\left(\frac{\pi x_2}{2a}\right)dx_2 \pm \cancel{2}\left(\int_0^a \psi_2(x_1)\psi_1(x_1)\,dx_1\right)^2 =$$

$$\frac{2}{\pi^2}\int_0^{\pi}\text{sen}^2 x_1\,dx_1\int_0^{\pi/2}\cos^2 x_2\,dx_2\ \cancel{\pm}\left(\int_0^a \frac{1}{a}\,\text{sen}\left(\frac{\pi x_1}{a}\right)\cos\left(\frac{\pi x_1}{2a}\right)dx_1\right)^2 =$$

$$= \frac{2}{\pi^2}\cdot\frac{1}{2}\pi\cdot\frac{\pi}{4} \pm \left(\frac{\cancel{8}\,4\,\pi}{3}\right)^2 = \frac{1}{4}\pm\left(\frac{\cancel{8}\,4}{3\pi}\right)^2$$

N.B. a Falciani il risultato viene $\frac{1}{4}\pm\left(\frac{4}{3\pi}\right)^2$

3) eseguo solo nel 1° caso

$$\Delta E_{0B} = \langle E_{0B}|\Delta V|E_{0B}\rangle = \frac{A\pi^2\hbar^2}{2ma^4}\int \psi^*_{111}(1)\,\psi^*_{111}(2)\,(x_1x_2+y_1y_2+z_1z_2)\,\psi_{111}(1)\,\psi_{111}(2) =$$

$$= \frac{A\pi^2\hbar^2}{8ma^4}\underbrace{\int_{-a}^{a} x_1\psi_1^2(x_1)\,dx_1}_{\text{dispari}}\int_{-a}^{a} x_2\psi_1^2(x_2)\,dx_2 + \int_{-b}^{b}\psi_1^2(y_1)\,dy_1\int_{-b}^{b} y_2\,\psi(y_2)\,dy_2 + \int_{-c}^{c}\cdots\int_{-c}^{c} = 0$$