# Meccanica Quantistica

# Compitino I (8/11/2013)

## Problema 1

Si consideri una particella di massa $m$ vincolata a muoversi nel segmento $-a \leq x \leq a$, cioè soggetta ad un potenziale

$$V_0(x) = \begin{cases} \infty & |x| > a \\ 0 & |x| \leq a \end{cases} \tag{1}$$

(a) Si scrivano gli autovalori e gli autostati della Hamiltoniana

$$H = \frac{p^2}{2m} + V_0(x)$$

(b) Il potenziale (1) è simmetrico per parità, $x \to -x$. Si determini la conseguenza di questo fatto sulle proprietà delle autofunzioni di $H$ sotto parità $\mathcal{P}$

$$\mathcal{P}\,\psi(x) = \psi(-x)$$

Si specifichi la risposta in particolare nel caso dello stato fondamentale e del primo eccitato.

(c) Si consideri ora l'aggiunta del potenziale (Fig. 1)

$$V_1(x) = g\,\delta(x)\,; \qquad g > 0, \tag{2}$$

a (1). Risulta che una parte dello spettro del punto (a) resta invariato, in presenza del termine (2). Dire per quali livelli succede questo, e spiegare il motivo.

(d) Si provi a valutare l'energia dello stato fondamentale del sistema con $V_1$ per $g$ molto grande (in un'approssimazione valida all'ordine di $O(1/g)$) e commentare brevemente il risultato.

## Problema 2

Si consideri un oscillatore armonico di massa $m$ e frequenza angolare $\omega$ perturbato, in modo tale che l'Hamiltoniana sia

$$H = \frac{p^2}{2m} - ax + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{3}$$

1) Si calcoli lo spettro dell'Hamiltoniana.

2) Determinare il valore medio dell'operatore $p$ sullo stato fondamentale.

3) Lo stesso per l'operatore $x$.

4) All'istante $t = 0$, la particella è in uno stato descritto dalla funzione d'onda

$$\psi_0(x) = \mathcal{N}\, e^{-x^2/d^2}, \tag{4}$$

dove

$$\mathcal{N} = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{d}}$$

è la costante di normalizazzione. Studiando l'evoluzione temporale del sistema (con $H$) determinare la densità di probabilità per vari valori di $x$, all'istante, $t = \frac{\pi}{\omega}$.

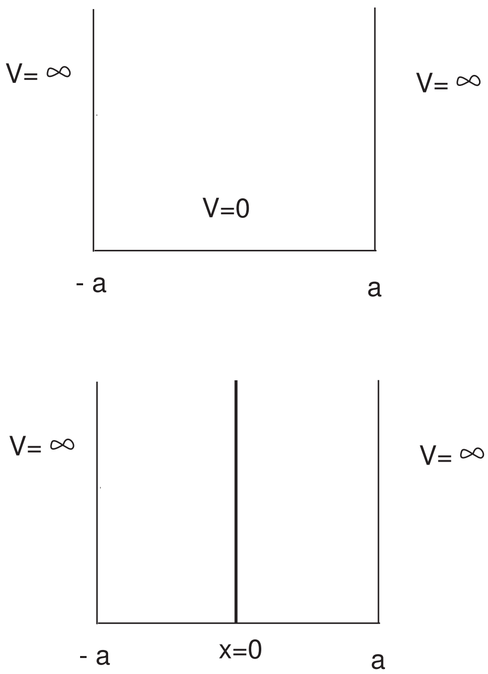


Figure 1:

# Soluzioni

## Problema 1

a, b) Le soluzioni sono quelle di una particella libera in una buca di larghezza $2a$, con origine della buca in $x = -a$ quindi

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{a}}\,\sin(k_n\,(x+a))\,; \qquad k_n = \frac{n\pi}{2a}, \quad n = 1, 2, \ldots \tag{5}$$

Gli autovalori dell'energia sono

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{2a}\right)^2 ; \qquad n = 1, 2, \ldots$$

Per $n$ dispari o pari si ha rispettivamente

$$\psi_{2s+1}(x) = \sqrt{\frac{1}{a}}\,\sin(\frac{n\pi}{2a}x + \pi s + \frac{\pi}{2}) = (-1)^s\sqrt{\frac{1}{a}}\cos(\frac{n\pi}{2a}x)$$
$$\psi_{2s}(x) = \sqrt{\frac{1}{a}}\,\sin(\frac{n\pi}{2a}x + \pi s) = (-1)^s\sqrt{\frac{1}{a}}\,\sin(\frac{n\pi}{2a}x)\ .$$

Le soluzioni con $n$ dispari, $n = 1, 3, 5, \ldots$ corrispondono a funzioni pari in $x$, mentre quelle con $n$ pari, $n = 2, 4, 6, \ldots$ a funzioni dispari in $x$. Quindi si hanno alternativamente soluzioni pari e dispari, come aspettato.

Infatti, è conseguenza dell'invarianza per parità dell'Hamiltoniana e della non degenerazione degli stati legati, che ogni autofunzione ha la parità definita. Comibinando con il teorema di oscillazione, poi, si avvince che lo stato fondamentale è pari, mentre il primo eccitato è dispari, come dalla (5).

c) In presenza della funzione $\delta$ gli autovalori sono determinati dalle condizioni al bordo e dalla discontinuità della derivata prima della funzione d'onda nell'origine:

$$\psi(-a) = 0\,; \qquad \psi(a) = 0 \qquad \frac{1}{2}\left(\psi'(0^+) - \psi'(0^-)\right) = \beta\psi(0)$$

Le soluzioni dispari (in $x$) precedenti sono ancora soluzioni del problema perchè, essendo $\psi(0) = 0$, si ha che la derivata prima è continua, e si ritorna al caso di una buca di potenziale senza $\delta$.

Per le funzioni pari si avrà sicuramente nelle due zone del potenziale:

$$\psi_L = B\sin(k(x+a))\,; \quad \psi_R = A\sin k(x-a)$$

per soddisfare le condizioni in $x = \pm a$. L'energia si scrive

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

La continuità della funzione impone, se $\psi(0) \neq 0$ (come deve essere per le funzioni pari)

$$B = -A \, .$$

La condizione per la derivata si scrive allora

$$\frac{1}{2}\left(Ak\,\cos(ka) + Ak\,\cos(ka)\right) = -\beta A\,\sin(ka)$$

dove

$$\beta \equiv \frac{mg}{\hbar^2}\ ,$$

cioè

$$-k\cot(ka) = \beta. \tag{6}$$

Per $\beta = 0$ (senza il potenziale delta a $x = 0$), si ha $ka$ multiplo dispari di $\pi/2$ ($k = \pi n/2a$, $n$ dispari) e si riottengono le soluzioni pari del caso precedente, come è giusto.

Per $\beta \to \infty$, $ka$ avvicina ad un multiplo di $\pi$, cioè un multiplo *pari* di $\pi/2$ e quindi si ottengono le stesse energie degli stati dispari della buca, in questo limite gli autovalori diventano doppiamente degeneri.

Questo appare in contraddizione con il teorema di "non degenerazione", ma in realtà, anche la funzione d'onda pari si annulla all'origine in questo limite, (le soluzioni dispari si annullano per conto loro), quindi il sistema si riduce effettivamente in due buche identiche separate.

d) Per valutare l'energia del fondamentale per $\beta$ grande scriviamo la condizione nella forma

$$\frac{ka}{\beta a} = -\tan(ka)$$

Per $\beta \to \infty$ la (prima) soluzione è $ka = \pi$, poniamo $ka = \pi + y$ e sviluppiamo in $y$, ci aspettiamo $y = \mathcal{O}(1/\beta a)$.

$$\frac{\pi + y}{\beta a} \simeq -y \qquad \Rightarrow \qquad y \simeq -\frac{\pi}{\beta a} \qquad \Rightarrow \qquad k \simeq \frac{\pi}{a}(1 - \frac{1}{\beta a}) = \frac{\pi}{a}(1 - \frac{\hbar^2}{mag})$$

Quindi l'energia dello stato fondamentale è, approssimativamente

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 \simeq \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\left(1 - \frac{2}{\beta a}\right) = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\left(1 - \frac{2\hbar^2}{gma}\right),$$

da paragonare con l'energia del primo stato eccitato

$$E_2 = \frac{\hbar^2}{2m}k_2^2 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\ .$$

Come si vede è un caso estremamente semplificato del meccanismo che produce lo splitting tra un sistema degenere di due buche (esempio ammoniaca).

## Problema 2

a) Completando il quadrato l'Hamiltoniana si scrive

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 (x - \frac{a}{m\omega^2})^2 - \frac{a^2}{2m\omega^2} \tag{7}$$

Cambiando variabile a

$$z = x - x_0, \qquad x_0 \equiv \frac{a}{m\omega^2}$$

si ha di nuovo un oscillatore armonico,

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 z^2 - \frac{1}{2} \frac{a^2}{m\omega^2}$$

a meno di una costante additiva sulla Hamiltoniana. Si noti che

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x}$$

quindi l'impulso $p$ resta invariato in questo cambio della variabile. (Infatti, $[z, p] = i\hbar$) Gli autovalori dell'energia sono quindi

$$E_n = \hbar\omega\,(n + \frac{1}{2}) - \frac{a^2}{2m\omega^2}\,; \qquad n = 0, 1, \ldots$$

b) L'autofunzione è reale (a meno eventualemente di una fase costante) quindi il valor medio di $p$ è nullo.

c) Il valor medio di $x$ si può calcolare a partire dal valor medio di $z$ (nullo nello stato fondamentale)

$$\langle \psi_0 | x | \psi_0 \rangle = \langle \psi_0 | z | \psi_0 \rangle + \frac{a}{m\omega^2} = \frac{a}{m\omega^2}$$

d) La funzione d'onda iniziale è

$$\psi(z, 0) = \mathcal{N} e^{-(z+x_0)^2/d^2},$$

i.e., è un Gaussiano centrato a $z = -x_0$. Sviluppando in autostati di $H$, (7),

$$\psi(z, 0) = \sum_n a_n\, \psi_n(z)\ .$$

Questa evolve come

$$\psi(z, t) = e^{-iE_0 t/\hbar} \sum_n a_n\, e^{-i\omega n t}\, \psi_n(z)\ , \qquad E_0 = \frac{1}{2}\omega\hbar - \frac{a^2}{2m\omega^2}.$$

Dopo un mezzo periodo classico di tempo, si ha

$$\psi(z, \tfrac{\pi}{\omega}) = e^{-iE_0 t/\hbar} \sum_n a_n \, (-)^n \, \psi_n(z) = e^{-iE_0 t/\hbar} \, \psi(-z, 0) = e^{-iE_0 t/\hbar} \, \mathcal{N} e^{-(z-x_0)^2/d^2},$$

ed è la stessa distribuzione Gaussiana di $\psi_0$ ma centrata a $z = x_0$, i.e., a $x = 2x_0$. La distribuzione è data da

$$P \, dx = |\psi(z, \tfrac{\pi}{\omega})|^2 dx = \left(\tfrac{2}{\pi}\right)^{1/2} \, \tfrac{1}{d} \, e^{-2(x-2x_0)^2/d^2} \, dx \tag{8}$$