

Lezione 07/12/2023

Esercizio 1. Oscillatore armonico tridimensionale. Calcolare le energie e gli autostati dell'oscillatore armonico tridimensionale isotropo

$$\mathbf{H} = \frac{\vec{\mathbf{p}}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\mathbf{r}^2.$$

Descrivere lo stato fondamentale e il primo eccitato in termini di autostati del momento angolare e nella loro rappresentazione in termini di (n_x, n_y, n_z) .

Sol: Possiamo scomporre l'Hamiltoniana in tre oscillatori armonici lungo le tre direzioni

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_x + \mathbf{H}_y + \mathbf{H}_z,$$

$$\mathbf{H}_j = \frac{\mathbf{p}_j^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\mathbf{q}_j^2,$$

e quindi definire la base

$$|n_x, n_y, n_z\rangle = |n_x\rangle |n_y\rangle |n_z\rangle.$$

Poiché l'Hamiltoniana è separabile, i vettori di tale base sono anche autostati dell'energia

$$\mathbf{H}|n_x, n_y, n_z\rangle = E_{n_x, n_y, n_z} |n_x, n_y, n_z\rangle,$$

con

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \hbar\omega \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right).$$

Ovviamente, tutti gli stati con $n_x + n_y + n_z = n$ sono degeneri con degenerazione $d = \binom{n+3-1}{3-1} = \binom{n+2}{2} = \frac{(n+1)(n+2)}{2}$. Possiamo scrivere

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

con $\mathbf{n} = \mathbf{n}_x + \mathbf{n}_y + \mathbf{n}_z$. Notiamo che abbiamo a che fare con un potenziale centrale e l'equazione di Schroedinger si può scrivere in coordinate sferiche come

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{m\omega^2}{2} r^2 + \frac{1}{r^2 2m} L^2(\theta, \phi) \right] \psi = E\psi,$$

per cui la funzione d'onda si può separare in una parte radiale ed una angolare

$$\psi = R_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \phi).$$

Come per tutti i potenziali centrali, $[\mathbf{H}, \mathbf{L}^2] = [\mathbf{H}, \mathbf{L}_z] = 0$ e quindi anche $[\mathbf{n}, \mathbf{L}^2] = [\mathbf{n}, \mathbf{L}_z] = 0$. Possiamo quindi scegliere una nuova base di autostati simultanei di $\mathbf{n}, \mathbf{L}^2, \mathbf{L}_z$

$$|n, l, m\rangle.$$

In questo caso il momento angolare è conservato per cui lo stato fondamentale è

$$|n=0, l=0, m=0\rangle = |n_x=0, n_y=0, n_z=0\rangle.$$

La funzione d'onda corrispondente è

$$\langle x, y, z | n_x=0, n_y=0, n_z=0 \rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}\ell} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{x^2+y^2+z^2}{2\ell^2}} = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}\ell} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r^2}{2\ell^2}},$$

e, come previsto, non dipende dalle coordinate angolari. Ricordando che

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}},$$

si ottiene

$$R_{0,0}(r) = \sqrt{4\pi} \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}\ell} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r^2}{2\ell^2}}.$$

Il primo stato eccitato ha momento angolare $l=1$, lo spazio degenero corrispondente è generato sia dai vettori

$$|n_x=1, n_y=0, n_z=0\rangle, |n_x=0, n_y=1, n_z=0\rangle, |n_x=0, n_y=0, n_z=1\rangle,$$

che dai vettori

$$\begin{aligned}
 &|n=1, l=1, m=1\rangle, |n=1, l=1, m=0\rangle, |n=1, l=1, m=-1\rangle. \\
 \langle r, \theta, \phi | n_x=1, n_y=0, n_z=0 \rangle &= \left(\frac{1}{\sqrt{\pi\ell}} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{2} e^{-\frac{r^2}{2\ell^2}} x = A(r) \cos \phi \sin \theta \\
 \langle r, \theta, \phi | n_x=0, n_y=1, n_z=0 \rangle &= \left(\frac{1}{\sqrt{\pi\ell}} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{2} e^{-\frac{r^2}{2\ell^2}} y = A(r) \sin \phi \sin \theta \\
 \langle r, \theta, \phi | n_x=0, n_y=0, n_z=1 \rangle &= \left(\frac{1}{\sqrt{\pi\ell}} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{2} e^{-\frac{r^2}{2\ell^2}} z = A(r) \cos \theta
 \end{aligned}$$

Ricordando che

$$\begin{aligned}
 Y_1^0 &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \theta \\
 Y_1^{\pm 1} &= \mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} e^{\pm i\phi} \sin \theta
 \end{aligned}$$

otteniamo

$$\begin{aligned}
 |n_x=1, n_y=0, n_z=0\rangle &= \frac{|n=1, l=1, m=1\rangle + |n=1, l=1, m=-1\rangle}{\sqrt{2}}, \\
 |n_x=0, n_y=1, n_z=0\rangle &= \frac{|n=1, l=1, m=1\rangle - |n=1, l=1, m=-1\rangle}{\sqrt{2}}, \\
 |n_x=0, n_y=0, n_z=1\rangle &= |n=1, l=1, m=0\rangle,
 \end{aligned}$$

con

$$R_{1,1}(r) = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi\ell}} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{2\sqrt{2\pi}}{\sqrt{3}} e^{-\frac{r^2}{2\ell^2}}.$$

Esercizio 2. Dato un oscillatore armonico in 2D descritto dall'Hamiltoniana

$$\mathbf{H}_0 = \frac{\mathbf{p}_x^2 + \mathbf{p}_y^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} (\mathbf{x}^2 + \mathbf{y}^2),$$

si aggiunga il termine perturbativo

$$\lambda \mathbf{V} = \lambda m \omega^2 \mathbf{x} \mathbf{y}, \quad 0 \leq \lambda < 1.$$

Calcolare i primi due livelli energetici e i rispettivi autostati sia con la teoria delle perturbazioni al prim'ordine non nullo, sia esattamente. Confrontare i due risultati nel limite di $\lambda \rightarrow 0$.

Sol: L'Hamiltoniana imperturbata si separa nella somma di due Hamiltoniane di oscillatori armonici indipendenti nelle due direzioni

$$\mathbf{H}_0 = \mathbf{H}_{0,x} + \mathbf{H}_{0,y}.$$

Un set completo di autostati è dato dal prodotto

$$|\psi_{n_x, n_y}\rangle = |n_x\rangle |n_y\rangle,$$

con energie

$$\epsilon_m = \hbar\omega (m+1), \quad m = n_x + n_y.$$

Ogni stato ha degenerazione pari a

$$d_m = m+1.$$

Lo stato fondamentale è

$$|n_x=0, n_y=0\rangle, \quad \epsilon_0 = \hbar\omega,$$

il primo livello eccitato ha energia

$$\epsilon_1 = 2\hbar\omega,$$

e l'autospazio è generato dagli stati $\{|n_x=1, n_y=0\rangle, |n_x=0, n_y=2\rangle\}$. Ricordiamo inoltre che

$$\mathbf{x} \mathbf{y} = \frac{\ell^2}{2} (\mathbf{a}_x \mathbf{a}_y + \mathbf{a}_x \mathbf{a}_y^\dagger + \mathbf{a}_x^\dagger \mathbf{a}_y + \mathbf{a}_x^\dagger \mathbf{a}_y^\dagger).$$

- **Teoria delle perturbazioni.** Per quanto riguarda lo stato fondamentale la correzione al prim'ordine all'energia è

$$\delta_0^{(1)} = m\omega^2 \langle 0, 0 | \mathbf{xy} | 0, 0 \rangle = 0,$$

la correzione allo stato

$$|\psi_{0,0}^{(1)}\rangle = m\omega^2 \sum_{n_x, n_y \neq 0,0} \frac{\langle n_x, n_y | \mathbf{xy} | 0, 0 \rangle}{\epsilon_0 - \epsilon_{n_x+n_y}} |0, 0\rangle = -\frac{1}{4} |1, 1\rangle.$$

La correzione al second'ordine dell'energia è

$$\delta_0^{(2)} = m\omega^2 \langle 0, 0 | \mathbf{xy} | \psi_{0,0}^{(1)} \rangle = -m\omega^2 \frac{\ell^2}{8} = -\frac{\hbar\omega}{8},$$

ottenendo

$$|\bar{\psi}_0\rangle \propto \left(|00\rangle - \frac{\lambda}{4} |1, 1\rangle \right), \quad E_0 \simeq \hbar\omega \left(1 - \frac{\lambda^2}{8} \right).$$

Per quanto riguarda il primo livello eccitato, il potenziale si rappresenta nel sottospazio come

$$m\omega^2 \mathbf{xy} = \frac{\hbar\omega}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar\omega}{2} \sigma_1.$$

Dai suoi autovalori e autovettori si ottiene

$$|\bar{\psi}_{1,\pm}\rangle \simeq \frac{|0, 1\rangle \pm |1, 0\rangle}{\sqrt{2}}, \quad E_{1,\pm} \simeq \hbar\omega \left(2 \pm \frac{\lambda}{2} \right).$$

- **Risultato esatto.** Conviene effettuare la trasformazione canonica

$$\mathbf{x}' = \frac{\mathbf{x} + \mathbf{y}}{\sqrt{2}}, \quad \mathbf{y}' = \frac{\mathbf{x} - \mathbf{y}}{\sqrt{2}},$$

$$\mathbf{p}'_x = \frac{\mathbf{p}_x + \mathbf{p}_y}{\sqrt{2}}, \quad \mathbf{p}'_y = \frac{\mathbf{p}_x - \mathbf{p}_y}{\sqrt{2}}.$$

Con questa trasformazione l'Hamiltoniana diventa la somma di due oscillatori armonici con frequenze diverse

$$\mathbf{H}' = \frac{(\mathbf{p}'_x)^2 + (\mathbf{p}'_y)^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} (\mathbf{x}'^2 + \mathbf{y}'^2) + \lambda \frac{m\omega^2}{2} (\mathbf{x}'^2 - \mathbf{y}'^2) = \mathbf{H}_{x'}(\omega_+) + \mathbf{H}_{y'}(\omega_-),$$

$$\omega_{\pm} = \omega\sqrt{1 \pm \lambda}, \quad \ell_{\pm} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_{\pm}}}$$

Lo stato fondamentale ha energia

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \left(\sqrt{1 + \lambda} + \sqrt{1 - \lambda} \right),$$

e autofunzione

$$\bar{\psi}_0(x', y') = \frac{e^{-\frac{x'^2}{2\ell_+^2}} e^{-\frac{y'^2}{2\ell_-^2}}}{\sqrt{\pi\ell_+\ell_-}}.$$

Per $\lambda \rightarrow 0$

$$\omega_{\pm} \sim \omega \left(1 \pm \frac{\lambda}{2} - \frac{\lambda^2}{8} \right),$$

$$E_0 \simeq \hbar\omega \left(1 - \frac{\lambda^2}{8} \right).$$

$$\bar{\psi}_0 \simeq \frac{e^{-\frac{x'^2+y'^2}{2\ell^2}} e^{-\frac{m\omega\lambda}{\hbar} \frac{x'^2-y'^2}{4}}}{\ell\sqrt{\pi}} \simeq \frac{e^{-\frac{x^2+y^2}{2\ell^2}} e^{-\frac{m\omega\lambda}{\hbar} \frac{xy}{2}}}{\ell\sqrt{\pi}} \simeq \frac{e^{-\frac{x^2+y^2}{2\ell^2}}}{\ell\sqrt{\pi}} \left(1 - \frac{m\omega\lambda}{\hbar} \frac{xy}{2} \right) \propto \psi_0 - \frac{\lambda}{4} \psi_{1,1}.$$

Per quanto riguard il primo livello eccitato

$$E_{1,1} = \frac{\hbar\omega}{2} \left(3\sqrt{1 + \lambda} + \sqrt{1 - \lambda} \right),$$

$$E_{1,2} = \frac{\hbar\omega}{2} \left(\sqrt{1+\lambda} + 3\sqrt{1-\lambda} \right),$$

$$\bar{\psi}_{1,1}(x', y') = \frac{e^{-\frac{x'^2}{2\ell_+^2}} e^{-\frac{y'^2}{2\ell_-^2}}}{\sqrt{2\pi\ell_+\ell_-}} 2 \frac{x'}{\ell_+},$$

$$\bar{\psi}_{1,2}(x', y') = \frac{e^{-\frac{x'^2}{2\ell_+^2}} e^{-\frac{y'^2}{2\ell_-^2}}}{\sqrt{2\pi\ell_+\ell_-}} 2 \frac{y'}{\ell_-}.$$

Per $\lambda \rightarrow 0$

$$E_{1,1} \simeq \hbar\omega \left(2 - \frac{\lambda}{2} \right), \quad E_{12} \simeq \hbar\omega \left(2 + \frac{\lambda}{2} \right),$$

$$\bar{\psi}_{1,1} \simeq \frac{e^{-\frac{x^2+y^2}{2\ell^2}}}{\ell^2 \sqrt{2\pi}} 2(x+y) \propto \psi_{1,0} + \psi_{0,1},$$

$$\bar{\psi}_{1,1} \simeq \frac{e^{-\frac{x^2+y^2}{2\ell^2}}}{\ell^2 \sqrt{2\pi}} 2(x-y) \propto \psi_{1,0} - \psi_{0,1}$$