1 Nel CM la Hamiltoniana diventa

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{4} m\omega^2 x^2 + \frac{\omega}{2\hbar} \bar{S}_1 \cdot \bar{S}_2 \qquad \mu = \frac{m}{2}$$

$$= \frac{p^2}{2\mu} + \frac{\mu}{2}\omega^2 x^2 + \frac{\omega}{2\hbar} \bar{S}_1 \cdot \bar{S}_2$$

dove p è l'impulso coniugato con $x = x_2 - x_1$

(a) Per calcolare lo spettro notiamo che

$$\frac{\omega}{2\hbar} \bar{S}_1 \cdot \bar{S}_2 = \frac{\omega}{4\hbar} (2\bar{S}_1 \cdot \bar{S}_2)$$

$$= \frac{\omega}{4\hbar} \left(S^2 - S_1^2 - S_2^2 \right)$$

$$= \frac{\hbar\omega}{4} \left(\frac{S^2}{\hbar^2} - 4 \right) \qquad \bar{S} = \bar{S}_1 + \bar{S}_2$$

Per due particelle di spin 1, S può essere 0, 1, 2

$$S = 0 \qquad S^2 = 0$$
$$S = 1 \qquad S^2 = 2\hbar^2$$
$$S = 2 \qquad S^2 = 6\hbar^2$$

Quindi

$$\frac{\omega}{2\hbar} \bar{S}_1 \cdot \bar{S}_2 = \begin{cases} -\hbar\omega & S = 0 \\ -\frac{\hbar\omega}{2} & S = 1 \\ +\frac{\hbar\omega}{2} & S = 2 \end{cases}$$

Se non consideriamo l'indistinguibilità, lo spettro è dato da

$$E = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) - \hbar\omega \qquad S = 0$$

$$E = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{\hbar\omega}{2} \qquad S = 1 \qquad n = 0, 1, 2 \ldots$$

$$E = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar\omega}{2} \qquad S = 2$$

Ordinando gli stati

<u>stati $S=0$</u> :

$E=-\frac{\hbar\omega}{2}$ $\quad n=0$

$E=\frac{\hbar\omega}{2}$ $\quad n=1$

$E=\frac{3\hbar\omega}{2}$ $\quad n=2$

$\vdots$

stati $S=1$

$E=0$ $\quad n=0$

$E=\hbar\omega$ $\quad n=1$

$E=2\hbar\omega$ $\quad n=2$

$\vdots$

stati $S=2$

$E=\hbar\omega$ $\quad n=0$

$E=2\hbar\omega$ $\quad n=1$

$\vdots$

Quindi

$E=-\frac{\hbar\omega}{2}$	$\psi_0(x)\,\vert \overset{S}{0}\ \overset{S_z}{0}\rangle$	$n=0$	$S=0$
$E=0$	$\psi_0(x)\,\vert 1\ m\rangle$	$n=0$	$S=1$
$E=\frac{\hbar\omega}{2}$	$\psi_1(x)\,\vert 0\ 0\rangle$	$n=1$	$S=0$
$E=\hbar\omega$	$\psi_1(x)\,\vert 1\ m\rangle$	$n=1$	$S=1$
	$\psi_0(x)\,\vert 2\ m\rangle$	$n=0$	$S=2$
$E=\frac{3\hbar\omega}{2}$	$\psi_2(x)\,\vert 0\ 0\rangle$	$n=2$	$S=0$

<u>ecc</u> :

PRINCIPIO DI PAULI: l'autofunzione deve essere pari sotto scambio ($x\to -x$, $S_1\leftrightarrow S_2$)

Dato che $\psi_n(x)=\begin{cases}\text{pari sotto scambio per } n \text{ PARI}\\ \text{dispari sotto scambio per } n \text{ dispari}\end{cases}$

$$|S\ m\rangle=\begin{cases}\text{pari} & \text{per } S=0,2\\ \text{disp.} & \text{per } S=1\end{cases}$$

Sono accettabili

$\psi_n(x)|0\,0\rangle$, $\psi_n(x)|2\ m\rangle$ n pari

$\psi_n(x)|1 m\rangle$ n dispari

Stati $\psi_0|1\ m\rangle$, $\psi_1|0\ 0\rangle$ <u>NON</u> sono accettabili

Spettro:

$E=-\frac{\hbar\omega}{2}$ $\psi_0(x)|0\ 0\rangle$ non deg.

$E=\hbar\omega$ $\begin{cases}\psi_1(x)|1\ m\rangle \\ \psi_0(x)|2\,m\rangle\end{cases}$ deg: $3+5=8$

$E=\frac{3}{2}\hbar\omega$ $\psi_2(x)|0\ 0\rangle$ non deg.

b) $\Psi=\psi_1(x)\left(A|1\,-1\rangle+B|-1\ 1\rangle\right)+C\,\psi_2(x)\,|0\ 0\rangle$

disp. sotto scambio

Deve essere dispari sotto scambio

$\boxed{A=-B}$ Conseguenza principio Pauli

pari pari (sotto scambio)

OK per Pauli

Quindi

$\Psi=\psi_1(x)\,A\left(|1\,-1\rangle-|-1\ 1\rangle\right)+C\,\psi_2(x)|0\ 0\rangle$

Passiamo alla base $|S\ S_z\rangle_S$ dello spin totale (tavole CG 1×1)

$|1\,-1\rangle-|-1\ 1\rangle=\sqrt{2}\,|1\ 0\rangle_S$

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

Quindi

$$\Psi = \psi_1(x)\, A\sqrt{2}\, |1,0\rangle_s + C\psi_2(x)\left(\sqrt{\frac{2}{3}}|2,0\rangle_s - \sqrt{\frac{1}{3}}|0,0\rangle_s\right)$$

Condizioni su A, C

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = 1 \Longrightarrow \quad 2|A|^2 + \frac{2}{3}|C|^2 + \frac{1}{3}|C|^2 = 1$$

$$2|A|^2 + |C|^2 = 1$$

$$\text{prob}(S^2 = 0) = \frac{|C|^2}{3} = \frac{1}{6}$$

Quindi $\quad |C|^2 = \frac{1}{2} \qquad |C| = \frac{1}{\sqrt{2}}$

$$|A|^2 = \frac{1}{4} \qquad |A| = \frac{1}{2}$$

Poniamo qui $\quad A = \frac{1}{2}$ con opportuna scelta di fase

$C = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\alpha} \quad \alpha$ fase arbitraria

$$\Psi = \psi_1(x)\frac{1}{\sqrt{2}}|1,0\rangle_s + e^{i\alpha}\psi_2(x)\left(\frac{1}{\sqrt{3}}|2,0\rangle_s - \frac{1}{\sqrt{6}}|0\,0\rangle_s\right)$$

probabilità S^2:

$\text{prob}(S^2 = 6\hbar^2) = \frac{1}{3} \qquad [S=2]$

$\text{prob}(S^2 = 2\hbar^2) = \frac{1}{2} \qquad [S=1]$

$\text{prob}(S^2 = 0) = \frac{1}{6} \qquad [S=0]$

Tutti gli stati hanno $S_z = 0$. Quindi

$$\text{prob}(S_z = 0) = 1$$

Calcoliamo l'energia degli stati

$\psi_1(x)\,|1\,0\rangle_S \longrightarrow \quad E = \hbar\omega\left(1+\frac{1}{2}\right) - \frac{\hbar\omega}{2} = \hbar\omega$

$\psi_2(x)\,|2\,0\rangle_S \longrightarrow \quad E = \hbar\omega\left(2+\frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar\omega}{2} = 3\hbar\omega$

$\psi_2(x)\,|0\,0\rangle_S \longrightarrow \quad E = \hbar\omega\left(2+\frac{1}{2}\right) - \hbar\omega = \frac{3}{2}\hbar\omega$

Quindi

$\text{prob}(E=\hbar\omega) = \frac{1}{2}$

$\text{prob}(E=3\hbar\omega) = \frac{1}{3}$

$\text{prob}(E=\frac{3}{2}\hbar\omega) = \frac{1}{6}$

c) S^2 commuta con H: $[H, S^2]=0$. Quindi il valor medio non dipende da t.

$\langle\psi(t)|S^2|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t=0)|S^2|\psi(t=0)\rangle$

$= 6\hbar^2\,\text{prob}(S^2=6\hbar^2) + 2\hbar^2\,\text{prob}(S^2=2\hbar^2)$

$= 6\hbar^2\,\frac{1}{3} + 2\hbar^2\,\frac{1}{2} = 3\hbar^2$

d)

Abbiamo $\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\langle 2\,0| - \frac{1}{\sqrt{6}}\langle 0\,0|\right)\left(\frac{1}{\sqrt{3}}|2\,0\rangle - \frac{1}{\sqrt{6}}|0\,0\rangle\right) = \frac{1}{3}+\frac{1}{6} = \frac{1}{2}$

Quindi

$$\langle\Psi|x^2|\Psi\rangle = \frac{1}{2}\underbrace{\langle\psi_1|x^2|\psi_1\rangle + \frac{1}{2}\langle\psi_2|x^2|\psi_2\rangle}_{\text{Valori medi solo spaziali (oscillatore armonico)}}$$

Dato che $x = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}\,(a + a^{+})$ [NOTA: oscillatore di massa $\mu = \frac{m}{2}$]

$$\langle \psi_1 | x^2 | \psi_1 \rangle = |\, x |1\rangle |^2$$

$$= \frac{\hbar}{2\mu\omega} \,|\,(a+a^{+})|1\rangle|^2$$

$$(a+a^{+})|1\rangle = |0\rangle + \sqrt{2}\,|2\rangle$$

$$\langle \psi_1 | x^2 | \psi_1 \rangle = \frac{\hbar}{2\mu\omega}\,(1+2) = \frac{3}{2}\frac{\hbar}{\mu\omega}$$

$$\langle \psi_2 | x^2 | \psi_2 \rangle = |\, x|2\rangle|^2 = \frac{\hbar}{2\mu\omega}\,|\,(a+a^{+})|2\rangle|^2$$

$$(a+a^{+})|2\rangle = \sqrt{2}\,|1\rangle + \sqrt{3}\,|3\rangle$$

$$\langle \psi_2 | x^2 | \psi_2 \rangle = \frac{\hbar}{2\mu\omega}\,(2+3) = \frac{5}{2}\frac{\hbar}{\mu\omega}$$

Quindi

$$\langle \Psi | x^2 | \Psi \rangle = \frac{3}{4}\frac{\hbar}{\mu\omega} + \frac{5}{4}\frac{\hbar}{\mu\omega} = \frac{2\hbar}{\mu\omega}$$

Esercizio 2

$$H_0 = H_1 + H_2 \,, \quad H_1 = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \,, \quad H_2 = A\bar{L}\cdot\bar{S}$$

La Hamiltoniana H_1 è invariante per rotazioni e non dipende dallo spin. Quindi $[H_1, \vec{L}] = [H_1, \bar{S}] = [H_1, \bar{J}] = 0$

Quindi dobbiamo solo considerare H_2.

H_2 è uno scalare e quindi commuta con $\bar{J}$: $[H_2, \bar{J}]$

Non commuta invece con $\vec{L}$ o $\bar{S}$.

$$[H_2, L_i] = A[\bar{L}\cdot\bar{S}, L_i] = A\sum_j [L_j S_j, L_i] =$$
$$= A\sum_j [L_j, L_i] S_j = iA\hbar \sum_{jk} \epsilon_{jik} L_k S_j$$
$$= iA\hbar \sum_{jk} \epsilon_{ikj} L_k S_j = iA\hbar (\bar{L}\times\bar{S})_i$$

$$[H_2, S_i) = A[L\cdot S, S_i] = A\sum_j [L_j S_j, S_i]$$
$$= A\sum_j L_j [S_j, S_i] = iA\hbar \sum_{jk} \epsilon_{jik} L_j S_k$$
$$= -iA\hbar \sum_{jk} \epsilon_{ijk} L_j S_k = -iA\hbar (\bar{L}\times\bar{S})_i$$

$$[(A\times B)_i = \sum_{jk} \epsilon_{ijk} A_j B_k]$$

Concludiamo:

$$\left.\begin{aligned}
&[H_0, \bar{J}] = 0 \\
&[H_0, \vec{L}] = iA\hbar\, \bar{L}\times\bar{S} \\
&[H_0, \bar{S}] = -iA\hbar\, \bar{L}\times\bar{S}
\end{aligned}\right\}$$

CHECK: se facciamo la somma viene zero.

b) Per $A=0$ riotteniamo lo spettro dell'idrogeno

$$E_n = -\frac{E_I}{n^2}$$ dove E_I è la quantità data nel testo, $n \geq 1$ intero

Per calcolare il contributo di $A\bar{L}\cdot\bar{S}$ lo riscriviamo come

$$A\bar{L}\cdot\bar{S} = \frac{A}{2}(J^2 - L^2 - S^2)$$

Quindi per uno stato con dato j, ℓ abbiamo un contributo

$$A/2\, \hbar^2 \left(j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{15}{4} \right)$$

Effettuiamo il calcolo esplicito per stati con $E < -2\,eV$
Dato che $A\hbar^2 \ll 1\,eV$, ci basta considerare il termine coulombiano

$$n=1 \qquad E = -E_I = -13.6\ eV$$

$$n=2 \qquad E = -\frac{E_I}{4} = -\frac{13.6}{4}\,eV \approx -3.4\ eV$$

$$n=3 \qquad E = -\frac{E_I}{9} = -\frac{13.6}{9}\,eV > -2\,eV$$

Quindi dobbiamo considerare solo $n=1$, $n=2$.

<u>$n=1$</u> : Abbiamo $l=0$, quindi, $j=s=\frac{3}{2}$. H_2 non dà contributi

$E = -E_I$ autofunzioni $\psi_{100}(\vec{r})\,|s_z\rangle$
(nlm)

Degenerazione : 4 (s_z assume i val $-\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$)

<u>$n=2$</u> Abbiamo $l=0$. Come prima H_2 non dà contributi e

$E = -E_I/4$ autofunzioni $\psi_{200}(\vec{r})\,|s_z\rangle$

Degenerazione 4

Abbiamo anche $l=1$. Dobbiamo fare la somma $(l=1)\oplus(s=3/2) \rightarrow \begin{cases} j = 5/2, \\ j = 3/2 \\ j = 1/2 \end{cases}$

$j = 5/2$

$$E = -E_I/4 + \frac{A}{2}\hbar^2\left(\frac{35}{4} - 2 - \frac{15}{4}\right) = -\frac{E_I}{4} + \frac{3}{2}A\hbar^2$$

base $|2\ 1\ \tfrac{3}{2}\ \tfrac{5}{2}\ j_z\rangle$ deg. : 6

$\uparrow\ \uparrow\ \uparrow\ \uparrow$
$n\ \ l\ \ s\ \ j$

$j = 3/2$

$$E = -\frac{\varepsilon_I}{4} + \frac{A}{2}\hbar^2\left(\frac{15}{4} - 2 - \frac{15}{4}\right) = -\frac{\varepsilon_I}{4} - A\hbar^2$$

base $\underset{n\ \ \ell\ \ s\ \ j}{\left| 2\ 1\ \tfrac{3}{2}\ \tfrac{3}{2}\ j_z \right\rangle}$ deg: 4

$j = 1/2$

$$E = -\frac{\varepsilon_I}{4} + \frac{A\hbar^2}{2}\left(\frac{3}{4} - 2 - \frac{15}{4}\right) = -\frac{\varepsilon_I}{4} - \frac{5}{2}A\hbar^2$$

base $\left| 2\ 1\ \tfrac{3}{2}\ \tfrac{1}{2}\ j_z \right\rangle$ deg: 2

c

Lo stato di energia più bassa ha degenerazione 4. Una base è $\underbrace{\underset{n\ \ell\ m}{|1\ 0\ 0\rangle}}_{\text{funzione spaziale}}|s_z\rangle$

Dato che V_z non dipende dallo spin la matrice della perturbazione ha la forma

$$\begin{pmatrix} \bar{V}_z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{V}_z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{V}_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \bar{V}_z \end{pmatrix} \quad \text{con} \quad \bar{V}_z = \underbrace{\langle 100 | V_z | 100 \rangle}_{\text{media spaziale}}$$

Quindi abbiamo $\Delta E = \bar{V}_z$ per tutti gli stati.
La degenerazione non viene rimossa.
Rimane da calcolare $\bar{V}_z$.

$$\bar{V}_z = \int r^2 dr\, d\Omega\, (R_{00} Y_0^0)^* V_z (R_{00} Y_0^0) \qquad \left[Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \right]$$

$$= \frac{1}{4\pi} \int dr\, r^2 d\Omega\, a_0^{-3}\, 4\, e^{-2r/a_0}\, \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 \cos^2\theta$$

$$= \frac{1}{2\pi a_0^3}\, m\omega^2 \int_0^\infty dr\, r^4 e^{-2r/a_0} \int_{-1}^{1} d\cos\theta \cos^2\theta \int_0^{2\pi} d\varphi$$

$$= \frac{1}{2\pi a_0^3}\, m\omega^2 \left[\left(\frac{a_0}{2}\right)^5 4!\right]\left(2\cdot\frac{1}{3}\right)\cdot 2\pi = \frac{1}{2} m\omega^2 a_0^2$$

d) Si tratta del livello con stati $|2\ 1\ \frac{3}{2}\ \frac{1}{2}\ J_z\rangle$
E' importante capire quale sia l'espressione esplicita di questo livello
Si parte dal livello $n=2$ $l=1$ che ha autofunzioni

$$R_{21}(r)\, Y_1^m(\theta,\varphi)\,|s_z\rangle$$

Quindi si ~~man~~ cambia base: al posto di $Y_1^m(\theta,\varphi)|s_z\rangle$ [autostati di $L_z, S_z\rangle$ si usano delle combinazioni lineari che sono autofunzioni di J^2, J_z. Quindi esplicitando la dipendenza da r i due stati della base sono

$$R_{21}(r)\, \underbrace{|\overset{l}{1}\ \overset{s}{\tfrac{3}{2}}\ \overset{J}{\tfrac{1}{2}}\ J_z\rangle}_{\text{è una combinazione di armoniche sferiche} \times |s_z\rangle}$$

Quindi

$$\langle 2\ 1\ \tfrac{3}{2}\ \tfrac{1}{2}\ J_z|V_r|2\ 1\ \tfrac{3}{2}\ \tfrac{1}{2}\ J_z'\rangle$$

$$= \int d^3r\, r^2 R_{21}(r)^2 V_r \cdot \underbrace{\langle 1\ \tfrac{3}{2}\ \tfrac{1}{2}\ J_z|1\ \tfrac{3}{2}\ \tfrac{1}{2}\ J_z'\rangle}_{\substack{=1 \text{ se } J_z=J_z' \\ =0 \text{ se } J_z\neq J_z'}}$$

Quindi la matrice della perturbazione è

$$\begin{pmatrix} \bar{V}_r & 0 \\ 0 & \bar{V}_r \end{pmatrix} \qquad \bar{V}_r = \int d^3r\, r^2 R_{21}(r)^2 V_r$$

Quindi $\Delta E = \bar{V}_r$ per tutti gli stati
La degenerazione non viene rimossa

$$\Delta E = \int_0^\infty dr\, r^2 R_{21}(r) V_r$$

$$= \int dr\, r^2 \frac{1}{(2a_0)^3} \frac{r^2}{3a_0^2} e^{-r/a_0} \frac{1}{2} m\omega^2 r^2$$

$$= \frac{1}{48 a_0^5} m\omega^2 \int_0^\infty dr\, r^6 e^{-r/a_0}$$

$$= m\omega^2 a_0^2 \frac{6!}{48} = 15 m\omega^2 a_0^2$$

e)
Vi sono orbite non limitate solo per H_0 ed H_2.
In questi due casi vi sono autofunzioni non normalizzabili.
Per $H = H_0 + V_r$ tutte le orbite sono limitate: Quindi tutte le autofunzioni sono $L^2(\mathbb{R}^3)$. Quindi tutte le autofunzioni non normalizzabili
<u>NON</u> esistono autofunzioni non normalizzabili