

Soluzioni degli esercizi del foglio n.3 – a.a. 2013-4

11.

Autovalori ed autovettori di H_0 soddisfano le equazioni (per evitare confusione con gli operatori di creazione a , indichiamo con b e c gli indici interi che contano autovalori ed autovettori di H_0):

$$H_0 |E_b^0\rangle = E_b^0 |E_b^0\rangle, \quad E_b^0 = \hbar\omega \left(b + \frac{1}{2} \right), \quad (b = 0, 1, 2, \dots).$$

Ricordato che $q = (a + a^\dagger)/\sqrt{2}$ e $N = a^\dagger a$, con $[a, a^\dagger] = 1$ e $[N, a] = -a$, potremo scrivere:

$$W = \frac{\sigma\hbar\omega}{2\sqrt{2}} \left[a^3 + (a^\dagger)^3 + 3(N+1)a + 3N a^\dagger \right]$$

Ricordato poi che $a^\dagger |E_b^0\rangle = \sqrt{b+1} |E_{b+1}^0\rangle$ e $a |E_b^0\rangle = \sqrt{b} |E_{b-1}^0\rangle$, in corrispondenza con il ket $|E_b^0\rangle$ la perturbazione ha quattro elementi di matrice non nulli:

$$\begin{aligned} \langle E_{b+3}^0 | W | E_b^0 \rangle &= \frac{\sigma\hbar\omega}{2\sqrt{2}} \sqrt{(b+3)(b+2)(b+1)} & (E_{b+3}^0 - E_b^0 = 3\hbar\omega) \\ \langle E_{b-3}^0 | W | E_b^0 \rangle &= \frac{\sigma\hbar\omega}{2\sqrt{2}} \sqrt{b(b-1)(b-2)} & (E_{b-3}^0 - E_b^0 = -3\hbar\omega) \\ \langle E_{b+1}^0 | W | E_b^0 \rangle &= \frac{\sigma\hbar\omega}{2\sqrt{2}} 3(b+1)\sqrt{b+1} & (E_{b+1}^0 - E_b^0 = \hbar\omega) \\ \langle E_{b-1}^0 | W | E_b^0 \rangle &= \frac{\sigma\hbar\omega}{2\sqrt{2}} 3b\sqrt{b} & (E_{b-1}^0 - E_b^0 = -\hbar\omega) \end{aligned}$$

Applicando allora le formule generali per le correzioni al primo ed al secondo ordine all'autovalore E_b^0 e la correzione al primo ordine all'autovettore $|E_b^0\rangle$ troviamo:

$$\epsilon_1 = \langle E_b^0 | W | E_b^0 \rangle = 0$$

$$\epsilon_2 = \sum_{c \neq b} \frac{-1}{E_c^0 - E_b^0} |\langle E_c^0 | W | E_b^0 \rangle|^2 = -\frac{\sigma^2 \hbar \omega}{8} (11 + 30b + 30b^2) = -\sigma^2 \hbar \omega \left[\frac{15}{4} \left(b + \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{7}{16} \right]$$

$$\begin{aligned} |1\rangle &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(-\frac{\sqrt{(b+3)(b+2)(b+1)}}{3} |E_{b+3}^0\rangle + \frac{\sqrt{b(b-1)(b-2)}}{3} |E_{b-3}^0\rangle \right. \\ &\quad \left. -3(b+1)\sqrt{b+1} |E_{b+1}^0\rangle + 3b\sqrt{b} |E_{b-1}^0\rangle \right) \end{aligned}$$

12.

(a) Gli autovalori esatti dell'Hamiltoniano H si trovano risolvendo l'equazione

$$0 = \begin{vmatrix} V_0(1-\lambda) - E & 0 & a \\ 0 & V_0 - E & V_0\lambda \\ 0 & V_0\lambda & 2V_0 - E \end{vmatrix} = [V_0(1-\lambda) - E][(V_0 - E)(2V_0 - E) - \lambda^2 V_0^2],$$

che ammette le soluzioni

$$E_I = V_0(1-\lambda), \quad E_{II} = V_0 \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{1+4\lambda^2} \right), \quad E_{III} = V_0 \left(\frac{3}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{1+4\lambda^2} \right).$$

(b) Gli autovalori di H_0 sono V_0 , con degenerazione 2 ed autospazio associato agli autovettori di base $|I^{(0)}\rangle$ e $|II^{(0)}\rangle$, e $2V_0$, che è non degenera ed associato all'autovettore $|III^{(0)}\rangle$.

Gli unici elementi di matrice di V non nulli, tra autovettori di H_0 della base ortonormale assegnata, sono:

$$\langle I^{(0)}|V|I^{(0)}\rangle = -V_0, \quad \langle II^{(0)}|V|III^{(0)}\rangle = \langle III^{(0)}|V|II^{(0)}\rangle = V_0,$$

Per calcolare le correzioni fino al second'ordine all'autovalore non degenera, $E_{III}^{(0)} = 2V_0$, basta applicare le formule della teoria delle perturbazioni non degenera. Posto $E_{III} = E_{III}^{(0)} + \lambda \Delta_{III}^{(1)} + \lambda^2 \Delta_{III}^{(2)} + \mathcal{O}(\lambda^3)$, le formule ricavate a lezione forniscono:

$$\Delta_{III}^{(1)} = \langle III^{(0)}|V|III^{(0)}\rangle = 0, \quad \Delta_{III}^{(2)} = \sum_{k \neq III} \frac{|\langle k^{(0)}|V|III^{(0)}\rangle|^2}{E_{III}^0 - E_k^0} = V_0.$$

Per calcolare invece le correzioni fino al prim'ordine all'autovalore degenera $E_I^{(0)} = E_{II}^{(0)} = V_0$, bisogna applicare le formule della teoria delle perturbazioni degenera. Secondo quanto discusso a lezione, dobbiamo diagonalizzare la perturbazione V nel corrispondente autospazio, che è quello associato alla base $\{|I^{(0)}\rangle, |II^{(0)}\rangle\}$. Fortunatamente, la perturbazione V è già diagonale nella base assegnata, per cui, al primo ordine perturbativo, otteniamo:

$$\Delta_I^{(1)} = \langle I^{(0)}|V|I^{(0)}\rangle = -V_0, \quad \Delta_{II}^{(1)} = \langle II^{(0)}|V|II^{(0)}\rangle = 0.$$

Riassumendo, troviamo:

$$E_I = V_0[1 - \lambda + \mathcal{O}(\lambda^2)], \quad E_{II} = V_0[1 + \mathcal{O}(\lambda^2)], \quad E_{III} = V_0[2 + \lambda^2 + \mathcal{O}(\lambda^3)].$$

(c) Espandendo gli autovalori esatti ricavati in (a) fino all'ordine λ^2 , si ottiene:

$$E_I = V_0(1-\lambda), \quad E_{II} = V_0[1 - \lambda^2 + \mathcal{O}(\lambda^3)], \quad E_{III} = V_0[2 + \lambda^2 + \mathcal{O}(\lambda^3)],$$

che è in accordo, entro le approssimazioni fatte, con il risultato del punto (b).

13.

$$\langle H_{kin} \rangle = \langle \psi_0 | \frac{\vec{p}^2}{2m} | \psi_0 \rangle = \int d^3r \psi_0^*(r) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \right) \psi_0(r)$$

Ricordando che, in coordinate polari sferiche, $\vec{\nabla}^2 = (1/r^2)(d/dr)[r^2(d/dr)]$ e $d^3r = r^2 dr d\Omega$:

$$\begin{aligned} \langle H_{kin} \rangle &= -\frac{4\pi\hbar^2}{2m} \frac{Z^3}{\pi a_0^3} \int dr r^2 e^{-\frac{Zr}{a_0}} \left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} e^{-\frac{Zr}{a_0}} \right) \right] \\ &= -\frac{4\pi\hbar^2}{2m} \frac{Z^3}{\pi a_0^3} \int dr \left(-\frac{2Zr}{a_0} + \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} \right) e^{-\frac{2Zr}{a_0}} \\ &= -\frac{2\hbar^2 Z^3}{m a_0^3} \left(-\frac{a_0}{2Z} + \frac{a_0}{8Z} \times 2! \right) = -\frac{2\hbar^2 Z^3}{m a_0^3} \left(-\frac{a_0}{4Z} \right) \\ &= \frac{\hbar^2 Z^2}{2m a_0^2} = Z^2 \frac{\hbar^2}{2m a_0^2} = Z^2 \text{ Ry} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle H_{pot} \rangle &= \langle \psi_0 | -\frac{Ze^2}{r} | \psi_0 \rangle = \int d^3r \psi_0^*(r) \left(-\frac{Ze^2}{r} \right) \psi_0(r) \\ &= -Ze^2 4\pi \frac{Z^3}{\pi a_0^3} \int dr r^2 \frac{1}{r} e^{-\frac{2Zr}{a_0}} \\ &= -\frac{4Z^4 e^2}{a_0^3} \int dr r e^{-\frac{2Zr}{a_0}} \\ &= -\frac{4Z^4 e^2}{a_0^3} \left(\frac{a_0}{2Z} \right)^2 = -\frac{Z^2 e^2}{a_0} \\ &= -\frac{Z^2 m e^4}{\hbar^2} = -2 Z^2 \left(\frac{m e^4}{2\hbar^2} \right) = -2 Z^2 \text{ Ry} \end{aligned}$$

14.

$$\begin{aligned} \langle V_{ee} \rangle &= \langle \psi_0 | \frac{e^2}{r_{12}} | \psi_0 \rangle = \int \int d^3r_1 d^3r_2 \psi_0^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \left(\frac{e^2}{r_{12}} \right) \psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \\ &= \left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3} \right)^2 e^2 \int \int d^3r_1 d^3r_2 e^{-\frac{2Zr_1}{a_0}} \frac{1}{r_{12}} e^{-\frac{2Zr_2}{a_0}} \end{aligned}$$

Per prima cosa effettuiamo il cambiamento di variabili

$$\vec{s}_1 = \frac{2Z}{a_0} \vec{r}_1, \quad \vec{s}_2 = \frac{2Z}{a_0} \vec{r}_2.$$

$$\begin{aligned} \langle V_{ee} \rangle &= \left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3} \right)^2 e^2 \int \int d^3s_1 d^3s_2 \left(\frac{a_0}{2Z} \right)^3 \left(\frac{a_0}{2Z} \right)^3 e^{-s_1} \frac{1}{s_{12}} \frac{2Z}{a_0} e^{-s_2} \\ &= \frac{Ze^2}{32\pi^2 a_0} \int \int d^3s_1 d^3s_2 e^{-s_1} \frac{1}{s_{12}} e^{-s_2} \end{aligned}$$

Tornando a chiamare r_1 e r_2 le variabili di integrazione, l'integrale da da calcolare si può pensare come l'energia di interazione delle densità di carica $\rho(r_1) = e^{-r_1}$ e $\rho(r_2) = e^{-r_2}$, interagenti mediante il potenziale coulombiano. Possiamo allora calcolare dapprima il potenziale dovuto alla prima distribuzione di carica, integrando su d^3r_1 , per poi calcolare l'energia della seconda distribuzione di carica nel campo della prima. La prima parte del calcolo si può affrontare nel modo seguente. Consideriamo un guscio sferico di raggio r_1 e spessore infinitesimo dr_1 . La carica totale contenuta in questo guscio sarà data da $4\pi r_1^2 e^{-r_1} dr_1$. Il potenziale dovuto a questa distribuzione di carica nel punto generico r sarà

$$4\pi r_1^2 e^{-r_1} dr_1 \frac{1}{r_1} \quad \text{se } r \leq r_1$$

$$4\pi r_1^2 e^{-r_1} dr_1 \frac{1}{r} \quad \text{se } r \geq r_1$$

In altre parole, il potenziale è costante dentro il guscio e la carica si comporta come se fosse localizzata nell'origine per i punti al di fuori del guscio. Pertanto, il potenziale dovuto alla completa distribuzione di carica si può ottenere integrando sui contributi di tutti i possibili gusci:

$$\begin{aligned} \Phi(r) &= \int_0^r 4\pi r_1^2 e^{-r_1} dr_1 \frac{1}{r} + \int_r^\infty 4\pi r_1^2 e^{-r_1} dr_1 \frac{1}{r_1} \\ &= \frac{4\pi}{r} \int_0^r dr_1 r_1^2 e^{-r_1} + 4\pi \int_r^\infty dr_1 r_1 e^{-r_1} \\ &= \frac{4\pi}{r} (-r^2 e^{-r} - 2re^{-r} - 2e^{-r} + 2) + 4\pi (re^{-r} + e^{-r}) \\ &= \frac{4\pi}{r} (2 - e^{-r}(r + 2)) \end{aligned}$$

Allora

$$\begin{aligned} \langle V_{ee} \rangle &= \frac{Ze^2}{32\pi^2 a_0} \int d^3r_2 \Phi(r_2) e^{-r_2} \\ &= \frac{Ze^2}{32\pi^2 a_0} 4\pi \int_0^\infty dr_2 r_2^2 \frac{4\pi}{r_2} (2 - e^{-r_2}(r_2 + 2)) e^{-r_2} \\ &= \frac{Ze^2}{2a_0} \int_0^\infty dr_2 [2r_2 e^{-r_2} - e^{-2r_2}(r_2^2 + 2r_2)] \\ &= \frac{Ze^2}{2a_0} \left(2 - \frac{1}{4} - \frac{1}{2} \right) = \frac{5Ze^2}{8a_0} = \frac{5Z}{4} \left(\frac{me^4}{2\hbar^2} \right) = \frac{5}{4} Z \text{ Ry} \end{aligned}$$

L'applicazione del metodo perturbativo al prim'ordine fornisce allora:

$$E_{per} = E_0 + \Delta E_1 = \left(-8 + \frac{5}{2} \right) \text{ Ry} = -\frac{11}{2} \text{ Ry} \simeq -75 \text{ eV}$$

È una buona approssimazione ma più lontana dal valore sperimentale, $E_{exp} \simeq -79 \text{ eV}$, di quanto si è ottenuto a lezione con il metodo variazionale, $E_{var} \simeq -77.5 \text{ eV}$.

15.

La norma quadra della funzione d'onda di prova vale

$$\langle \psi_\alpha | \psi_\alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-2\alpha x^2}$$

Allora

$$\begin{aligned} \langle \psi_\alpha | H | \psi_\alpha \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\alpha x^2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) e^{-\alpha x^2} \\ &= \left(\frac{\hbar^2}{2m} \alpha + \frac{1}{8} m \omega^2 \frac{1}{\alpha} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-2\alpha x^2} \end{aligned}$$

e dunque

$$Q(\alpha) \equiv \frac{\langle \psi_\alpha | H | \psi_\alpha \rangle}{\langle \psi_\alpha | \psi_\alpha \rangle} = \frac{\hbar^2}{2m} \alpha + \frac{1}{8} m \omega^2 \frac{1}{\alpha}$$

Applicando il metodo variazionale, troviamo che la derivata prima di $Q(\alpha)$ si annulla per

$$\alpha = \alpha_0 = \frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar}$$

che sostituito fornisce

$$\bar{E} = Q(\alpha_0) = \frac{1}{2} \hbar \omega$$

ovvero il risultato esatto sia per l'energia dello stato fondamentale E_0 che per la relativa autofunzione $\psi_0(x)$.