



Università degli Studi di Napoli "Federico II"

SCUOLA POLITECNICA E DELLE SCIENZE DI BASE AREA DIDATTICA DI SCIENZE
MATEMATICHE, FISICHE E NATURALI
Corso di Laurea Triennale in Fisica

TESI DI LAUREA TRIENNALE

Rottura Spontanea della simmetria

Candidato:

Roberta Calabrese

Matricola N85000813

Relatore:

Prof. Gennaro Miele

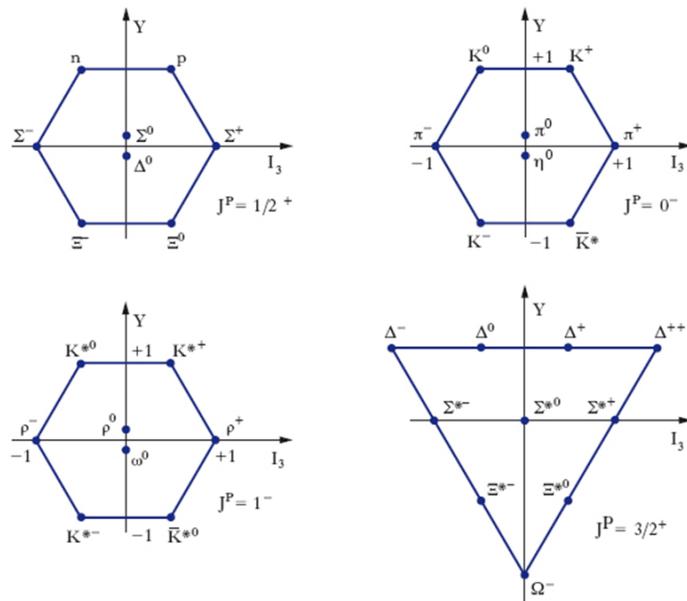
Indice

1	Introduzione	2
1.1	Trattazione del caso unidimensionale	4
2	Rottura della simmetria: spontanea ed esplicita	6
3	Molecole	9
3.1	Doppia buca infinita	9
3.2	Doppia buca finita	10
3.3	Molecola di ammoniaca	12
3.4	Molecola di etilene	14
3.5	Localizzazione degli elettroni	16
4	Oscillatore bidimensionale	17
5	Ferromagnetismo e antiferromagnetismo	20
6	Potenziale a sombrero	24
7	Conclusioni	26

Capitolo 1

Introduzione

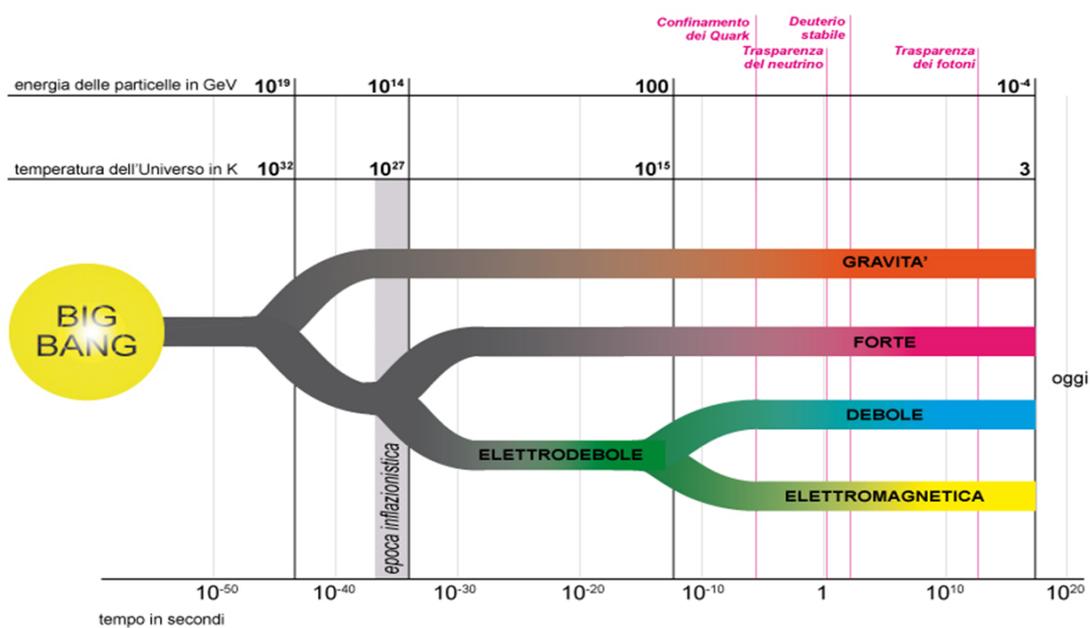
Le simmetrie giocano un ruolo fondamentale in fisica: grazie ad esse in genere è possibile semplificare la risoluzione di un dato problema fisico tramite l'utilizzo di alcuni teoremi come quello di Noether che prevede che ad ogni simmetria sia associata una legge di conservazione. Tramite alcune simmetrie è stato possibile arrivare al modello a quark ad esempio. Le evidenze sperimentali dell'esistenza di una struttura interna degli adroni furono osservate intorno alla metà del 1900. Uno dei primi modelli che cercava di spiegarla fu formulato da Fermi e Yang nel 1949; tale modello si basa sul gruppo unitario speciale 2, $SU(2)$. Tale modello fu sorpassato nel momento in cui furono scoperte le particelle strane per le quali fu introdotto il numero quantico della stranezza; la somma di numero barionico e stranezza è detta ipercarica forte ($Y=S+B$). Per spiegare la composizione degli adroni fu introdotto da Gell-Mann e Ne'eman separatamente un modello che si basa sul gruppo unitario speciale $SU(3)$. I barioni sono composti da tre quark mentre i mesoni sono composti da un quark e un antiquark. Se si rappresentano in un grafico i barioni e i mesoni aventi lo stesso spin-parità, si ottengono strutture di questo tipo:



La cosa particolare è che le particelle in esame hanno masse differenti, quindi hanno masse diffe-

renti i vari quark; questo è un esempio di rottura della simmetria.

La rottura spontanea della simmetria (SSB) è un fenomeno per il quale abbiamo che lo stato fondamentale (detto stato di vuoto) del sistema non presenta la stessa simmetria dell'hamiltoniana o della lagrangiana del sistema stesso; in generale lo stato fondamentale di sistemi in cui abbiamo la SSB è degenere ed è possibile passare da uno stato fondamentale ad un altro applicando ad uno di questi l'operatore associato alla simmetria in questione. Tale fenomeno è usato in molti contesti teorici, anche se spesso è oggetto di controversie. Gioca un ruolo fondamentale in vari ambiti della fisica quali la fisica classica, la fisica della materia, la fisica quantistica, la fisica statistica e la fisica della materia. Ad esempio, si ritiene che sia stato il fenomeno della rottura spontanea della simmetria a far separare le quattro forze fondamentali mano mano che l'universo si raffreddava [1]



Uno degli esempi classici più semplice è il seguente: supponiamo di avere un contenitore sferico in cui vi è un liquido, se lasciamo solidificare tale liquido, abbiamo che gli atomi si allineeranno in una struttura cristallina. All'inizio avevamo un sistema invariante per rotazione, poiché ruotando il sistema non avevamo alcuna variazione, ma quando l'abbiamo fatto solidificare abbiamo perso l'invarianza rotazionale poiché gli atomi saranno in un particolare sito e la rotazione porterà ad un "nuovo" cristallo.

In meccanica quantistica non relativistica la rottura spontanea della simmetria non è permessa a causa dell'effetto tunnel poiché se si pone una particella in uno dei ground state, si ottiene che dopo un tempo finito la particella può occuparli tutti in maniera equiprobabile restaurando la simmetria presente nell'hamiltoniana. Può accadere però che il tempo necessario affinché si verifichi tale condizione sia estremamente elevato (paragonabile all'età dell'universo o molto maggiore dei tempi dell'esperimento), in questi casi si può parlare di rottura spontanea della simmetria anche se in maniera approssimata.

1.1 Trattazione del caso unidimensionale

Poiché la maggior parte degli esempi che verranno presentati sono unidimensionali conviene mostrare alcune caratteristiche della rottura spontanea della simmetria in meccanica quantistica non relativistica. Una delle condizioni necessarie affinché si verifichi tale fenomeno è la degenerazione dello stato fondamentale, quindi dobbiamo capire in quali casi si verifica.

Teorema. *Supponiamo di avere un sistema quantistico descritto dall'hamiltoniana $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$, con $x \in [a, b]$ ($a, b \in \mathbb{R} \cup \{-\infty; +\infty\}$). Ogni livello energetico E_k appartenente allo spettro discreto di \hat{H} risulta non degenerare [11].*

Dimostrazione. Siano ψ_1 e ψ_2 due autostati relativi ad uno stesso autovalore E_k , cioè

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_1 + V(x) \psi_1 = E_k \psi_1 \quad (1.1)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_2 + V(x) \psi_2 = E_k \psi_2 \quad (1.2)$$

quindi

$$\frac{\psi_1''}{\psi_1} = \frac{\psi_2''}{\psi_2} \quad (1.3)$$

quindi

$$\psi_1'' \psi_2 - \psi_1 \psi_2'' = 0 \quad (1.4)$$

Possiamo riscrivere tale relazione nel seguente modo

$$(\psi_1' \psi_2)' - \psi_1' \psi_2' - (\psi_1 \psi_2')' + \psi_1' \psi_2' = (\psi_1' \psi_2)' - (\psi_1 \psi_2') \quad (1.5)$$

se integriamo ambo i membri otteniamo

$$\psi_1' \psi_2 - \psi_1 \psi_2' = \text{cost} \quad (1.6)$$

Ora dobbiamo analizzare due casi. Se $(a, b) = (-\infty; +\infty)$, allora tale differenza tende a zero per x che tende a più infinito perciò la costante deve essere nulla. Se invece l'intervallo è limitato allora possiamo valutare il valore della differenza agli estremi dell'intervallo, ma in quei punti le due funzioni si annullano, perciò la costante è nulla anche in questo caso. Se integriamo tale differenza, otteniamo che

$$\psi_1 = \lambda \psi_2 \quad (1.7)$$

con $\lambda \in \mathbb{C}$. Quindi le due funzioni d'onda sono proporzionali e rappresentano lo stesso stato. \square

Ora vogliamo studiare le caratteristiche che possono avere le autofunzioni del sistema che presenta tale fenomeno; per questo motivo supponiamo ora di avere un'hamiltoniana che presenta una simmetria rappresentata dall'operatore \hat{U} , abbiamo che

$$[\hat{H}, \hat{U}] = 0 \quad (1.8)$$

e supponiamo di avere due autovettori normalizzati di tale hamiltoniana con le seguenti proprietà:

- $\langle A|B \rangle = 0$;
- $\hat{H}|A\rangle = a|A\rangle$, cioè $|A\rangle$ è un autovettore dell'hamiltoniana;

- $\hat{U}|A\rangle = |B\rangle$.

Se $|A\rangle$ è autovettore dello stato fondamentale, è facile dimostrare che anche $|B\rangle$ lo è. Infatti, se applichiamo U ad ambo i membri della seconda condizione, otteniamo

$$\hat{U}\hat{H}|A\rangle = \hat{H}\hat{U}|A\rangle = \hat{H}|B\rangle = a\hat{U}|A\rangle = a|B\rangle \quad (1.9)$$

Quindi stiamo trattando un sistema nel quale è presente il fenomeno della rottura spontanea della simmetria.

La prima condizione assicura che la probabilità di avere effetto tunnel sia nulla, ma non è detto che risolvendo il sistema si ottengano due vettori ortonormali; per tale motivo supponiamo ora di avere due autovettori che soddisfano solo la seconda e la terza condizione e proviamo a costruire due autovettori che soddisfino la prima condizione. Consideriamo due autovettori ottenuti combinando linearmente gli autovettori di partenza nel seguente modo

$$|+\rangle = C(|A\rangle + |B\rangle) \quad (1.10)$$

$$|-\rangle = D(|A\rangle - |B\rangle) \quad (1.11)$$

dove C e D sono due costanti di normalizzazione. Si può facilmente vedere che:

- $\hat{U}|+\rangle = |+\rangle$;
- $\hat{U}|-\rangle = |-\rangle$
- $\langle +|-\rangle = 0$ poiché nel caso unidimensionale è sempre possibile scegliere una fase relativa tra $|A\rangle$ e $|B\rangle$ in modo tale che $\langle A|B\rangle$ sia reale.

Con questi autovettori costruiamo

$$|L\rangle = \frac{1}{2}(|+\rangle + |-\rangle) \quad (1.12)$$

$$|R\rangle = \frac{1}{2}(|+\rangle - |-\rangle) \quad (1.13)$$

Tali autovettori soddisfano tutte e tre le condizioni iniziali. Quindi abbiamo ottenuto che è sempre possibile trovare due autovettori dello stato fondamentale tali che risulti nulla la probabilità di tunnel tra i due stati quando si ha il fenomeno di rottura spontanea di simmetria [13].

Capitolo 2

Rottura della simmetria: spontanea ed esplicita

Due dei principali meccanismi per i quali abbiamo una perdita della simmetria sono la rottura spontanea della simmetria e la rottura esplicita della simmetria; tali meccanismi differiscono per il fatto che mentre nel primo caso abbiamo un'hamiltoniana perfettamente simmetrica, nel secondo caso abbiamo che il comportamento asimmetrico è dovuto alla presenza di termini asimmetrici nelle equazioni del sistema; in generale tali termini sono piccoli quindi ci si aspetterebbe un comportamento approssimativamente simmetrico del sistema. Per mostrare in maniera più chiara tale differenza verrà presentato un esempio per ciascuno dei meccanismi.

Un esempio di rottura esplicita della simmetria è l'effetto Zeeman in cui vi è lo splitting delle linee spettrali a causa della presenza di un termine dovuto ad un campo magnetico esterno che perturba l'hamiltoniana dell'atomo coinvolto. Tratteremo tale esempio nel caso più semplice: consideriamo un atomo di idrogeno immerso in un campo magnetico uniforme $\mathbf{B}=(0;0;B)$; l'elettrone di tale atomo vede una perturbazione del tipo

$$\hat{H}' = \frac{e}{2m} (\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}) \cdot \mathbf{B} \quad (2.1)$$

Mentre l'hamiltoniana dell'atomo di idrogeno è invariante per rotazioni, il termine perturbativo non lo è.

Valutiamo la correzione dell'energia al primo ordine

$$E_{n,l,j,m_j}^{(1)} = \langle nlm_j | \hat{H}' | nlm_j \rangle = \frac{e}{2m} \mathbf{B} \cdot \langle nlm_j | \hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}} | nlm_j \rangle \quad (2.2)$$

Per calcolare tale valor medio dobbiamo scrivere in maniera diversa $\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}$; abbiamo che

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}} \quad (2.3)$$

Quindi

$$\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{J}} + \hat{\mathbf{S}} \quad (2.4)$$

Il momento angolare totale è costante quindi $\hat{\mathbf{L}}$ ed $\hat{\mathbf{S}}$ hanno una precessione molto rapida intorno a tale vettore fisso [8]. Quindi abbiamo che il valor medio di $\hat{\mathbf{S}}$ è uguale alla sua proiezione lungo $\hat{\mathbf{J}}$; per tale motivo possiamo scrivere che:

$$\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle = \left\langle \frac{\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{J}}}{\hat{j}^2} \right\rangle \langle \hat{\mathbf{J}} \rangle \quad (2.5)$$

Ma sappiamo che $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{J}} - \hat{\mathbf{S}}$, per questo motivo possiamo scrivere

$$\hat{L}^2 = \hat{J}^2 + \hat{S}^2 - 2\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{J}} \quad (2.6)$$

Quindi

$$\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{J}} = \frac{1}{2}(\hat{J}^2 + \hat{S}^2 - \hat{L}^2) \quad (2.7)$$

Ora possiamo valutare

$$\langle \hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}} \rangle = \left\langle \frac{\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{J}}}{\hat{J}^2} \right\rangle \langle \hat{\mathbf{J}} \rangle \quad (2.8)$$

Quindi

$$\langle \hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}} \rangle = \left[1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + \frac{3}{4}}{2j(j+1)} \right] \langle \hat{\mathbf{J}} \rangle \quad (2.9)$$

Il termine fra le parentesi quadre è noto come fattore di Landè [8]. Quindi abbiamo che la correzione al primo ordine perturbativo è

$$E_{n,l,j,m_j}^{(1)} = B \frac{e\hbar}{2m} \left[1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + \frac{3}{4}}{2j(j+1)} \right] m_j \quad (2.10)$$

Vediamo cosa succede al livello fondamentale che nel caso di atomo imperturbato è doppiamente degenere; in tale stato abbiamo che $j=1/2, l=0, m_j = \pm 1/2$, quindi

$$E_{1,0,\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}}^{(1)} = \pm B \frac{e\hbar}{2m} \quad (2.11)$$

Abbiamo uno stato fondamentale che non è invariante per rotazione.

Uno degli esempi di rottura spontanea della simmetria simile a quello appena mostrato è il seguente: supponiamo di avere un elettrone vincolato a muoversi in un'unica direzione e soggetto ad un potenziale oscillante e ad un campo magnetico stazionario

$$\hat{\mathbb{H}} = \hat{H}_0 \mathbb{1} - \frac{e\hbar}{2m} \mathbf{B} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \quad (2.12)$$

in cui abbiamo che

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega_0^2}{2} x^2 - \epsilon_0 \quad (2.13)$$

$$B_x = B_y = 0 \quad (2.14)$$

$$B_z = -\frac{2m}{e\hbar} \left(\frac{m\omega_\Delta^2}{2} x^2 - \epsilon_\Delta \right) \quad (2.15)$$

in cui i parametri in gioco sono presi in maniera tale che esistano ω_+ e ω_- per i quali siano vere le seguenti relazioni

$$\frac{\omega_+}{\omega_-} \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{Q} \quad (2.16)$$

$$\begin{aligned} \omega_0 &= \sqrt{\frac{\omega_+^2 + \omega_-^2}{2}} & \omega_\Delta &= \sqrt{\frac{\omega_+^2 - \omega_-^2}{2}} \\ \epsilon_0 &= \hbar \frac{\omega_+ + \omega_-}{2} & \epsilon_\Delta &= \hbar \frac{\omega_+ - \omega_-}{2} \end{aligned} \quad (2.17)$$

Quindi abbiamo che l'hamiltoniana ha a seguente forma

$$\hat{\mathbb{H}} = \begin{pmatrix} \hat{H}_+ & 0 \\ 0 & \hat{H}_- \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

con

$$\hat{H}_\pm = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega_\pm^2}{2} x^2 - \frac{\hbar\omega_\pm}{2} \quad (2.19)$$

in definitiva abbiamo una coppia di oscillatori armonici con una diversa pulsazione, ma con lo stesso stato fondamentale.

Il problema agli autovalori da risolvere è il seguente:

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (2.20)$$

quindi vanno risolti i seguenti problemi agli autovalori

$$\begin{cases} \hat{H}_+\psi_+ = E\psi_+ \\ \hat{H}_-\psi_- = E\psi_- \end{cases} \quad (2.21)$$

quindi gli autovalori del sistema sono

$$\hat{H}\psi_{\pm,n} = \hbar\omega_{\pm}n\psi_{\pm,n} \quad (2.22)$$

con

$$\psi_{+,n} = \begin{pmatrix} \psi_{+,n} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

$$\psi_{-,n} = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{-,n} \end{pmatrix} \quad (2.24)$$

dove $\psi_{+,n}$ e $\psi_{-,n}$ sono rispettivamente gli autostati di H_+ e H_- . Abbiamo che, poiché il rapporto delle pulsazioni non è razionale, c'è degenerazione solo nello stato fondamentale.

L'hamiltoniana di tale sistema commuta con la matrice $\hat{\sigma}_3$ di Pauli

$$[\hat{H}, \hat{\sigma}_3] = 0 \quad (2.25)$$

$$\hat{\sigma}_3\psi_{\pm,n} = \pm\psi_{\pm,n} \quad (2.26)$$

quindi abbiamo una simmetria interna del sistema e che gli autospinori sono classificati in base a questa. Per questi motivi in tale modello c'è la rottura spontanea della simmetria solo nello stato fondamentale. La coppia di autostati non sovrapposti che "rompe la simmetria" è

$$\psi_{\mathbf{R}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} \quad (2.27)$$

$$\psi_{\mathbf{L}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \psi_+ \\ -\psi_- \end{pmatrix} \quad (2.28)$$

I due esempi presentati sono simili in quanto si ha la perdita della simmetria a causa di un campo magnetico stazionario, infatti se in questo caso "spegnessimo" il campo magnetico, avremmo la rimozione della degenerazione.

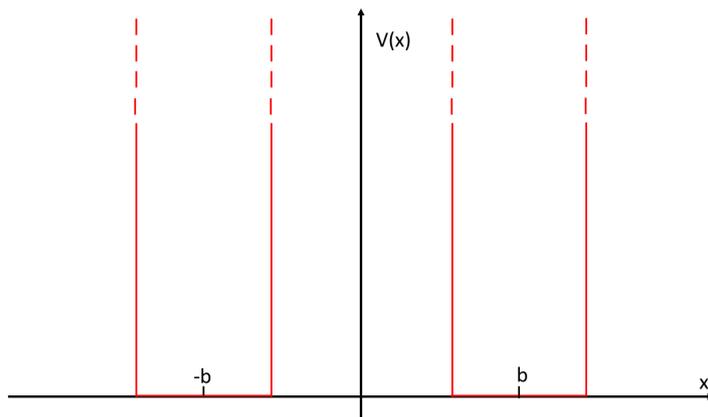
Capitolo 3

Molecole

Al fine di studiare il comportamento di alcune molecole è utile occuparsi della doppia buca di potenziale in quanto il potenziale di alcune molecole è approssimabile ad esso. Tale potenziale è simmetrico rispetto all'asse y e presenta una barriera di potenziale in nell'intervallo $x \in [-b + \frac{a}{2}; b - \frac{a}{2}]$. Studieremo due casi : il caso in cui la barriera di potenziale è finita e il caso in cui non lo è. Solo il caso in cui la barriera è infinita può presentare il fenomeno della rottura spontanea della simmetria in quanto è caratterizzato da un potenziale discontinuo, quindi il ground state risulterà degenere. Il caso in cui la barriera è finita invece non può che presentare tale fenomeno in maniera approssimata in quanto la particella soggetta a tale potenziale può passare da una buca all'altra in un tempo finito più o meno lungo.

3.1 Doppia buca infinita

Studiamo prima il caso della doppia buca di potenziale infinita, in questo caso la $V(x)$ è costituita da due buche infinite centrate in $x = \pm b$ e di larghezza a .



I valori dell'energia concessi in ciascuna delle due buche sono

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \quad (3.1)$$

con $k_n = \frac{n\pi}{a}$. Ciascun valore dell'energia è doppiamente degenero, infatti ogni E_n corrisponde alle seguenti due autofunzioni

$$\psi_1^n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi(b+\frac{a}{2}-x)}{a} & x \in (b - \frac{a}{2}; b + \frac{a}{2}) \\ 0 & \text{altrove} \end{cases} \quad (3.2)$$

$$\psi_2^n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi(b-\frac{a}{2}+x)}{a} & x \in (-b - \frac{a}{2}; -b + \frac{a}{2}) \\ 0 & \text{altrove} \end{cases} \quad (3.3)$$

Quando il sistema è nello stato $|\psi_1^n\rangle$, la particella è nella buca di destra; nello stato $|\psi_2^n\rangle$, la particella è nella buca di sinistra. Abbiamo un'hamiltoniana simmetrica e delle autofunzioni degeneri che non rispettano la simmetria dell'hamiltoniana del sistema quindi in tale sistema abbiamo il fenomeno della rottura spontanea della simmetria.

La degenerazione dei livelli è possibile poiché il problema è definito come unione di due intervalli distinti, tale condizione fa sì che il teorema enunciato all'inizio non sia valido. Il teorema non può essere applicato a casi costituiti dall'unione di intervalli perché si avrebbe che sono consentiti all'interno di ogni intervallo delle costanti di proporzionalità tra le due funzioni, ma non si potrebbe affermare che le due funzioni sono proporzionali per ogni x .

Oltre alla base di autovettori costituita da questi due set di autovettori possiamo considerarne una costituita da un set di autovettori pari ed un set di autovettori dispari (la coppia spezza simmetria)

$$\psi_a^n(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1^n(x) - \psi_2^n(x)) \quad (3.4)$$

$$\psi_s^n(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1^n(x) + \psi_2^n(x)) \quad (3.5)$$

È utile scrivere gli autovalori della doppia buca di potenziale infinita in questo modo poiché sarà più facile confrontarli con quelli della doppia buca di potenziale finita.

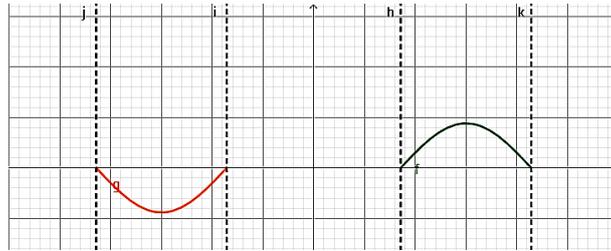


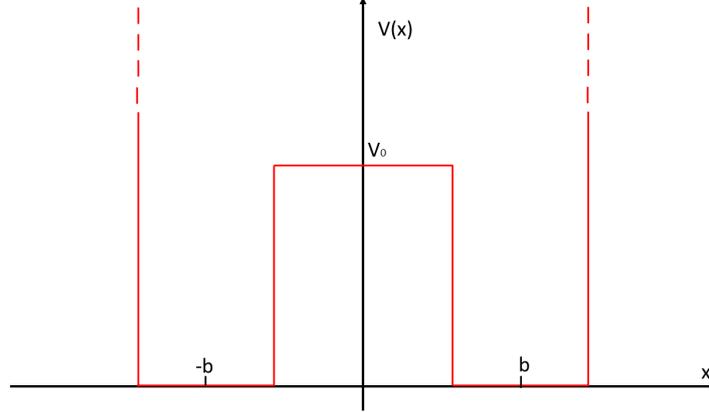
Figura 3.1: in rosso abbiamo la funzione ψ_2^1 , mentre in verde la funzione ψ_1^1

3.2 Doppia buca finita

Proviamo a risolvere gli autovalori dell'hamiltoniana di un sistema soggetto ad un potenziale del tipo

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & x \leq -b - \frac{a}{2} \\ 0 & -b - \frac{a}{2} \leq x \leq -b + \frac{a}{2} \\ V_0 & -b + \frac{a}{2} \leq x \leq b - \frac{a}{2} \\ 0 & b - \frac{a}{2} \leq x \leq b + \frac{a}{2} \\ +\infty & x \geq b + \frac{a}{2} \end{cases} \quad (3.6)$$

per valori dell'energia minori di V_0 .



Per risolvere il problema dobbiamo studiare i tre intervalli centrali e imporre che la funzione d'onda si annulli per $x = \pm(b + \frac{a}{2})$ e che sia continua e derivabile in $x = \pm(b - \frac{a}{2})$. Le funzioni d'onda nelle due zone in cui il potenziale è nullo sono

$$\chi(x) = A \sin(k(b + \frac{a}{2} - x)) \quad x \in (b - \frac{a}{2}; b + \frac{a}{2}) \quad (3.7)$$

$$\chi(x) = A' \sin(k(b + \frac{a}{2} + x)) \quad x \in (-b - \frac{a}{2}; -b + \frac{a}{2}) \quad (3.8)$$

Dove k è legato all'energia del livello energetico dalla relazione

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (3.9)$$

Ovviamente il k di questa relazione non è lo stesso che abbiamo ottenuto nella DWP infinite poiché abbiamo delle nuove condizioni di raccordo da imporre alla funzione d'onda: mentre prima dovevamo imporre che la funzione si annullasse nei punti $b \pm \frac{a}{2}$ e $-b \pm \frac{a}{2}$, ora richiediamo che la funzione si annulli solo in $b + \frac{a}{2}$ e $-b - \frac{a}{2}$ e che sia continua e che anche la sua derivata prima lo sia in $b - \frac{a}{2}$ e $-b + \frac{a}{2}$.

Poiché il potenziale è pari possiamo cercare autofunzioni di \mathbf{H} , χ_s e χ_a , che siano pari e dispari.

Nel caso di χ_s abbiamo $A_s = A'_s$, mentre nel caso di χ_a abbiamo $A_a = -A'_a$.

Nell'intervallo centrale dobbiamo risolvere la seguente equazione differenziale

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \chi_{s,a}}{dx^2} + V_0 \chi_{s,a} = E_{s,a} \chi_{s,a} \quad (3.10)$$

Quindi nell'intervallo $-(b - \frac{a}{2}) < x < (b - \frac{a}{2})$, la funzione d'onda è

$$\chi_{s,a} = C_{s,a}^+ e^{q_{s,a} x} + C_{s,a}^- e^{-q_{s,a} x} \quad (3.11)$$

dove q_s e q_a sono definiti in termini di V_0 e dell'energia del livello energetico:

$$q_{s,a} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E_{s,a})} \quad (3.12)$$

Poiché stiamo considerando una funzione pari ed una funzione dispari, i coefficienti della combinazione lineare devono essere rispettivamente uguali ed uguali ed opposti; quindi possiamo scrivere che per $-(b - \frac{a}{2}) < x < (b - \frac{a}{2})$ la funzione d'onda ha la seguente forma

$$\chi_s = B_s \cosh(q_s x) \quad (3.13)$$

$$\chi_a = B_a \sinh(q_a x) \quad (3.14)$$

A questo punto non ci manca che imporre la continuità dell'autofunzione e della sua derivata in $x = \pm(b - \frac{a}{2})$. Facciamo il calcolo per χ_s

$$\begin{cases} A_s \sin(k_s a) = B_s \cosh[q_s (b - \frac{a}{2})] \\ -A_s \cos(k_s a) = B_s q_s \sinh[q_s (b - \frac{a}{2})] \end{cases} \quad (3.15)$$

Se dividiamo la prima equazione per la seconda, otteniamo che

$$\tan(k_s a) = -\frac{k_s}{q_s} \coth[q_s (b - \frac{a}{2})] \quad (3.16)$$

In maniera analoga otteniamo la seguente condizione per la funzione dispari

$$\tan(k_a a) = -\frac{k_a}{q_a} \tanh[q_a (b - \frac{a}{2})] \quad (3.17)$$

Tali equazioni sono equazioni trascendentali che possono essere risolte graficamente. Da tali equazioni otteniamo un certo numero di radici $k_s^1, k_s^2, \dots, k_a^1, k_a^2, \dots$. Per il teorema che abbiamo enunciato all'inizio tali stati non possono essere degeneri, quindi $E_s^n \neq E_a^n$. Al crescere di V_0 abbiamo che E_s^n e E_a^n tendono al valore ottenuto per la DWPs infinita. Si può vedere che $E_s^n < E_a^n$

Proviamo a vedere cosa succede se il sistema è descritto dalla seguente funzione d'onda al tempo $t=0$

$$|\psi(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\chi_s^1\rangle + |\chi_a^1\rangle] \quad (3.18)$$

Quindi applichiamo l'evolvente temporale a $|\psi\rangle$

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{-i\frac{E_s^1 t}{\hbar}} |\chi_s^1\rangle + e^{-i\frac{E_a^1 t}{\hbar}} |\chi_a^1\rangle] \quad (3.19)$$

Ora mettiamo in evidenza $e^{-i\frac{E_s^1 + E_a^1}{2\hbar} t}$

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\frac{E_s^1 + E_a^1}{2\hbar} t} [e^{i\frac{E_a^1 - E_s^1}{2\hbar} t} |\chi_s^1\rangle + e^{-i\frac{E_a^1 - E_s^1}{2\hbar} t} |\chi_a^1\rangle] \quad (3.20)$$

Se poniamo

$$\Omega = \frac{E_a^1 - E_s^1}{\hbar}, \quad (3.21)$$

Abbiamo che

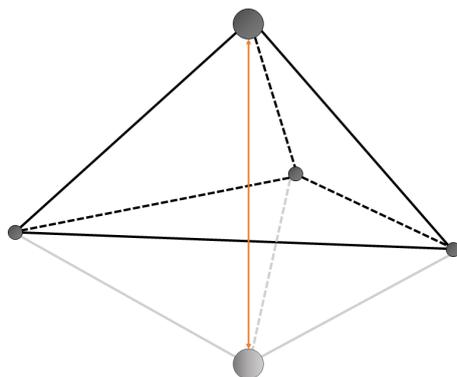
$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\frac{E_s^1 + E_a^1}{2\hbar} t} [e^{i\frac{\Omega t}{2}} |\chi_s^1\rangle + e^{-i\frac{\Omega t}{2}} |\chi_a^1\rangle] \quad (3.22)$$

All'inizio avevamo che la particella era solo nella buca di destra, ma al tempo $t = \frac{\pi}{\Omega}$ si è spostata, per effetto tunnel, nella buca di sinistra. La nostra particella fittizia si muove da una buca ad un'altra con frequenza una pari ad $\frac{\Omega}{2\pi}$, detta frequenza di inversione. Tale frequenza non ha un analogo classico. Abbiamo ottenuto quindi che la molecola di ammoniaca si inverte con una frequenza caratteristica che è proporzionale alla differenza di energia tra i due livelli energetici in questione.

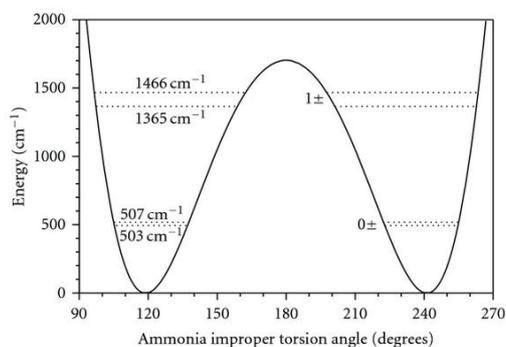
3.3 Molecola di ammoniaca

La molecola di ammoniaca è un tetraedro in cui c'è un atomo di azoto carico negativamente e tre idrogeni carichi positivamente; in tal modo la molecola avrebbe un momento di dipolo, ma nessun

nucleo in uno stato stazionario ha un momento di dipolo. Se l'ammoniaca avesse stato iniziale non simmetrico, non vi rimarrebbe per molto. A causa dell'effetto tunnel, l'azoto può oltrepassare il triangolo formato dagli idrogeni ed arrivare dall'altro lato, capovolgendo la piramide. Un vero stato stazionario per l'atomo di azoto può essere visto come la sovrapposizione uguale delle due piramidi non simmetriche.



Per studiare tale molecola useremo un modello semplificato: poiché l'atomo di azoto è molto più pesante dell'idrogeno, abbiamo che questo rimane approssimativamente fermo; gli atomi di idrogeno formano un triangolo equilatero rigido il cui asse passa sull'atomo di idrogeno. L'energia potenziale del sistema è solo una funzione della distanza tra il piano contenente il triangolo equilatero e l'atomo di azoto. La forma del potenziale è la seguente



[7]

La simmetria del sistema è legata al fatto che il potenziale sia simmetrico. Tale potenziale è caratterizzato da due minimi assoluti ed un massimo relativo in $x=0$; tale massimo è dovuto al fatto che l'atomo di azoto si trova nel piano dei tre idrogeni che lo respingono. Per $|x|>b$ abbiamo che il potenziale torna a crescere e ciò corrisponde al fatto che il legame chimico fa sì che la molecola rimanga coesa. Con tale modello abbiamo ridotto il problema ad una particella che è soggetta al potenziale $V(x)$ ed è vincolata a muoversi solo lungo x ; La massa di tale particella è pari a

$$m = \frac{3m_H m_N}{3m_H + m_N} \quad (3.23)$$

Sperimentalmente si ottiene che $E_a^1 - E_s^1 \simeq 10^{-4} eV$ [6], quindi abbiamo un tempo di inversione pari a

$$t \simeq 10^{-11} s \quad (3.24)$$

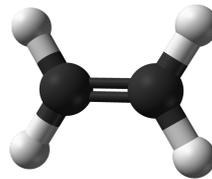
Quindi il fenomeno di inversione della molecola di ammoniaca è facilmente osservabile. Se passiamo alla molecola di arsina AsH_3 , avente una struttura simile ma una massa maggiore, otteniamo che $E_a^1 - E_s^1 \simeq 10^{-22} eV$ [6], quindi abbiamo un tempo di inversione pari a

$$t \simeq 4 \cdot 10^7 s \quad (3.25)$$

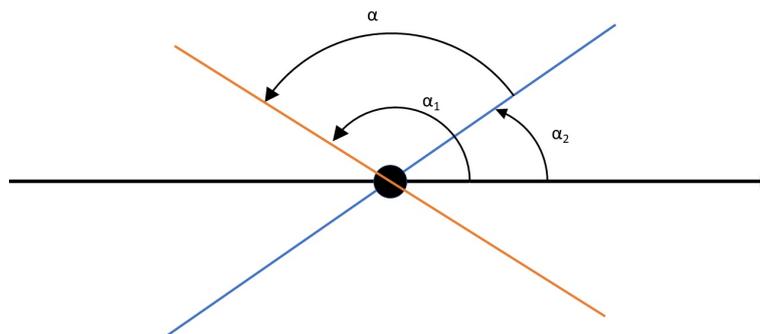
In questo caso abbiamo un tempo di inversione maggiore di un anno. Da ciò possiamo dedurre che esistono molecole che possono essere considerate stabili in uno stato per tempi di osservazione molto minori del tempo di inversione, quindi è come se avessimo una rottura spontanea di simmetria.

3.4 Molecola di etilene

Un'altra molecola il cui potenziale è approssimabile a quello della doppia buca di potenziale è la molecola di etilene, C_2H_4 . Tale molecola è planare e ha la seguente forma: Se consideriamo la due



rette congiungenti i due idrogeni legati allo stesso atomo di carbonio, abbiamo che queste possono formare un angolo α .



Quindi

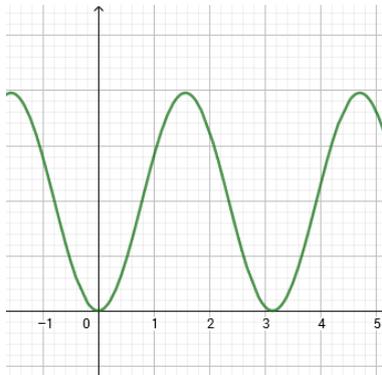
$$\alpha = \alpha_1 - \alpha_2 \quad (3.26)$$

Si può facilmente immaginare che il potenziale della molecola vari con α ; poiché la molecola è planare, abbiamo una configurazione di equilibrio ogni volta che l'angolo è un multiplo intero di

π . Una buona approssimazione del potenziale in funzione di tale angolo è

$$V(\alpha) = \frac{V_0}{2}(1 - \cos 2\alpha) [10] \quad (3.27)$$

Anche questo potenziale può essere approssimato alla doppia buca di potenziale.



Dal punto di vista classico, le equazioni che governano il moto dei due gruppi CH_2 sono

$$\begin{cases} I \frac{d^2 \alpha_1}{dt^2} = -\frac{\partial}{\partial \alpha_1} V(\alpha_1 - \alpha_2) = -\frac{d}{d\alpha} V(\alpha) \\ \frac{d^2 \alpha_2}{dt^2} = -\frac{\partial}{\partial \alpha_2} V(\alpha_1 - \alpha_2) = +\frac{d}{d\alpha} V(\alpha) \end{cases} \quad (3.28)$$

Dove I è il momento di inerzia del gruppo CH_2 . Se sommiamo e sottraiamo tali equazioni, otteniamo:

$$\begin{cases} I \frac{d^2 (\alpha_1 + \alpha_2)}{dt^2} = 0 \\ \frac{d^2 \alpha}{dt^2} = -2 \frac{d}{d\alpha} V(\alpha) \end{cases} \quad (3.29)$$

Quindi abbiamo che la somma dei due angoli non varia nel tempo. Espandiamo in serie di Taylor $V(\alpha)$ intorno a zero

$$V(\alpha) \simeq \frac{V_0}{2}(1 - 1 - 2\alpha^2 + \dots) \simeq V_0 \alpha^2 \quad (3.30)$$

Quindi dal punto di vista classico possiamo trattare tale problema come un oscillatore armonico per valori dell'energia sufficientemente piccoli. Quindi abbiamo che

$$\frac{d^2 \alpha}{dt^2} + \frac{4V_0}{I} \alpha = 0 \quad (3.31)$$

Quindi

$$\alpha = \alpha_0 \sin(\omega t + \phi_0) \quad (3.32)$$

Dove

$$\omega = 2\sqrt{\frac{V_0}{I}} \simeq 825 \text{ cm}^{-1} [10] \quad (3.33)$$

Ora occupiamoci del problema dal punto di vista quantistico; se non ci fosse l'effetto tunnel o fosse trascurabile, avremmo una serie di livelli energetici doppiamente degeneri di energia

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (3.34)$$

Ma a causa dell'effetto tunnel la degenerazione viene rimossa e si ottengono degli autostati pari e dispari il cui gap energetico aumenta all'aumentare di n ; quindi abbiamo che gli stati con energia via via più vicina a V_0 passano da una buca ad un'altra con una maggiore frequenza. Come nel caso precedente il gap risulta sempre più piccolo mano mano che si considerano molecole con la stessa struttura, ma composte da atomi più pesanti.

3.5 Localizzazione degli elettroni

Con tale approssimazione è possibile ottenere informazioni sulla localizzazione o delocalizzazione degli elettroni in un dato materiale. Volendo fare un calcolo approssimativo, possiamo supporre che il potenziale del materiale in esame sia approssimabile ad una serie di buche di Coulomb che possono essere trattate come un insieme di buche di potenziale separate da una barriera di altezza E_0 , l'energia di legame, e larga all'incirca R , la distanza tra due nuclei successivi [6]. Abbiamo che

$$\Delta E \simeq E_0 e^{-R\sqrt{2mE_0}/\hbar} \quad (3.35)$$

Abbiamo tre casi da considerare

- Gli elettroni di valenza: Nel caso delle molecole la distanza R è dell'ordine di pochi Angstrom e l'energia di legame è dell'ordine di qualche eV, quindi abbiamo che il tempo caratteristico di oscillazione è dell'ordine di $10^{-14} - 10^{-15}$ s di conseguenza lo stato stazionario sarà caratterizzato dalla delocalizzazione dell'elettrone.
- Gli elettroni delle shell interne: Negli atomi più pesanti gli elettroni sono legati al nucleo con un'energia di legame che è dell'ordine di 10^4 eV (infatti per studiarne le caratteristiche si usano i raggi X); per questo motivo si ottiene un tempo di oscillazione dell'ordine dei 10^{68} s, quindi possiamo considerare tali elettroni legati ad un particolare atomo.
- Gli elettroni di un gas: la differenza col primo caso sta nel fatto che la distanza tra due molecole o atomi di un gas può essere dell'ordine delle decine di Armstrong, mentre l'energia di legame delle shell esterne è dello stesso ordine del primo caso; a causa di questa distanza abbiamo che il tempo di oscillazione aumenta fino ad essere dell'ordine di qualche millisecondo.

Capitolo 4

Oscillatore bidimensionale

In questo capitolo mostreremo un esempio di rottura spontanea di simmetria bidimensionale. Consideriamo una particella vincolata a muoversi in un piano soggetta ad un campo magnetico uniforme ed ad un potenziale oscillante

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}(x^2 + y^2) - \frac{Bq}{2m}\hat{L}_z \quad (4.1)$$

e supponiamo che il campo magnetico sia stato preso in maniera tale da avere

$$\omega = -\frac{qB}{2m} \quad (4.2)$$

Se chiamiamo

$$\hat{H}_o = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}(x^2 + y^2) \quad (4.3)$$

Possiamo riscrivere \hat{L}_z ed \hat{H}_o nel seguente modo

$$\hat{H}_o = \hbar\omega(\hat{A}_+^\dagger\hat{A}_+ + \hat{A}_-^\dagger\hat{A}_- + 1) \quad (4.4)$$

$$\hat{L}_z = \hbar(\hat{A}_+^\dagger\hat{A}_+ - \hat{A}_-^\dagger\hat{A}_-) \quad (4.5)$$

con

$$\hat{A}_+^\dagger = \frac{\hat{a}_x^+ + i\hat{a}_y^+}{\sqrt{2}}; \quad \hat{A}_+ = \frac{\hat{a}_x^+ - i\hat{a}_y^+}{\sqrt{2}}$$

$$\hat{a}_x^+ = \frac{\hat{Q}_x - i\hat{P}_x}{\sqrt{2}}; \quad \hat{a}_y^+ = \frac{\hat{Q}_y - i\hat{P}_y}{\sqrt{2}}$$

$$\hat{Q}_x = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}; \quad \hat{Q}_y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{y}; \quad \hat{P}_x = \sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}}\hat{p}_x; \quad \hat{P}_y = \sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}}\hat{p}_y;$$

In questo modo possiamo vedere che l'hamiltoniana del sistema è

$$\hat{H} = \hbar\omega(2\hat{A}_+^\dagger\hat{A}_+ + 1) \quad (4.6)$$

Gli elementi della base di autovettori comuni ad \hat{L}_z e ad \hat{H}_o possono essere scritti nel seguente modo

$$|N_+, N_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_+!}} \frac{1}{\sqrt{N_-!}} (\hat{A}_+^\dagger)^{N_+} (\hat{A}_-^\dagger)^{N_-} |0, 0\rangle \quad (4.7)$$

dove

$$\langle x, y | 0, 0 \rangle = \sqrt{\frac{\pi \hbar}{m\omega}} e^{-\frac{Q_x^2 + Q_y^2}{2}} \quad (4.8)$$

Ciascun elemento di tale base è anche autovettore dell'hamiltoniana del sistema e l'autovalore corrispondente a ciascuno di questi è

$$E_{N_+, N_-} = \hbar\omega(2N_+ + 1) \quad (4.9)$$

Otteniamo che gli autovalori dell'energia dipendono solo dal numero quantico N_+ quindi abbiamo che ogni livello energetico è infinitamente degenere.

Salta subito all'occhio che l'hamiltoniana in questione commuti con l'operatore \hat{L}_z , infatti

$$[\hat{H}; \hat{L}_z] = [\hat{H}_0; \hat{L}_z] + [\hat{L}_z; \hat{z}] = 0 \quad (4.10)$$

tale operatore è il generatore di rotazioni piane, quindi l'hamiltoniana è invariante per rotazioni piane definite dall'operatore $e^{-i\frac{\hat{L}_z\theta}{\hbar}}$.

Se consideriamo la restrizione di tale operatore al sottospazio generato dai vettori $|0, N_- \rangle$, abbiamo che la sua rappresentazione matriciale è

$$e^{-i\frac{\hat{L}_z\theta}{\hbar}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & e^{i\theta} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & e^{2i\theta} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

Se facciamo agire tale operatore sul generico vettore di tale spazio

$$|\psi\rangle = \sum_{N_-=0}^{+\infty} C_{N_-} |0, N_- \rangle \quad (4.12)$$

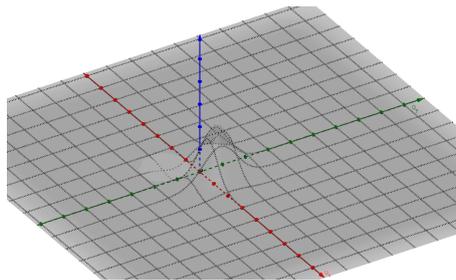
abbiamo che:

$$e^{-i\frac{\hat{L}_z\theta}{\hbar}} |\psi\rangle = \sum_{N_-=0}^{+\infty} C_{N_-} e^{iN_-\theta} |0, N_- \rangle \quad (4.13)$$

Poiché in generale non è possibile mettere in evidenza un unico fattore di fase in maniera tale da ottenere il vettore di partenza, abbiamo che gli elementi del ground state non presentano la stessa simmetria dell'hamiltoniana; per questo motivo il sistema in esame presenta il fenomeno della rottura spontanea della simmetria. Sono invarianti per rotazione solo gli elementi della base. Studiamo il caso in cui

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, 0\rangle + |0, 1\rangle) \quad (4.14)$$

Vogliamo studiare il modulo quadro di tale funzione d'onda.



$$\psi_{0,1} = \hat{A}_-^+ \psi_{0,0} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi \hbar}{m\omega}} \left[\left(Q_x - \frac{\partial}{\partial Q_x} \right) e^{-\frac{Q_x^2 + Q_y^2}{2}} - i \left(Q_y - \frac{\partial}{\partial Q_y} \right) e^{-\frac{Q_x^2 + Q_y^2}{2}} \right] \quad (4.15)$$

$$\psi_{0,1} = \sqrt{\frac{\pi \hbar}{m\omega}} (Q_x - iQ_y) e^{-\frac{Q_x^2 + Q_y^2}{2}} \quad (4.16)$$

Quindi abbiamo

$$\psi(Q_x, Q_y) = \sqrt{\frac{\pi \hbar}{m\omega}} (Q_x - iQ_y + 1) e^{-\frac{Q_x^2 + Q_y^2}{2}} \quad (4.17)$$

perciò risulta

$$|\psi(Q_x; Q_y)|^2 = \frac{\pi \hbar}{m\omega} e^{-(Q_x^2 + Q_y^2)} (Q_x^2 + Q_y^2 + 2Q_x + 2Q_y + 1) \quad (4.18)$$

Tale funzione ha un massimo per $Q_x = Q_y = \frac{1}{\sqrt{2}}$, dunque la funzione non è invariante per rotazione.

Capitolo 5

Ferromagnetismo e antiferromagnetismo

Abbiamo la rottura di spontanea di simmetria al livello dello spin nel caso del ferromagnetismo e dell'antiferromagnetismo. I materiali ferromagnetici si magnetizzano intensamente sotto l'azione di un campo magnetico esterno e possono mantenere la magnetizzazione anche quando l'effetto del campo esterno cessa, mentre i materiali antiferromagnetici non presentano proprietà magnetiche, benché si abbia un alto grado di polarizzazione. Entrambi i materiali perdono tale proprietà e si comportano come paramagneti se la temperatura del materiale è superiore ad una certa soglia detta temperatura di Curie per i ferromagneti e temperatura di Neel per gli antiferromagneti. Tali fenomeni sono dovuti alla particolare configurazione degli spin nello stato fondamentale del sistema: il ground state dei ferromagneti si ha quando tutti gli spin sono paralleli, mentre quello degli antiferromagneti si ha quando tutti gli spin sono antiparalleli.

Si possono spiegare entrambe le proprietà col modello di Ising che prevede un'hamiltoniana con la seguente forma:

$$\hat{H} = -J \sum_{(j,i)} \hat{\mathbf{s}}_i \cdot \hat{\mathbf{s}}_j \quad (5.1)$$

dove la sommatoria è fatta sulle coppie di atomi vicini nel reticolo cristallino e J è maggiore di zero per i ferromagneti e minore di zero per gli antiferromagneti. Tale modello può essere spiegato in maniera molto semplice studiando la molecola di idrogeno usando l'approssimazione di Heitler e London nella quale si suppone che il contributo ionico sia completamente trascurabile; in tale approssimazione si considera quindi la seguente funzione d'onda

$$\Theta_{HL} = \frac{1}{2} (\psi_{1s}(r_{A1})\psi_{1s}(r_{B2}) \pm \psi_{1s}(r_{A2})\psi_{1s}(r_{B1})) \quad (5.2)$$

Dove r_{Ai} è la distanza tra il primo idrogeno e l'elettrone i , mentre r_{Bi} è la distanza tra il secondo idrogeno e l'elettrone i . La funzione d'onda col più ha lo spin totale $S=0$ (stato di singoletto), mentre quella col meno ha lo spin totale $S=1$ (stato di tripletto)

In tale approssimazione l'hamiltoniana del sistema in unità atomiche è

$$H = -\frac{1}{2}\nabla_{r_1}^2 - \frac{1}{2}\nabla_{r_2}^2 - \frac{1}{r_{A1}} - \frac{1}{r_{A2}} - \frac{1}{r_{B1}} - \frac{1}{r_{B2}} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{R} \quad (5.3)$$

Se valutiamo il valor medio dell'energia su tali funzioni d'onda, abbiamo che

$$\langle H \rangle = \frac{\langle \Theta_{HL} | H | \Theta_{HL} \rangle}{\langle \Theta_{HL} | \Theta_{HL} \rangle} = 2E_{1s} + \frac{1}{R} + \frac{F}{1 \pm I^2} \pm \frac{K}{1 \pm I^2} \quad (5.4)$$

Dove E_{1s} è l'energia del livello 1s dell'atomo di idrogeno, F è l'integrale di coulomb, I è l'integrale di sovrapposizione e K è l'integrale di scambio.

$$F = \int |\psi_{1s}(r_{A1})|^2 |\psi_{1s}(r_{B2})|^2 \left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{A2}} - \frac{1}{r_{B1}} \right) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \quad (5.5)$$

$$I = \int \psi_{1s}(r_{A1})^* \psi_{1s}(r_{B1}) d\mathbf{r}_1 \quad (5.6)$$

$$K = \int \psi_{1s}^*(r_{A2}) \psi_{1s}^*(r_{B1}) \left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{A2}} - \frac{1}{r_{B1}} \right) \psi_{1s}(r_{A1}) \psi_{1s}(r_{B2}) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \quad (5.7)$$

Poniamo

$$E_0 = \frac{\langle \Theta_{HL} | H | \Theta_{HL} \rangle}{\langle \Theta_{HL} | \Theta_{HL} \rangle} = 2E_{1s} + \frac{1}{R} + \frac{F}{1 \pm I^2} \quad (5.8)$$

$$\alpha = \frac{K}{1 \pm I^2} \quad (5.9)$$

Se I è sufficientemente piccolo, il valore di E_0 non dipende dall'autofunzione scelta. Possiamo scrivere:

$$\langle H \rangle - E_0 = -\frac{\alpha}{2}(1 + 4\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2) = \alpha(1 - S_T^2) \quad (5.10)$$

quindi abbiamo che il ground state è nello stato di singoletto se $\alpha < 0$ e abbiamo il fenomeno dell'antiferromagnetismo e nello stato di tripletto se $\alpha > 0$ e abbiamo il fenomeno del ferromagnetismo.

Tornando all'hamiltoniana del modello di ising, abbiamo che questa è invariante per rotazioni: se si ruotano tutti gli spin della stessa quantità, l'hamiltoniana non cambia. Dal teorema di Noether sappiamo che ad ogni simmetria è associata una quantità che si conserva, nel nostro caso la quantità in questione è lo spin totale:

$$\hat{\mathbf{S}} = \sum_j \hat{\mathbf{s}}_j \quad (5.11)$$

Ovviamente tale quantità commuta con l'hamiltoniana, infatti

$$[\hat{H}; \hat{S}_l] = \sum_{(j,i)} \sum_k [\hat{s}_{il} \hat{s}_{jl}; \hat{s}_{kl}] = \sum_{(j,i)} \sum_k [\hat{s}_{il}; \hat{s}_{kl}] \hat{s}_{jl} + \hat{s}_{il} [\hat{s}_{jl}; \hat{s}_{kl}] = 0 \quad (5.12)$$

Il generatore di rotazioni degli spin è generato dallo spin totale stesso

$$\hat{U}(\boldsymbol{\theta}) = e^{i \frac{\hat{\mathbf{S}} \cdot \boldsymbol{\theta}}{\hbar}} = \cos \frac{|\boldsymbol{\theta}|}{2} + i \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \frac{\boldsymbol{\theta}}{|\boldsymbol{\theta}|} \sin \frac{|\boldsymbol{\theta}|}{2} \quad (5.13)$$

tale operatore ruota lo spin attorno al vettore $\boldsymbol{\theta}$ di un angolo $|\boldsymbol{\theta}|$.

Occupiamoci dei ferromagneti ($J > 0$). Lo stato con tutti gli spin rivolti verso l'alto, $|\uparrow \dots \uparrow \dots \uparrow\rangle$, è autostato dell'Hamiltoniana. Per semplicità supponiamo di avere un reticolo cristallino unidimensionale composto da N atomi

$$\hat{H} |\uparrow \dots \uparrow \dots \uparrow\rangle = -JN \left(\frac{\hbar}{2} \right)^2 |\uparrow \dots \uparrow \dots \uparrow\rangle \quad (5.14)$$

Tale stato è lo stato fondamentale del sistema e in tale stato lo spin totale è pari a $\frac{N\hbar}{2}$. Non è difficile dimostrare che ci sono infinite orientazioni degli spin che fanno parte dello stato fondamentale e non rispettano la simmetria dell'Hamiltoniana. Osservando che

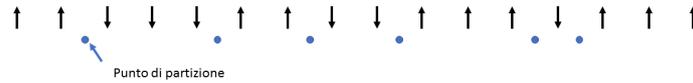
$$\hat{U}(\boldsymbol{\theta}) |\uparrow\rangle = \cos\frac{|\boldsymbol{\theta}|}{2} |\uparrow\rangle + i\sin\frac{|\boldsymbol{\theta}|}{2} \left(\frac{\theta_z}{|\boldsymbol{\theta}|} |\uparrow\rangle + \frac{\theta_x + i\theta_y}{|\boldsymbol{\theta}|} |\downarrow\rangle \right) \quad (5.15)$$

abbiamo che

$$\langle \uparrow \dots \uparrow \dots \uparrow | \hat{U}(\boldsymbol{\theta}) | \uparrow \dots \uparrow \dots \uparrow \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\cos\frac{|\boldsymbol{\theta}|}{2} + i\frac{\theta_z}{|\boldsymbol{\theta}|} \sin\frac{|\boldsymbol{\theta}|}{2} \right)^N \quad (5.16)$$

A meno che $\boldsymbol{\theta}$ non sia parallelo a z , il termine tra parentesi ha modulo minore dell'unità e va a zero per $N \rightarrow \infty$. In altre parole lo stato $\hat{U}(\boldsymbol{\theta}) |\uparrow \dots \uparrow \dots \uparrow\rangle$ è ancora autostato dell'hamiltoniana ed è ortogonale a $|\uparrow \dots \uparrow \dots \uparrow\rangle$ quindi ci sono infiniti stati fondamentali ortogonali tra loro legati tramite una rotazione.

Il problema del modello unidimensionale è che è valido solo per $T = 0$, infatti se consideriamo una temperatura maggiore di zero, gli spin possono assumere valori diversi tra loro. La separazione tra le zone aventi spin up e quelle aventi spin down è detta punto di partizione. Il numero di punti



di partizione aumenta all'aumentare della temperatura. Poiché non ci può essere più di un punto di partizione tra due spin consecutivi, possiamo trattare i punti di partizione con la statistica di Fermi-Dirac:

$$\frac{N'}{N} = \frac{1}{e^{\epsilon/T} + 1} \quad (5.17)$$

$$\frac{1}{N} [E(T) - E(0)] = \frac{\epsilon}{e^{\epsilon/T} + 1} \quad (5.18)$$

Dove ϵ è l'energia di ciascun punto di partizione ed è pari a $2J$ e abbiamo assunto che N ed N' siano molto più grandi di 1. Poiché $N'/N=0$ solo per $T=0$, gli spin non puntano tutti nella stessa direzione e il momento magnetico totale è nullo

$$\frac{M}{N} = \frac{1}{N} \sum_{r=1}^N s_r = 0 \quad (5.19)$$

Affinché il modello sia valido abbiamo bisogno che questo preveda il ferromagnetismo per temperature non nulle; per fare questo dobbiamo considerare il caso bidimensionale. In tale modello ogni atomo ha 4 vicini. Si può estendere il concetto di punto di partizione in questo caso facendo le seguenti considerazioni: abbiamo un punto di partizione ogni volta che abbiamo una coppia di spin

Capitolo 6

Potenziale a sombrero

Uno degli esempi più noti di rottura spontanea di simmetria in fisica classica è il potenziale a sombrero. Supponiamo di avere una particella che si muove sotto l'effetto di un potenziale

$$V(x) = \lambda x^4 - \mu x^2 \quad (6.1)$$

con $\lambda, \mu \geq 0$. Poiché $V(x) = V(-x)$ abbiamo che l'hamiltoniana del sistema commuta con l'operatore parità \hat{P} . Poiché la posizione di equilibrio (ognuna presa singolarmente) non possiede tale simmetria, si dice che la P-simmetria è violata dallo stato fondamentale di $V(x)$. Se il sistema è classico, abbiamo la rottura di simmetria; se il sistema è quantistico, non abbiamo la SSB poiché, a causa dell'effetto tunnel, la particella può passare da uno stato all'altro ripristinando la simmetria del sistema. Di conseguenza il potenziale a sombrero quantistico non si comporta come il potenziale a sombrero classico, ma esibisce il solito comportamento quantistico: spettro non degenere, stati classificati in base alla parità e numero di nodi che cresce al crescere dell'energia, ...

Il potenziale appena visto è di grande importanza poiché è legato al meccanismo di Higgs, il meccanismo che conferisce la massa a tutte le particelle elementari. Tale meccanismo può essere visto come la condensazione tachionica del campo scalare di Higgs. La rottura spontanea della simmetria, in accordo col teorema di Nambu-Goldstone, genera un bosone scalare (con un unico grado di libertà) privo di massa; tale bosone viene assorbito da un bosone vettore privo di massa (con due gradi di libertà) facendogli acquisire la massa (i bosoni vettori massivi hanno tre gradi di libertà, quindi il bosone scalare è come se fornisse il grado di libertà mancante del bosone vettore privo di massa).

Studiamo ora un altro tipo di potenziale a sombrero che ha una trattazione più semplice dal punto di vista quantistico:

$$V(x) = 16a^2x^6 - 12ax^2 \quad (6.2)$$

Anche in questo caso il potenziale commuta con l'operatore parità e abbiamo la rottura spontanea di simmetria solo se il sistema è classico; infatti se risolviamo il relativo problema agli autovalori

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad (6.3)$$

abbiamo che l'autofunzione relativa allo stato fondamentale è

$$\psi(x) = e^{-ax^4} \quad (6.4)$$

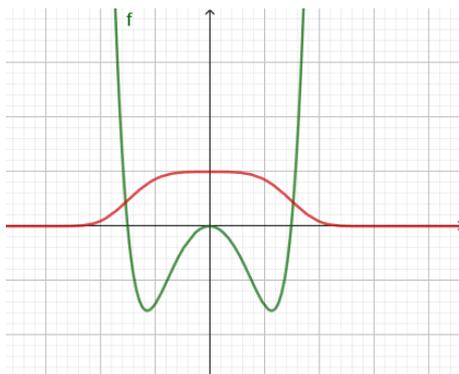


Figura 6.1: in rosso $\psi(x)$, in verde il potenziale

Tale autofunzione è priva di nodi ed ha un massimo in quella che sarebbe la posizione di equilibrio instabile: nel passare da un sistema classico ad uno quantistico, abbiamo che si presentano proprietà che non hanno un analogo classico.

Capitolo 7

Conclusioni

L'obiettivo di tale lavoro era quello di presentare il fenomeno della rottura spontanea della simmetria in casi semplici al fine di mostrarne le caratteristiche principali. Ad esempio, abbiamo visto che in tutti gli esempi unidimensionali considerati abbiamo la rottura spontanea della simmetria in maniera rigorosa solo considerando esempi estremi (infinite particelle o potenziali infiniti): questo è dovuto al fatto che dobbiamo aggirare l'effetto tunnel che fa sì che il sistema passi da uno stato ad un altro oltrepassando barriere di potenziale finite che classicamente non avrebbe potuto oltrepassare in un tempo finito più o meno lungo.

Il fenomeno in esame può essere usato per fare chiarezza riguardo alla controversia del riduzionismo; secondo tale linea di pensiero è possibile spiegare qualsiasi cosa in termini delle particelle elementari e delle loro interazioni: il comportamento di un qualsiasi oggetto macroscopico può essere visto come la diretta conseguenza della somma delle sue componenti. Ciò che si osserva sperimentalmente è che al crescere della complessità di un sistema, quindi al crescere del numero di gradi di libertà, iniziano ad emergere nuove proprietà [4]. Nell'esempio della doppia buca di potenziale finita abbiamo visto che all'aumentare della complessità della molecola il cui potenziale è approssimabile con quel modello aumenta il periodo di oscillazione da uno stato ad un altro, quindi la molecola in questione rimane stabile in uno dei due stati se tale periodo risulta grande rispetto ai tempi dell'esperimento o in alcuni casi con l'età dell'universo. Nel caso del ferromagnetismo abbiamo visto che è stato necessario considerare un sistema estremamente complesso (costituito da un numero infinito di molecole) per spiegare tale proprietà che non sarebbe spiegabile basandosi solo sulla simmetria dell'hamiltoniana in esame.

Abbiamo parlato anche del meccanismo di Higgs che è strettamente legato al teorema di Nambu-Goldstone; l'idea di tale teorema può essere vista come generata dalla teoria di Barden, Cooper e Schrieffer sulla superconduttività che è un esempio di rottura spontanea della simmetria. I superconduttori sono materiali caratterizzati da una resistenza che va a zero mano mano che ci si avvicina ad una temperatura critica che si aggira intorno ai 10-20 K; in tali materiali è possibile far fluire una corrente senza che si applichi una differenza di potenziale; virtualmente questa può continuare a scorrere in esso all'infinito senza dissipazioni. Tale teoria prevede che gli elettroni interagiscano in maniera attrattiva attraverso lo scambio di fononi (oscillazioni del reticolo cristallino): quando un elettrone libero passa vicino ad uno ione del reticolo lo mette in oscillazione; l'oscillazione dello ione fa sì che il reticolo cristallino si deformi e che ci sia un eccesso di carica positiva che attrae un

altro elettrone [5]. Si creano coppie di elettroni con stesso spin e quantità di moto opposte, dette coppie di Cooper, che si comportano come bosoni (non rispettano il principio di Pauli quindi sono meno vincolati). Al di sotto di una data temperatura tali coppie si trovano tutte in uno stesso stato nel quale non risentono di alcuna resistenza passando attraverso il reticolo.[5]. La simmetria che si “spezza” è quella di gauge U(1) dell’elettromagnetismo. Nambu in merito a tale fenomeno fece le seguenti osservazioni:

“che cosa accadrebbe se tutto l’universo fosse occupato da una sorta di materiale superconduttore, e noi ci vivessimo dentro?

Dato che non possiamo osservare il vero vuoto, lo stato fondamentale [di energia minima] di questo mezzo rappresenterebbe il vuoto effettivo. In questo caso anche le particelle che sono prive di massa... nel vuoto vero acquisterebbero una massa nel mondo reale” [5]

Un altro esempio di proprietà legate alla SSB è la superfluidità; i superfluidi sono materiali caratterizzati da una viscosità nulla, capacità termica infinita e non hanno entropia. Una delle caratteristiche principali di tale proprietà è che è molto rara e si verifica in condizioni estreme: solo due isotopi dell’elio (3He e 4He) presentano tale proprietà intorno ai 3-4 K.

Bibliografia

- [1] La rottura spontanea della simmetria. <http://scienzapertutti.lnf.infn.it/2-la-rottura-spontanea-di-simmetria>.
- [2] Riduzionismo (fisica). [https://it.wikipedia.org/wiki/Riduzionismo_\(fisica\)](https://it.wikipedia.org/wiki/Riduzionismo_(fisica)).
- [3] Spontaneous symmetry breaking. <http://hitoshi.berkeley.edu/221b/ssb.pdf>.
- [4] Philip W Anderson et al. More is different. *Science*, 177(4047):393–396, 1972.
- [5] Jim Baggot. *Il bosone di Higgs*. Adelphi.
- [6] Jean-Marc Levy-Leblond; Françoise Bahbar. *Quantics: Rudiments of quantum mechanics*. North Holland, 1990.
- [7] J Espinosa-Garcia, M Monge-Palacios, and JC Corchado. Constructing potential energy surfaces for polyatomic systems: recent progress and new problems. *Advances in Physical Chemistry*, 2012, 2012.
- [8] David J. Griffiths. *Introduzione alla meccanica quantistica*. Casa editrice Ambrosiana.
- [9] Tilley David R. ; Tilley John. *Superfluidity and superconductivity*. Adam Hilger Ltd, 1986.
- [10] Claude Cohen Tannoudji; Bernard Diu; Franck Laloe. *Quantum Mechanics*. John Wiley and sons.
- [11] L.D. Landau; E.M. Lifshitz. *Quantum Mechanics: non-relativistic theory*. Editori riuniti University Press, 2010.
- [12] Sheng-Keng Ma. *Statistical mechanics*. World scientific, 1906.
- [13] R Munoz-Vega, A García-Quiroz, Ernesto López-Chávez, and Encarnacion Salinas-Hernandez. Spontaneous symmetry breakdown in non-relativistic quantum mechanics. *American Journal of Physics*, 80(10):891–897, 2012.
- [14] Robert Eisberg; Robert Resnick. *Quantum physics of atoms, molecules, solids, nuclei, and particles*. John Wiley and sons.