Appello di Meccanica Quantistica I

Facoltà di Scienze, M.F.N., Università degli Studi di Pisa,
03 febbraio 2005 (A.A. 04/05)

Problema 1.

Una particella di massa m si muove su una retta sotto l'azione di una forza elastica di costante di richiamo κ. Al tempo $t = 0$, mentre la particella si trova nello stato fondamentale, il centro di richiamo viene *istantaneamente* spostato di un tratto x_0.

(i) Calcolare il valore medio dell'energia al tempo $t > 0$ generico;

(ii) Calcolare la probabilità che il sistema si trovi per $t > 0$ nello stato fondamentale e nel primo stato eccitato della nuova Hamiltoniana.

(iii) Calcolare le eventuali discontinuità a $t = 0$, per i valor medii di operatori di Heisenberg, x_H, p_H, $\dot{x}_H$ e $\dot{p}_H$.

Problema 2.

Si consideri l'Hamiltoniana dell'atomo di un atomo di idrogeno, contenente, oltre all'interazione Coulombiana, un'interazione spin-orbita dell'elettrone,

$$H_{S-O} = A\,\mathbf{L}\cdot\mathbf{s}_e, \tag{1}$$

e l'interazione fra lo spin dell'elettrone e lo spin del protone ($s_e = s_p = \frac{1}{2}$),

$$H_{S-S} = B\,\mathbf{s}_p\cdot\mathbf{s}_e, \tag{2}$$

con A, B costanti.

(i) Dire qual'è la degenerazione dei livelli $n = 1$e $n = 2$, tenendo conto anche dello spin dell'elettrone e del protone, quando si trascurano del tutto le interazionni H_{S-O} e H_{S-S} di cui sopra.

(ii) Trascurando, invece, solo l'interazione H_{S-S}, si classifichino i livelli di $n = 1$ e $n = 2$ dell'atomo mediante gli operatori:

$$\mathbf{L}^2, \mathbf{J}^2, \mathbf{F}^2, F_z, \qquad (\mathbf{J} = \mathbf{L}+\mathbf{s}_e, \mathbf{F} = \mathbf{J}+\mathbf{s}_p) \tag{3}$$

e si calcolino i relativi autovalori dell'energia.

(iii) Alcuni degli stati di cui al punto (ii) sono anche autostati dell'Hamiltoniana totale. Dire quali e con quali autovalori.

Soluzione

Problema 1.

(i) Il valor medio dell'energia è una costante del moto, perciò basta calcolarlo al tempo $t = 0+$: Per $t < 0$

$$H = H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\,\omega^2\, x^2, \qquad \omega = \sqrt{\frac{\kappa}{m}}; \tag{4}$$

per $t > 0$,

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\,\omega^2\,(x - x_0)^2 = H_0 - m\,\omega^2\, x_0\, x + \frac{1}{2} m\,\omega^2\, {x_0}^2, \tag{5}$$

quindi

$$\langle H \rangle = \langle \psi_0 | H_0 - m\,\omega^2\, x_0\, x + \frac{1}{2} m\,\omega^2\, {x_0}^2 | \psi_0 \rangle = \frac{1}{2}\omega\,\hbar + \frac{1}{2} m\,\omega^2\, {x_0}^2. \tag{6}$$

poiché la funzione d'onda a $t = 0+$ è quella dello stato fondamentale di H_0.

(ii) Osserviamo che le probabilità richieste non dipendono dal tempo, essendo H costante del moto per $t > 0$. Infatti, esprimendo la funzione d'onda a $t = 0^+$ come

$$\psi(x,0) = \sum_{k=0}^{\infty} a_n\, \psi^{(n)}(x), \tag{7}$$

dove $\psi^{(n)}(x)$ sono autostati di H, la funzione d'onda a t generico è

$$\psi(x,0) = \sum_{k=0}^{\infty} a_n\, e^{-i E_n t/\hbar}\, \psi^{(n)}(x), \tag{8}$$

perciò le probabilità di trovare il sistema in uno degli autostati di H sono

$$P_n = |a_n\, e^{-i E_n t/\hbar}|^2 = |a_n|^2 \tag{9}$$

e sono indipendenti dal tempo. Per calcolare $a_n = \langle \psi^{(n)} | \psi_0 \rangle$ basta ricordare che a $t = 0$ la funzione d'onda è data da:

$$\psi(x,0) = \psi_0(x) = \left(\frac{m\,\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\,\omega}{2\hbar} x^2}; \tag{10}$$

mentre gli stati stazionari di H sono

$$\psi^{(0)}(x) = \left(\frac{m\,\omega}{\pi\,\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\,\omega}{2\hbar}(x - x_0)^2}; \tag{11}$$

$$\psi^{(1)}(x) = i\,\left(\frac{m\,\omega}{\pi\,\hbar}\right)^{1/4} \left(\frac{2\,m\,\omega}{\hbar}\right)^{1/2} e^{-\frac{m\,\omega}{2\hbar}(x - x_0)^2}; \tag{12}$$

$$a_0 = \int dx\, \psi^{(0)\,*}(x)\, \psi(x,0), \tag{13}$$

$$a_1 = \int dx\, \psi^{(1)\,*}(x)\, \psi(x,0). \tag{14}$$

Il calcolo è elementare, il risultato è

$$P_0 = |a_0|^2 = e^{-\frac{m\,\omega}{2\hbar} x_0^2}; \tag{15}$$

$$P_1 = |a_1|^2 = \frac{m\,\omega x_0^2}{2\,\hbar}\,e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x_0^2}. \tag{16}$$

È interessante fare il calcolo di a_n facendo uso degli operatori di creazione e di annichirazione. Siano a, $a^\dagger$ gli operatori definiti rispetto a H_0 in maniera standard, e $\tilde{a}$, $\tilde{a}^\dagger$ gli operatori corrispondenti a H:

$$\begin{aligned} a &= \sqrt{\frac{m\,\omega}{2\,\hbar}}\,x + i\frac{1}{\sqrt{2\,m\,\omega\,\hbar}}\,p; \\ a^\dagger &= \sqrt{\frac{m\,\omega}{2\,\hbar}}\,x - i\frac{1}{\sqrt{2\,m\,\omega\,\hbar}}\,p, \end{aligned} \tag{17}$$

$$\begin{aligned} \tilde{a} &= \sqrt{\frac{m\,\omega}{2\,\hbar}}\,(x - x_0) + i\frac{1}{\sqrt{2\,m\,\omega\,\hbar}}\,p; \\ \tilde{a}^\dagger &= \sqrt{\frac{m\,\omega}{2\,\hbar}}\,(x - x_0) - i\frac{1}{\sqrt{2\,m\,\omega\,\hbar}}\,p. \end{aligned} \tag{18}$$

Evidentemente

$$\tilde{a} = a - C, \quad \tilde{a}^\dagger = a^\dagger - C, \qquad C = \sqrt{\frac{m\,\omega}{2\,\hbar}}\,x_0. \tag{19}$$

Ora scriviamo lo sviluppo (7) in notazione di Dirac,

$$|0\rangle = \sum_n a_n\,|n\rangle', \tag{20}$$

dove

$$\tilde{a}\,|n\rangle' = \sqrt{n}\,|n-1\rangle', \qquad n = 1, 2, \ldots, \tag{21}$$

visto che $|n\rangle'$ è l'n simo autostato di H. La condizione che $|0\rangle$ sia lo stato fondamentale di H_0 è

$$a\,|0\rangle = 0, \qquad [\tilde{a} + C]\,\sum_n a_n\,|n\rangle' = 0, \tag{22}$$

dal quale si ottengono (facendo uso di (21)) delle relazioni di ricorrenza

$$a_n = \frac{(-C)}{\sqrt{n}}\,a_{n-1} = \ldots = \frac{(-C)^n}{\sqrt{n!}}\,a_0. \tag{23}$$

Dalla condizione di normalizzazione

$$1 = \sum_n |a_n|^2 = |a_0|^2\,e^{C^2}, \qquad \therefore \quad |a_0|^2 = e^{-C^2}. \tag{24}$$

Si trova dunque, la probabilità di trovare il sistema nell'n -simo stato dell'Hamiltoniana nuova è

$$P_n = |a_n|^2 = \frac{C^{2\,n}}{n!}e^{-C^2} \tag{25}$$

che è una distribuzione Poissoniana. Per $n = 0$ e $n = 1$ ovviamente il risultato è in accordo con quanto trovato prima, ma questo metodo è più adatto per calcolare le probabilità P_n per n generico.

n	L	J	F	Energia	Grad. Degener.
1	0	$\frac{1}{2}$	0, 1	${E_1}^{(0)}$	4
2	0	$\frac{1}{2}$	0, 1	${E_2}^{(0)}$	4
2	1	$\frac{1}{2}$	0, 1	${E_2}^{(0)} - A$	4
2	1	$\frac{3}{2}$	1, 2	${E_2}^{(0)} + \frac{1}{2}A$	8

Tabella 1:

(iii) I valor medii di x e di p non subiscono discontinuità, a causa dell'accensione della perturbazione. Infatti la funzione d'onda è uguale a $t = 0^-$ e a $t = 0^+$. Analogamente per $\frac{d}{dt}x$ che è uguale a p/m.

$$\frac{d}{dt}p = -\frac{\partial}{\partial x}V(x), \tag{26}$$

è discontinua a causa del cambiamento di $V(x)$,

$$\frac{\partial}{\partial x}V(x) = m\,\omega^2\,x, \qquad t = 0^-; \tag{27}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}V(x) = m\,\omega^2\,(x - x_0), \qquad t = 0^+. \tag{28}$$

La dicontinuità richiesta è

$$\Delta\langle\frac{d}{dt}p\rangle = m\,\omega^2\,x_0. \tag{29}$$

Problema 2.

(i) La degenerazione del livello n è $4\,n^2$, con lenergia

$$E_n^{(0)} = -\frac{m\,e^4}{2\,\hbar^2\,n^2}. \tag{30}$$

(ii)

$$H_{S-O} = A\,\mathbf{L}\cdot\mathbf{s}_e = \frac{1}{2}A\,[\,\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - {\mathbf{s}_e}^2\,] = \frac{1}{2}A\,[\,J(J+1) - L(L+1) - \frac{3}{4}\,]. \tag{31}$$

da cui segue il risultato in Tabella 1.

(iii)

$$\begin{aligned} H &= H_0 + A\,\mathbf{L}\cdot\mathbf{s}_e + B\,\mathbf{s}_p\cdot\mathbf{s}_e \\ &= H_0 + \frac{A}{2}\,[\,\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - {\mathbf{s}_e}^2\,] + \frac{B}{2}\,[\,\mathbf{S}^2 - \frac{3}{4} - \frac{3}{4}\,] \end{aligned} \tag{32}$$

Gli stati $|L, J, F, F_z\rangle$ della Tabella 1. in generale non sono autostati di H totale, perché $\mathbf{J}^2$ non commuta con $\mathbf{S}^2$, ma questo non esclude che lo siano alcuni di essi. Questo accade quando i valori di L e F univocamente determina anche il valore di S, dove

$$\mathbf{S} = \mathbf{s}_e + \mathbf{s}_p; \qquad \mathbf{F} = \mathbf{L} + \mathbf{S}. \tag{33}$$

Dalla regola di composizione di momenti angolare, si ha il risultato riportato nella Tabella 2.

n	L	J	F	S	Energia	Grad. Degener.
1	0	$\frac{1}{2}$	0	0	$E_1{}^{(0)} - \frac{3B}{4}$	1
1	0	$\frac{1}{2}$	1	1	$E_1{}^{(0)} + \frac{B}{4}$	3
2	0	$\frac{1}{2}$	0	0	$E_2{}^{(0)} - \frac{3B}{4}$	1
2	0	$\frac{1}{2}$	1	1	$E_2{}^{(0)} + \frac{B}{4}$	3
2	1	$\frac{1}{2}$	0	1	$E_2{}^{(0)} - A + \frac{B}{4}$	1
2	1	$\frac{3}{2}$	2	1	$E_2{}^{(0)} + \frac{A}{2} + \frac{B}{4}$	5

Tabella 2: