Prova Scritta di Meccanica Quantistica I

Facoltà di Scienze, M.F.N., Università degli Studi di Pisa
07 gennaio 2010 (A.A. 09/10)

Tempo a disposizione: 3 ore

Risolvere Problemi 1 e 2 per il recupero Compitino 1; risolvere Problemi 2 e 3 per il recupero Compitino 2. Per la prova scritta completa risolvere Prob. 1, Prob. 3 e Prob. 2 (i).
INDICARE CHIARAMENTE la scelta fatta.
I punteggi indicati sono solo per i recupero compitini.

Problema 1

Una particella di massa m si muove descritta dall'Hamiltoniana,

$$H = \frac{p^2}{2m} + f\,\delta(x) + V(x)\,, \qquad V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ -V_0 & x > 0, \end{cases} \qquad V_0 > 0.$$

(i) Dimostrare la condizione di raccordo soddisfatta dalla funzione d'onda a $x = 0$,

$$\psi(0+) = \psi(0-); \qquad \psi'(0+) - \psi'(0-) = \frac{2mf}{\hbar^2}\psi(0)\,. \tag{1}$$

(*2 punti*)

(ii) La particella è incidente da $x = -\infty$. Scrivere la soluzione dell'equazione di Schrödinger per $\psi(x)$, valida nelle due regioni, $I:\ x < 0$ e $II:\ x > 0$, che soddisfa le condizioni al contorno asintotiche appropriate a $x = \pm\infty$. (*2 punti*)

(iii) Imponendo la condizione (1) risolvere l'equazione di Schrödinger e trovare la funzione d'onda valida anche nella regione attorno a $x = 0$. (*3 punti*)

(iv) Determinare la probabilità che la particella incidente da $x = -\infty$ passi la barriera (o la buca) di potenziale, transitando nella regione $x = +\infty$. Discutere i limiti $f \to \infty$ e $f \to 0$. (*1 punto*)

Problema 2.

Tre particelle di spin $\frac{1}{2}$ interagiscono tramite l'Hamiltoniana,

$$H = 2A\,[\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 + \mathbf{s}_2 \cdot \mathbf{s}_3 + \mathbf{s}_3 \cdot \mathbf{s}_1\,] + B\,(s_{1z} + s_{2z} + s_{3z})\,,$$

dove $A(\neq 0)$, $B(\neq 0)$ sono costanti. Si trascuri il momento angolare orbitale.

(i) Riscrivere l'Hamiltoniana in termini dell'operatore dello spin totale,

$$\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2 + \mathbf{s}_3 \equiv \mathbf{s}_1 \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \mathbf{s}_2 \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbf{s}_3\,.$$

Trovare lo spettro dell'energia (gli autovalori di H e relativa degenerazione). (*2 punti*)

(ii) Assumendo $A < 0$, $B > 0$, trovare la funzione d'onda dello stato fondamentale. (*3 punti*)

(iii) All'istante $t = 0$ il sistema si trova nello stato

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle).$$

Qual'è la probabilità che una misura di s_{1x} al tempo t dia il risultato $s_{1x} = \frac{1}{2}$? (*2 punti*)

Problema 3.

Un atomo di idrogeno "perturbato" è descritto dall'Hamiltoiana

$$H = H_0 + H' \qquad H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}, \quad H' = \lambda \mathbf{s} \cdot \mathbf{p},$$

dove $\mathbf{s}$ è l'operatore di spin dell'elettrone, λ è una piccola costante.

(i) Dire quali tra le seguenti osservabili

$$\mathbf{s}^2, \quad \mathbf{L}^2, \quad \mathbf{J}^2, \quad s_i, \quad L_i, \quad J_i, \quad \mathcal{P} \qquad (\mathcal{P} = \text{parita}')$$

sono conservate in presenza di H'.[1] $\mathbf{J}$ è il momento angolare totale, $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{s}$. (*3 punti*)

(ii) Dimostrare che nello stato fondamentale dell'atomo di idrogeno ψ_{100} (autostato di H_0) vale[2]

$$\langle 100; \chi^{'} | H' | 100; \chi \rangle = 0 \,,$$

indipendentemente dallo stato di spin, $\chi, \chi^{'} = |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$. (*2 punti*)

(iii) Si considerino gli autostati di H_0 con $n = 2$, $|2, \ell, m; \chi\rangle$. Costruire, in termini di questi stati, l'autostato di (J, J_z) con autovalori $(J, J_z) = (\frac{3}{2}, \frac{1}{2})$. (*2 punti*)

(iv) Dimostrare, utilizzando i risultati dei punti (i) e (iii), che vale la relazione

$$\langle 2,1,1; \downarrow | H^{'} | 100; \uparrow \rangle = -\sqrt{2} \langle 2,1,0; \uparrow | H^{'} | 100; \uparrow \rangle, \tag{2}$$

senza fare il calcolo esplicito degli elementi di matrice. (*1 punto*)

[1] L'operatore di spin si comporta sotto parità nella stessa maniera dell'operatore di momento angolare orbitale.

[2] Qui e in seguito, indichiamo con $|n, \ell, m; \chi\rangle$ autostati di H_0, i.e., gli stati dell'atomo di idrogeno nell'n-sima orbita di Bohr, con spin.

Formulario

Densità di corrente (sistema unidimensionale)

$$J = \frac{i\hbar}{2m}\left[\psi^{*\prime}(x)\psi(x) - \psi(x)^*\psi'(x)\right].$$

Atomo di idrogeno

$$\psi_{n,\ell,m}(x)\,\chi = R_{n,\ell}(r)\,Y_{\ell,m}(\theta,\phi)\,\chi, \qquad \chi = |\uparrow\rangle \quad \text{o} \quad |\downarrow\rangle\,.$$

Momento angolare e regola di commutazione

$$[L_i, L_j] = i\varepsilon_{ijk}L_k; \qquad [L_i, p_j] = i\varepsilon_{ijk}p_k; \qquad [s_i, s_j] = i\varepsilon_{ijk}s_k.$$

Coefficienti di Clebsch-Gordan (e.g. $-2/3$ va letto come $-\sqrt{2/3}$)

$j_1 \otimes j_2$		**J_1** **M_1**	**J_2** **M_2**	... ...
m_1	**m_2**	**C−G coefficients**		
m_3	**m_4**			
...	...			

Figura 1:

1/2 ⊗ 1/2		1 +1	1 0	0 0	1 −1
+1/2	+1/2	1			
+1/2	−1/2		1/2	1/2	
−1/2	+1/2		1/2	−1/2	
−1/2	−1/2				1

Figura 2:

1 ⊗ 1/2		3/2 +3/2	3/2 +1/2	1/2 +1/2	3/2 −1/2	1/2 −1/2	3/2 −3/2
+1	+1/2	1					
+1	−1/2		1/3	2/3			
0	+1/2		2/3	−1/3			
0	−1/2				2/3	1/3	
−1	+1/2				1/3	−2/3	
−1	−1/2						1

Figura 3:

Soluzione

Problema 1.

(i) La prima segue dalla richiesta che la densità di probabilità $\psi^*\psi$ sia continua. Per trovare la seconda, basta integrare i due membri dell'equazione di Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + f\delta(x)\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\,\psi(x)$$

nell'intervallo $[-\varepsilon, \varepsilon]$ per trovare

$$-\frac{\hbar^2}{2m}[\,\psi'(\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon)\,] + f\,\psi(0) = O(\varepsilon)\ .$$

Prendendo poi il limite $\varepsilon \to 0$ si ha la (1). È da notare che la presenza del termine $\propto V(x)$ non modifica la condizione poiché la discontinutà nel $V(x)$ è finita.

Notiamo inoltre che la densità di corrente è continua attraverso $x = 0$, poiché

$$\begin{aligned} j_+ - j_- &= \frac{i\hbar}{2m}[\,(\psi^{*\prime}\psi|_+ - \psi^{*\prime}\psi|_- - \{\psi^*\psi'|_+ - \psi^*\psi'|_-\}\,] \\ &= \frac{if}{\hbar}[\,|\psi(0)|^2 - |\psi(0)|^2\,] = 0 \end{aligned} \tag{3}$$

(ii)

$$\psi_I(x) = e^{ikx} + A\,e^{-ikx}, \qquad \psi_{II}(x) = B\,e^{ik'x},$$

dove

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \qquad k' = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar},$$

(iii)

$$1 + A = B;$$

$$ik'B - ik(1-A) = \frac{2mf}{\hbar^2}B, \qquad 1 - A = \frac{i}{k}(\frac{2mf}{\hbar^2} - ik')B = (\frac{k'}{k} + \frac{2mfi}{k\hbar^2})B$$

$$B = \frac{2}{1 + \frac{k'}{k} + \frac{2mfi}{k\hbar^2}}; \qquad A = B - 1 = \frac{1 - \frac{k'}{k} - \frac{2mfi}{k\hbar^2}}{1 + \frac{k'}{k} + \frac{2mfi}{k\hbar^2}} = \frac{k - k' - \frac{2mfi}{\hbar^2}}{k + k' + \frac{2mfi}{\hbar^2}};$$

(iv)

$$D = \frac{J_{II}}{J_I} = |B|^2\frac{k'}{k} = \frac{4kk'}{(k+k')^2 + \frac{4m^2f^2}{\hbar^4}}; \qquad R = |A|^2 = \frac{(k-k')^2 + \frac{4m^2f^2}{\hbar^4}}{(k+k')^2 + \frac{4m^2f^2}{\hbar^4}};$$

Si verifica che

$$D + R = 1.$$

La probabilità richiesta è dunque:

$$P_{trasm} = D = \frac{4kk'}{(k+k')^2 + \frac{4m^2f^2}{\hbar^4}}.$$

Nel limite $f \to \infty$

$$P_{trasm} \sim \frac{1}{f^2} \to 0,$$

mentre per $f \to 0$ si ha

$$P_{trasm} = \frac{4kk'}{(k+k')^2},$$

il risultato noto per un gradino di potenziale.

Problema 2.

(i)

$$H = A\,[\mathbf{S}^2 - \mathbf{s}_1^2 - \mathbf{s}_2^2 - \mathbf{s}_3^2] + B\,S_z = A\,[\mathbf{S}^2 - \frac{9}{4}] + B\,S_z\,.$$

Gli autosati dell'energia sono dunque gli autostati di S, S_z. I possibili valori di S si possono ottenere dalla regola di composizione-decomposizione

$$\frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} = (1 \oplus 0) \otimes \frac{1}{2} = \frac{3}{2} \oplus \frac{1}{2} \oplus \frac{1}{2}.$$

Chiaramente i livelli corrispondenti a $S = \frac{1}{2}$ sono tutti doppiamente degeneri, dovuto al fatto che ci sono due modi di costruire gli stati di $S = \frac{1}{2}$ partendo da tre spin $\frac{1}{2}$. Gli autovalori dell'energia sono

$$E_{3/2,S_z} = \frac{3}{2}A + B\,S_z, \qquad S_z = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2};$$

$$E_{1/2,S_z} = -\frac{3}{2}A + B\,S_z, \qquad S_z = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2};$$

Non ci sono ulteriori degenerazioni dei livelli per generici valori di A, B.

(ii) Per $A < 0$ lo stato fondamentale è lo stato $(S, S_z) = (\frac{3}{2}, -\frac{3}{2})$, con l'energia

$$E_{3/2,-3/2} = \frac{3}{2}\,(A - B);$$

lo stato è

$$\psi_0 = |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$$

(iii)

$$\psi(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle).$$

Trascurando un fattore di fase davanti, si ha

$$\psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-3iBt/2\hbar}|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle - e^{3iBt/2\hbar}|\downarrow\downarrow\downarrow\rangle).$$

La matrice densità ridotta per l'osservatore di $\mathbf{s}_1$ è quindi

$$\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\,.$$

La media della variabile

$$s_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

è dunque

$$\mathrm{Tr}\, s_x\, \rho = 0.$$

Il che significa che

$$\frac{1}{2}P_{s_x=1/2} - \frac{1}{2}P_{s_x=-1/2} = \frac{1}{2}(P_{s_x=1/2} - P_{s_x=-1/2}) = 0,$$

i.e.,

$$P_{s_x=1/2} - P_{s_x=-1/2} = 0$$

D'altra parte, la conservazione della probabilità totale dà

$$P_{s_x=1/2} + P_{s_x=-1/2} = 1,$$

perciò si ha

$$P_{s_x=1/2} = \frac{1}{2}$$

indipendentementa dal tempo t.

Problema 3.

(i) Commutano con l'Hamiltoniana gli operatori

$$\mathbf{s}^2, \quad \mathbf{J}^2, \quad J_i \, .$$

(ii) L'operatore H' ha la parità negativa ($\mathcal{P}H'\mathcal{P}^{-1} = -H'$), mentre lo stato fondamentale ψ_{100} ha la parità definita (positiva), perciò

$$\langle 100; \chi^{'} | H' | 100; \chi \rangle = \langle 100; \chi^{'} | \mathcal{P}^{-1} \mathcal{P} H' \mathcal{P}^{-1} \mathcal{P} | 100; \chi \rangle = -\langle 100; \chi^{'} | H' | 100; \chi \rangle = 0 \, .$$

(iii) Per costruire uno stato di $J = \frac{3}{2}$ il momento angolare orbitale deve essere $\ell = 1$. Utilizzando le tabelle dei coefficienti di CG, si ha

$$|\frac{3}{2}\frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |2,1,1;\downarrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |2,1,0;\uparrow\rangle \, .$$

(iv) Lo stato $|100;\uparrow\rangle$ è ovviamente autostato di $\mathbf{J}^2$ con $J = \frac{1}{2}$. Dal punto (i) segue che anche

$$H'|100;\uparrow\rangle$$

è un autostato di $\mathbf{J}^2$ con $J = \frac{1}{2}$,

$$\mathbf{J}^2 H' |100;\uparrow\rangle = H' \mathbf{J}^2 |100;\uparrow\rangle = \frac{3}{4} H' |100;\uparrow\rangle \, .$$

D'altra parte

$$\langle \frac{3}{2}\frac{1}{2} | \mathbf{J}^2 = \frac{15}{4} \langle \frac{3}{2}\frac{1}{2} | \, .$$

Perciò

$$\langle \frac{3}{2}\frac{1}{2} | \mathbf{J}^2 H' |100;\uparrow\rangle = \frac{3}{4} \langle \frac{3}{2}\frac{1}{2} | H' |100;\uparrow\rangle = \frac{15}{4} \langle \frac{3}{2}\frac{1}{2} | H' |100;\uparrow\rangle \, ;$$

segue che

$$\left(\frac{15}{4} - \frac{3}{4}\right) \langle \frac{3}{2}\frac{1}{2} | H' |100;\uparrow\rangle = 0, \qquad \therefore \quad \langle \frac{3}{2}\frac{1}{2} | H' |100;\uparrow\rangle = 0 \, .$$

Utilizzando il risultato del punto (iii) si vede che questa relazione è proprio la (2) che si voleva demostrare.