Prova Scritta di Meccanica Quantistica

07 giugno 2013 (A.A. 12/13)

MQI: risolvere i Problemi 1 e 2
MQII o il corso annulae di MQ: risolvere il Problema 3.

Tempo a disposizione: 3 ore

Problema 1

Una particella di massa m è sottoposta ad un'energia potenziale $U(x) = \frac{1}{2}\kappa x^2$ (oscillatore armonico). Indichiamo con $|k\rangle$, dove $k = 0, 1, 2\ldots$, gli autostati normalizzati dell'Hamiltoniana. Il sistema all'istante iniziale $t = 0$ si trova nello stato

$$|\psi\rangle = C\Big(|0\rangle + |1\rangle\Big)$$

1) Determinare C in modo che lo stato $|\psi\rangle$ sia normalizzato.

2) Scrivere il valor medio dell'energia all'istante iniziale.

3) Il sistema evolve. Consideriamo un tempo $t > 0$.

   a) Scrivere lo stato $|\psi(t)\rangle$ ottenuto dall'evoluzione dello stato precedente.

   b) Scrivere il valor medio dell'energia al tempo t.

   c) Scrivere il valor medio della coordinata x al tempo t.

Problema 2

Una particella di massa m in una dimensione si muove verso destra. Incontra un ostacolo schematizzato come un potenziale

$$V(x) = g\,\delta(x)\,; \qquad g > 0\,. \tag{1}$$

(i) Calcolare qual è la probabilità che la particella passi l'ostacolo (D) e qual è la probabilità di riflessione (R). Si schematizzi la particella incidente sull'ostacolo come un'onda piana di impulso definito, $\psi^{inc} \sim A\,e^{ikx}$ ($p = k\hbar$).

(ii) Discutere come cambia il risultato per D e R, nel caso di potenziale attrattivo, i.e., $g < 0$ nella (1).

(iii) Supponiamo che l'onda riflessa e l'onda trasmessa abbiano forme, $\psi^{rif} \sim B\,e^{-ikx}$, $\psi^{tras} \sim C\,e^{ikx}$, rispettivamente. I rapporti B/A e C/A, considerati come funzione di *una variabile complessa k*, hanno un polo per un valore particolare immaginario di k. Potrebbe avere un significato fisico un tale risultato? Se sì, qual'è?

Problema 3

L'interazione spin-orbita in un atomo idrogenoide è data dall'Hamiltoniana

$$H^{'} = \frac{Ze^2\hbar^2}{2m^2c^2r^3}\,\mathbf{s}\cdot\ell. \tag{2}$$

Per lo scopo di questo esercizio, si trascurino altri termini di correzioni (il termine di Darwin e il termine proporzionale a p^4) e considerare soltanto $H^{'}$ come perturbazione.

(i) Senza tenere conto delle interazioni spin-orbita ($H^{'} = 0$) qual'è il grado di degenerazione dell'n-simo livello di Bohr, tenendo conto anche di spin dell'elettrone.

(ii) Facendo uso della teoria delle perturbazioni al primo ordine in H', dire in quanti sottolivelli si dividono i livelli $n = 2$ e $n = 3$. Specificare il termine spettrale e relativo grado di degenerazione per ciascun sottolivello;

(iii) Determinare l'energia del sottolivello più basso di $n = 3$, e quella del sottolivello più alto con $n = 2$, esprimendole in funzione di combinazioni adimensionali Z e $\alpha(=\frac{e^2}{\hbar c})$, e in unità di $\frac{e^2}{r_B}$;

(iv) Determinare il numero delle righe di transizione $n = 3 \to n = 2$, in approssimazione di dipolo, tenendo conto delle interazioni (2);

(v) Determinare qual'è la transizione (di dipolo) corrispondente alla luce con la lunghezza d'onda più lunga, tra le righe al punto (iv).

(vi) In quante righe si divide la riga del punto precedente, quando il sistema viene sottoposto ad un campo magnetico molto debole $\mathbf{B} = (0,0,B)$ esterno omogeneo e costante? Quante righe si vedono, in particolare, se la luce è osservata dalla direzione $\hat{z} = (0,0,1)$ rispetto all'atomo che si trova all'origine, $\mathbf{r} = (0,0,0)$?

Formulario ($\ell \neq 0$)

$$\int_0^\infty dr\,\frac{1}{r}\,R^Z_{n\ell}(r)^2 = \frac{Z^3}{r_B^3 n^3\,\ell(\ell+\frac{1}{2})(\ell+1)}.$$

Soluzione

Problema 1

(1)

$$C = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

(2)

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2}(\frac{\omega\hbar}{2} + \frac{3\omega\hbar}{2}) = \omega\hbar. \tag{3}$$

(3)

- $$|\psi(t)\rangle = Ce^{-i\omega t/2}\Big(|0\rangle + e^{-i\omega t}|1\rangle\Big)$$

- $$\langle E \rangle = \frac{1}{2}(\frac{\omega\hbar}{2} + \frac{3\omega\hbar}{2}) = \omega\hbar. \tag{4}$$

- $$\langle x \rangle = \frac{1}{2}(e^{i\omega t}\langle 1|x|0\rangle + e^{-i\omega t}\langle 0|x|1\rangle = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\cos\omega t \tag{5}$$

Problema 2

(i)

$$D = \frac{1}{1+\alpha^2}, \qquad R = \frac{\alpha^2}{1+\alpha^2}, \qquad \alpha = -\frac{mg}{k\hbar^2}.$$

(ii) Gli stessi di (i).

(iii) Il calcolo dà

$$\frac{C}{A} = \frac{1}{1-i\alpha}; \qquad \frac{B}{A} = \frac{i\alpha}{1-i\alpha}; \tag{6}$$

dove

$$\alpha = -\frac{mg}{k\hbar^2}, \qquad g > 0. \tag{7}$$

Evidentemente i rapporti $\frac{C}{A}$ e $\frac{B}{A}$ divergono a $\alpha = -i$, cioè

$$k = -i\frac{mg}{\hbar^2}, \qquad p = -i\frac{mg}{\hbar}, \qquad \therefore \quad E = -\frac{mg^2}{2\hbar^2}. \tag{8}$$

Ma questa è esattamente il valore dell'energia dello stato legato. Bisogna fare attenzione tuttavia nel concludere che questo rappresenti la presenza del noto stato legato nel sistema. La funzione d'onda in questo caso (ignorando il pezzo dell'onda incidente, che è trascurabile) è data da

$$\psi(x) \sim e^{-ikx} = e^{-\kappa x}, \quad x < 0; \qquad \psi(x) \sim e^{ikx} = e^{\kappa x}, \quad x > 0. \tag{9}$$

Nel caso di potenziale ripulsivo, $g > 0$, quindi $\kappa \equiv \frac{mg}{\hbar^2} > 0$, questo non corrisponde ad uno stato legato: la funzione d'onda non ha la forma ammissibile (i.e., non rappresenta uno stato fisico).

Vice versa, nel caso di potenziale attrattivo, $g < 0$, $\kappa < 0$, la (9) è esattamente l'andamento della funzione d'onda normalizzabile di uno stato legato. Così abbiamo riprodotto il noto risultato per lo stato fondamentale discreto nel potenziale delta attrattivo, dal calcolo del processo di diffusione!

Tale risultato è perfettamente comprensibile, visto che la soluzione dell'equazione di Schödinger è puramente algebrica e non dipende dalla realtà o dalla fase del parametro k. Quest'ultimo aspetto è però cruciale nell'interpretazione della soluzione (9).

Problema 3

(i)

$$2n^2$$

(ii) $n = 2 \to \ell = 0, 1$, mentre $n = 3 \to \ell = 0, 1, 2$. Tenendo conto di $H^{'}$ il livello $\ell = 1$ si divide in $j = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$, mentre il livello $\ell = 2$ si divide in $j = \frac{5}{2}, \frac{3}{2}$. Chiaramente il livello $n = 2$ si divide in tre sottolivelli,

$$^2S_{1/2}, \quad ^2P_{1/2}, \quad ^2P_{3/2}, \tag{10}$$

mentre il livello $n = 3$ in cinque sottolivelli

$$^2S_{1/2}, \quad ^2P_{1/2}, \quad ^2P_{3/2}, \quad ^2D_{3/2}, \quad ^2D_{5/2}. \tag{11}$$

(iii) Determinare l'energia del sottolivello più basso di $n = 3$, e quella del sottolivello più alto tra $n = 2$, esprimendole in funzione di combinazioni adimensionali Z e $\alpha (= \frac{e^2}{\hbar c})$, e in unità di $\frac{e^2}{r_B}$;

$$\mathbf{s} \cdot \ell = \frac{1}{2}[\, j(j+1) - s(s+1) - \ell(\ell+1)\,] = 0, -1, \frac{1}{2}, -\frac{3}{2}, 1,$$

rispettivamente per i cinque sottolivelli $n = 3$ e

$$\mathbf{s} \cdot \ell = \frac{1}{2}[\, j(j+1) - s(s+1) - \ell(\ell+1)\,] = 0, -1, \frac{1}{2},$$

per i sottolivelli $n = 2$.

$n = 3$. Visto che (per $\frac{Ze^2\hbar^2}{2m^2c^2}$)

$$\Delta E^{n=3}_{D_{3/2}} = -\frac{3}{2} \frac{Z^3}{r_B^3 3^3\, 2(2+\frac{1}{2})(2+1)} = -\frac{1}{270} \frac{Z^3}{r_B^3} > \Delta E^{n=3}_{P_{1/2}} = -\frac{Z^3}{r_B^3 3^3\,(1+\frac{1}{2})(1+1)} = -\frac{1}{81} \frac{Z^3}{r_B^3}.$$

(per $\frac{Ze^2\hbar^2}{2m^2c^2}$) Il sottolivello più basso $n = 3$ è $^2P_{1/2}$, con l'energia

$$-\frac{1}{18} \frac{Z^2e^2}{r_B} - \frac{Ze^2\hbar^2}{2m^2c^2} \frac{1}{81} \frac{Z^3}{r_B^3} = -(\frac{1}{18} + \frac{Z^2\alpha^2}{162}) \frac{Z^2e^2}{r_B}$$

Vice versa, il sottolivello più alto $n = 2$ è $^2P_{3/2}$, con

$$\Delta E^{n=2}_{P_{1/2}} = -\frac{1}{8} + \frac{1}{2} \frac{Z^3}{r_B^3 2^3\,(1+\frac{1}{2})(1+1)} = -\frac{1}{8} + \frac{1}{48} \frac{Z^3}{r_B^3} \frac{Ze^2\hbar^2}{2m^2c^2} = -(\frac{1}{8} - \frac{Z^2\alpha^2}{96}) \frac{Z^2e^2}{r_B}\ .$$

(iv) Tenendo condo delle regole di selezione, si hanno sette transizioni possibili (sette righe):

$$^2D_{3/2} \to {}^2P_{3/2}, \qquad {}^2D_{3/2} \to {}^2P_{1/2}, \qquad {}^2D_{5/2} \to {}^2P_{3/2},$$

$$^2P_{3/2} \to {}^2S_{1/2}, \qquad {}^2P_{1/2} \to {}^2S_{1/2}, \qquad {}^2S_{1/2} \to {}^2P_{3/2}, \qquad {}^2S_{1/2} \to {}^2P_{1/2},$$

(v) Determinare la transizione la più lunga tra le righe al punto (iii).

Il livello più basso di $n = 3$ è $^2P_{1/2}$, ma la transizione al sottolivello più alto $n = 2$ $(^2P_{3/2})$ è proibito dalla regola di selezione. La competizione è tra

$$D_{3/2} \to P_{3/2} \qquad \text{e} \qquad P_{1/2} \to S_{1/2}. \tag{12}$$

I calcoli delle energie fatti al punto (iii) indicano che la più lunga (l'energia minore) è il primo, $D^{n=3}_{3/2} \to P^{n=2}_{3/2}$.

(Fig. 1)

(vi) In quante righe si divide la riga con la lunghezza d'onda più lunga, del precedente punto, quando il sistema viene sottoposta ad un campo magnetico molto debole $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ esterno omogeneo e costante?

Dal risultato del precedente punto, la transizione in questione è

$$D^{n=3}_{3/2} \longrightarrow P^{n=2}_{3/2}.$$

Ciascuno dei due livelli si dividono in 4 sottolivelli Zeeman. Escludendo le transizioni con $|\Delta j_z| > 1$, si trovano 10 righe.

Nel caso la luce è osservato nella direzione dell'asse z, le transizioni di dipolo ammesse sono quelle con $\Delta j_z = \pm 1$. Escludendo le transizioni con $\Delta j_z = 0$, ci si aspetta di osservare perciò

$$10 - 4 = 6$$

righe.

(Fig. 2)

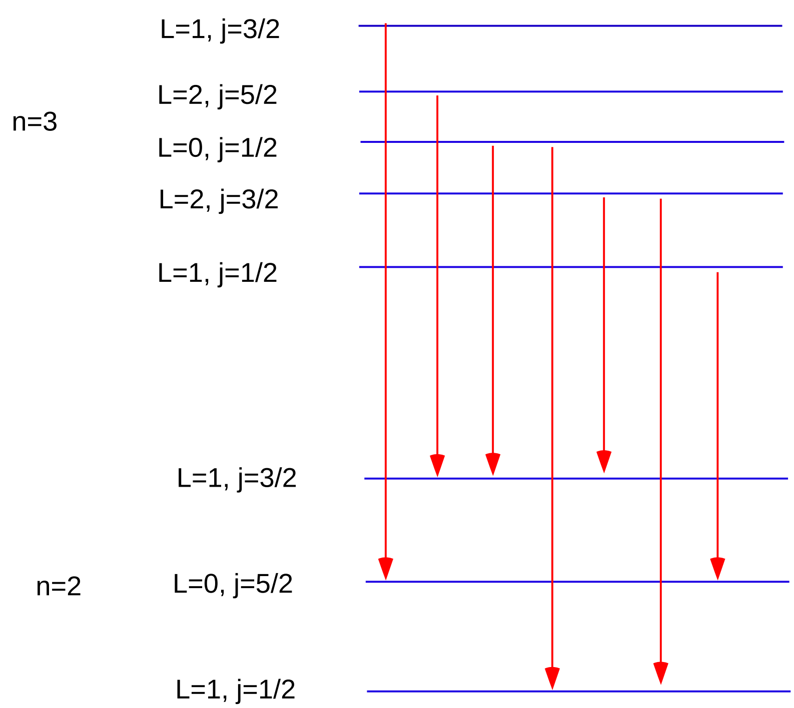

Figura 1: Transizioni di dipolo n=3 to n=2

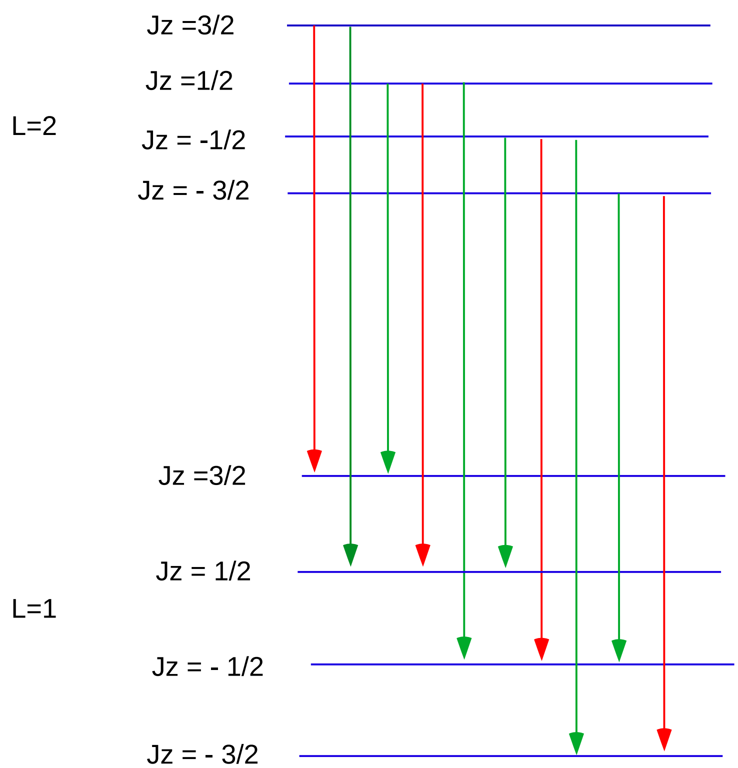

Figura 2: Transizioni di dipolo con Zeeman splittings