Prova Scritta di Meccanica Quantistica I

Facoltà di Scienze, M.F.N
Università degli Studi di Pisa
7 settembre 2007 (A.A. 06/07)

(*tre ore a disposizione*)

Si consideri l'atomo di idrogeno in un campo elettrico statico esterno debole, $\mathbf{E} = (0, 0, \mathcal{E})$. Per un atomo neutro (come l'atomo di idrogeno) il primo effetto di $\mathbf{E}$ con l'atomo è l'interazione di dipolo,

$$\Delta H = e\,\mathbf{r} \cdot \mathbf{E} = e\,z\,\mathcal{E}, \tag{1}$$

$\mathbf{r}$ è l'operatore di posizione dell'elettrone.

(i) Si dimostri, facendo uso dell'argomento di parità, che nello stato fondamentale, e infatti in uno stato stazionario non-degenere *qualsiasi* $|\psi\rangle$, vale

$$\Delta E = \langle\psi|\Delta H|\psi\rangle = 0.$$

Dovuto alla *degenerazione accidentale* dei livelli $n \geq 2$ di Bohr, l'atomo di idrogeno eccitato può possedere un dipolo elettrico. Considerando i quattro stati di $n = 2$,

$$|n, \ell, m\rangle = |2, 1, \pm 1\rangle, |2, 1, 0\rangle, |2, 0, 0\rangle, \tag{2}$$

si vuole studiare l'effetto del campo e trovare le correzioni ai livelli di Bohr. In pratica, visto che l'Hamiltoniana senza il campo elettrico

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2\,m} - \frac{e^2}{r},$$

ha la forma $(-\frac{e^2}{8\,r_B})\,\mathbb{1}$ come matrice, nel sottospazio 4×4 dell'Eq. (2), *si propone di scrivere elementi di matrice dell'operatore ΔH dell'Eq. (1) in questo sottospazio e diagonalizzarlo.* Tale diagonalizzazione di ΔH non cambierà la parte di H_0.

(ii) Dimostrare che, come conseguenza del fatto che $[L_z, \Delta H] = 0$, ΔH ha elementi di matrice non nulli soltanto tra due stati con lo stesso numero quantico azimutale m.

(iii) Dire tra quali stati, tra quelli della (2), ΔH ha un elemento di matrice non nullo.

(iv) Calcolare gli elementi di matrice non nulli di ΔH (punto (iii)) nello sottospazio Eq. (2), e diagonalizzarlo. In quanti sottolivelli si divide il livello $n = 2$ e con quali correzioni di energia, rispetto al livello di Bohr?

(v) Spiegare qualitativamente perché il risultato sopra non è esatto. Arguire che il calcolo fatto è tuttavia approssimativamente valido per un campo esterno sufficientemente debole.

Suggerimento: Per il secondo punto qui, osservare che il problema di mixing tra due stati ψ_1 e ψ_2 (calcolo di elementi non diagonali e successiva diagonalizzazione dell'Hamitoniana) è *qualitativamente* diverso, a seconda della relazione tra E_1, E_2 e $\mathcal{E}$: i.e., se $|E_1 - E_2| \ll \text{cost.}\, |\mathcal{E}|$ o $|E_1 - E_2| \gg \text{cost.}\, |\mathcal{E}|$, dove E_1, E_2 sono autovalori di H_0 corrispondenti a ψ_1 e ψ_2.

Se occorre, usate anche

$$\int_0^\infty dr\, r^3 R_{2,1}^2 = 5\, r_B, \quad \int_0^\infty dr\, r^3 R_{2,0}^2 = 6\, r_B, \quad \int_0^\infty dr\, r^3 R_{2,1} R_{2,0} = -3\sqrt{3}\, r_B.$$

dove r_B è il raggio di Bohr.

Soluzione

(i) L'Hamiltoniana è invariante per parità,

$$\mathcal{P}\, H\, \mathcal{P}^{-1} = H\ .$$

Di conseguenza uno stato stazionario non degenere è un autostato di parità:

$$\mathcal{P}\,|\psi\rangle = \eta\,|\psi\rangle, \qquad \eta = \pm 1\ .$$

Segue che nel caso di un operatore di dipolo, che è dispari,

$$\mathcal{P}\, e\, \mathbf{r}\, \mathcal{P}^{-1} = -e\, \mathbf{r},$$

l'elemento di matrice in uno stato stazionario qualsiasi è

$$\langle\psi|\, e\, \mathbf{r}\,|\psi\rangle = \langle\psi|\mathcal{P}^{-1}\mathcal{P}\, e\, \mathbf{r}\, \mathcal{P}^{-1}\mathcal{P}\,|\psi\rangle = -|\eta|^2\,\langle\psi|\, e\, \mathbf{r}\,|\psi\rangle = -\langle\psi|\, e\, \mathbf{r}\,|\psi\rangle = 0\ .$$

(ii)

$$0 = \langle m|[L_z, \Delta H]|m'\rangle = (m - m')\langle m|\Delta H|m'\rangle.$$

Segue che vale $\langle m|\Delta H|m'\rangle = 0$, per $m \neq m'$.

Non è corretto usare l'argomento, "visto che L_z e ΔH commutano si possono costruire gli autostati sia di L_z che di ΔH ...." In particolare, gli stati $|n\ell m\rangle$ non sono autostati di ΔH.

(iii) Tra $|2,1,0\rangle$ e $|2,0,0\rangle$.

(iv)

$$\begin{aligned}\langle 210|\Delta H|200\rangle &= e\,\mathcal{E}\,\int\, d\cos\theta\, d\phi\, Y^*_{1,0}\,\cos\theta\, Y_{0,0}\,\int_0^\infty dr\, r^3 R_{2,1}R_{2,0}\\ &= e\,\mathcal{E}\,\tfrac{\sqrt{3}}{4\pi}\,2\pi\,\int d\cos\theta\cos^2\theta\,(-3\sqrt{3}\,r_B) = e\,\mathcal{E}\,\tfrac{\sqrt{3}}{2}\tfrac{2}{3}\,(-3\sqrt{3}\,r_B) = -3\,e\,\mathcal{E}\,r_B \qquad (3)\end{aligned}$$

Analogamente

$$\langle 200|\Delta H|210\rangle = -3\,e\,\mathcal{E}\,r_B.$$

Diagonalizzando si ha

$$\delta E = \pm 3\,e\,\mathcal{E}\,r_B.$$

Il livello $n=2$ si divide in tre livelli, $\delta E = 0$ (stati $m = \pm 1$ che restano degeneri); e $\delta E = \pm 3\,e\,\mathcal{E}\,r_B$, corrispondenti a stati,

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\,|2,1,0\rangle \mp |2,0,0\rangle\,),$$

rispettivamente.

(v) Il calcolo sarebbe esatto se avessimo considerato $H_0 + \Delta H$ come matrice infinito dimensionale, tenendo conto di *tutti* gli autostati di H_0 e se l'avessimo diagonalizzato. Poiché abbiamo trascurato tutti gli stati non degeneri con il livello $n = 2$, si tratta di un calcolo approssimativo.

Per rispondere al secondo punto, consideriamo un elemento non diagonale tra due stati (autostati di H_0), $\psi_{1,2}$ con energia $E_{1,2}$. La matrice 2×2 nel sottospazio $\psi_{1,2}$ sarà della forma

$$\begin{pmatrix} E_1 & c\,\mathcal{E} \\ c^*\,\mathcal{E} & E_2 \end{pmatrix};$$

la diagonalizzazione dà

$$E_{1,2} = \frac{1}{2}[\,E_1 + E_2 \pm \sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|c|^2\mathcal{E}^2}\,].$$

Nel caso in cui $|E_1 - E_2| \ll c\,|\mathcal{E}|$ questo si approssima con

$$E_1 \pm |c|\,\mathcal{E}\ :$$

l'effetto è del primo ordine in $\mathcal{E}$, e questo accade in particolare nel caso di sottospazio degenere, che abbiamo considerato.

Nel caso invece di stati non degeneri, $|E_1 - E_2| \gg c\,|\mathcal{E}|$ la diagonalizzazione dà (prendendo $E_1 > E_2$)

$$E_1 + \frac{|c|^2\,\mathcal{E}^2}{E_1 - E_2}; \qquad E_2 - \frac{|c|^2\,\mathcal{E}^2}{E_1 - E_2};$$

l'effetto è quadratico in $\mathcal{E}$: è un effetto molto più piccolo.

Naturalmente se teniamo conto di tutti gli stati di H_0, uno stato, per es. $|2,1,1\rangle$, si mischia non solo con $|3,2,1\rangle$, ma con $|n,2,1\rangle$, $n = 4, 5, \cdots$, e anche con gli stati di continuo: il problema di diagonalizzazione coinvolge più stati e di conseguenza gli autovalori corretti conterrà i termini di potenze più elevate in $\mathcal{E}$: queste si possono tenere conto in teorie delle perturbazioni ordine per ordine, ma qui ci limitiamo ad un'osservazione molto qualitativa. Per $\mathcal{E}$ sufficientemente piccolo dunque è legittimo tenere conto solo gli stati degeneri e diagonalizzare $H_0 + \Delta H$ in questi sottospazi.