Prova Scritta di Meccanica Quantistica

08 gennaio 2014 (A.A. 13/14)

Tempo a disposizione: 3 ore

Problema 1 - MQ annuale (o per MQII)

Si considerino le due Hamiltoniane per una particella di spin 1/2 in campo magnetico:

$$H_0 = -\mu B \sigma_3 \, ; \qquad H_1 = H_0 - \mu B_1 \sigma_1 \tag{1}$$

a) Si scrivano gli autostati di H_1 al primi ordine perturbativo in B_1 tramite gli autostati di H_0. Nella soluzione si usino le notazioni $\hbar\omega = \mu B$, $\hbar\omega_1 = \mu B_1$.

I due sistemi sono connessi tramite una variazione nel tempo del campo magnetico

$$B_x(t) = B_1 \, f(t) \tag{2}$$

dove

$$f(-\infty) = 0\, ; \quad f(+\infty) = 1 \qquad \text{si usi:} \quad f(t) = \begin{cases} \frac{1}{2}\, e^{t/\tau} & \text{per} \;\; t < 0 \\ 1 - \frac{1}{2} e^{-t/\tau} & \text{per} \;\; t > 0 \end{cases} \tag{3}$$

Si consideri il sistema nello stato fondamentale per $t \to -\infty$. Si vuole calcolare qual è la probabilità $P_{i\to f}$ che il sistema passi nello stato eccitato per $t \to +\infty$ al primo ordine perturbativo non nullo.

b) Preliminarmente si calcoli cosa ci si aspetta di trovare per $P_{i\to f}$ nel limiti $\tau \to 0$ e $\tau \to \infty$.

Per approfondire il problema si proceda nel modo seguente:

c1) Ad un generico tempo t lo spinore che descrive l'evoluzione dello stato è della forma

$$\psi(t) = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} \tag{4}$$

Si dimostri che per rispondere alla domanda basta calcolare la funzione $b(t)$ al primo ordine, si scriva in termini di $a(t), b(t)$ l'ampiezza $\mathcal{A}_{i\to f}(t)$ al primo ordine perturbativo.

c2) Si risolva iterativamente l'equazione di Schrödinger per ψ calcolando $b(t)$ al primo ordine.

c3) Si scriva l'ampiezza di transizione e la probabilità di transizione

c4) In teoria perturbativa si è dimostrato nel corso che la probabilità cercata si può scrivere nella forma

$$P_{i\to f} = \frac{1}{\hbar^2 \omega_{fi}^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial V_{fi}}{\partial t} e^{i\omega_{fi} t} \right|^2 \tag{5}$$

Dimostrare che si riottiene in effetti il risultato precedente e si verifichino i limiti dati nella risposta alla domanda b).

Problema 1- MQ1

In una prima rozza approssimazione una molecola di benzene si può immaginare come un esagono regolare con un lato di $L = 1.4$ Å. Un elettrone può muoversi sui lati di questo esagono, effettivamente un anello di circonferenza $6\,L$, come una particella libera. Si dia una stima della separazione dei primi due livelli energetici specificandone le rispettive degenerazioni. Per l'espressione in eV si usi

$$\frac{\hbar^2}{2m\ell^2}4\pi^2 \simeq 150.8\,\mathrm{eV}\,; \qquad \text{per } \ \ell = 1\,\text{Å}$$

Problema 2- MQ1

Una particella di spin $\mathbf{S}$ ha, in generale, un momento magnetico proporzionale all'operatore di spin. Per una particella di spin 1/2 porremo:

$$\boldsymbol{\mu} = \mu\,\boldsymbol{\sigma} \tag{6}$$

Il momento magnetico si accopia con un campo magnetico con la nota Hamiltoniana

$$H = -\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B} \tag{7}$$

Consideriamo un campo magnetico costante lungo l'asse z.

a) Esiste qualche componente del momento angolare che si conserva?

b) Scrivere autovalori ed autostati del sistema descritto dall'Hamiltoniana (7).

c) Al tempo $t = 0$ il sistema ha spin polarizzato completamente nella direzione che fa un angolo θ con l'asse z, diciamo nel piano x–z, quindi lungo il versore $\mathbf{n} = (\sin\theta, 0, \cos\theta)$. Scrivere lo stato (spinore) $|\psi\rangle$ al tempo $t = 0$ e verificare che è un autostato di $\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}$ con autovalore $+1$.

d) Calcolare la sua evoluzione temporale $|\psi(t)\rangle$.

e) Calcolare i valori medi delle tre componenti del momento magnetico al passare del tempo: come descrivereste classicamente il risultato?

Soluzioni

Problema 1

a) Al primo ordine perturbativo

$$|k'\rangle = |k\rangle + \sum_{s\neq k} |s\rangle \frac{\langle s|V|k\rangle}{E_k - E_s}$$

quindi per il fondamentale e lo stato eccitato

$$|1'\rangle \simeq \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\omega_1}{2\omega} \end{pmatrix} \; ; \quad |2'\rangle = \begin{pmatrix} -\frac{\omega_1}{2\omega} \\ 1 \end{pmatrix} \tag{8}$$

b) Per $\tau \to \infty$ la perturbazione è adiabatica e lo stato non cambia, cioè la probabilità di transizione è nulla. Per $\tau \to 0$ la perturbazione è "istantanea" quindi ci si aspetta

$$P_{i\to f} = |\langle 2'|1\rangle|^2 = \frac{\omega_1^2}{4\omega^2} \tag{9}$$

c) Perturbativamente l'ampiezza di probabilità è

$$\mathcal{A} = \langle 2'|U(t)|1\rangle = (-\frac{\omega_1}{2\omega}, 1).(a, b) = \Big(-\frac{\omega_1}{2\omega} a(t) + b(t)\Big)$$

e quindi la probabilità

$$P_{i\to f} = \lim_{t\to\infty} |\mathcal{A}_{i\to f}(t)|^2 \tag{10}$$

Siccome ω_1 è già al primo ordine nella perturbazione basta calcolare $b(t)$ al primo ordine, tenendo $a(t)$ all'ordine 0.

Si può risolvere in rappresentazione di interazione, oppure scrivere direttamente

$$i\hbar \frac{db}{dt} = \mu B\, b(t) - \mu B_1\, f(t) a(t) \;\Rightarrow \dot{b} = -i\omega b + i\omega_1 f(t) a(t)$$

All'ordine zero $a(t) = \exp(i\omega t)$. Scrivendo $b(t) = \exp(-i\omega t) C(t)$ si ha per C l'equazione

$$\dot{C} = i\omega_1 e^{i\omega t} f(t) a(t) \simeq i\omega_1 e^{2i\omega t} f(t)$$

Quindi

$$C(t) = i\omega_1 \int_{-\infty}^{t} f(t') e^{2i\omega t'}\, dt'$$

Inserendo l'espressione di $f(t)$

$$C(t) = i\omega_1 \left[\frac{1}{2}\frac{1}{2i\omega + \frac{1}{\tau}} + \frac{e^{2i\omega t} - 1}{2i\omega} - \frac{1}{2}\frac{e^{-t/\tau} - 1}{2i\omega - \frac{1}{\tau}}\right] \equiv \frac{\omega_1}{2\omega} e^{2i\omega t} + C_0(t)$$

Per $t \to \infty$,

$$C_0(t) = i\omega_1 \left[\frac{1}{2}\frac{1}{2i\omega + \frac{1}{\tau}} - \frac{1}{2i\omega} + \frac{1}{2}\frac{1}{2i\omega - \frac{1}{\tau}}\right] = i\omega_1 \left[\frac{2i\omega}{-\frac{1}{\tau^2} - 4\omega^2} + \frac{i}{2\omega}\right] = \frac{\omega_1}{2\omega}\frac{1/\tau^2}{4\omega^2 + \frac{1}{\tau^2}}$$

Quindi

$$b(t) = \frac{\omega_1}{2\omega} e^{+i\omega t} + e^{-i\omega t} \frac{\omega_1}{2\omega} \frac{1/\tau^2}{4\omega^2 + \frac{1}{\tau^2}} \tag{11}$$

All'ordine leading

$$a(t) = e^{i\omega t}$$

quindi per l'ampiezza di probabilità

$$\mathcal{A}_{i\to f} = -\frac{\omega_1}{2\omega} a(t) + b(t) = e^{-i\omega t} \frac{\omega_1}{2\omega} \frac{1/\tau^2}{4\omega^2 + \frac{1}{\tau^2}} \tag{12}$$

e quindi per la probabilità (10)

$$P_{i\to f} = \frac{\omega_1^2}{4\omega^2} \left| \frac{1}{4\omega^2\tau^2 + 1} \right|^2 \tag{13}$$

Correttamente la probabilità riproduce i limiti elencati nella risposta b).

Per la trattazione perturbativa standard notiamo che $f(t)$ è continua ed effettuando la derivata

$$\frac{\partial V}{\partial t} = -\hbar\omega_1 \frac{1}{2\tau} e^{-|t|/\tau} \tag{14}$$

Siccome $\omega_{fi} = 2\omega$, la (5) si scrive

$$\begin{aligned} P_{i\to f} &= \frac{\omega_1^2}{4\omega^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\tau} e^{-|t|/\tau} e^{2i\omega t} dt \right|^2 = \frac{\omega_1^2}{4\omega^2} \left| \frac{1}{2\tau} \left(\frac{1}{2i\omega + \frac{1}{\tau}} - \frac{1}{2i\omega - \frac{1}{\tau}} \right) \right|^2 \\ &= \frac{\omega_1^2}{4\omega^2} \left| \frac{1/\tau^2}{4\omega^2 + 1/\tau^2} \right|^2 \end{aligned}$$

che coincide con la (13).

Problema 1 - MQ1

L'esagono ha una lunghezza totale $L_e = 6L$, e su questo percorso unidimensionale l'elettrone può muoversi come una particella libera, soggetta alla condizione di periodicità. Le autofunzioni sono della forma

$$\psi(x) = A \exp(ikx)$$

x indica la coordinata lungo l'esagono.

La condizione di periodicità è

$$\psi(x + L_e) = \psi(x)\,; \Rightarrow k_n L_e = 2n\pi \quad \Rightarrow \quad k_n = \frac{2n\pi}{L_e}\,; \qquad n \in Z$$

I livelli energetici sono

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{4\pi^2}{L_e^2} n^2$$

il livello $n = 0$ è non degenere, gli altri sono due volte degeneri. Per il problema considerato,

$$L_e = 6 \cdot 1.4 = 8.4\,\text{Å}$$

per cui

$$\Delta E = \frac{150.8\,\text{eV}}{8.4^2}(2^2 - 1) \simeq 6.4\,\text{eV}.$$

Problema 2 - MQ1

1 Se il campo è diretto lungo l'asse z l'Hamiltoniana è

$$H = -\mu B \sigma_z \tag{15}$$

che commuta con le rotazioni attorno all'asse z, quindi s_z si conserva (è proporzionale all'Hamiltoniana).

2 Gli autovalori sono (spin in sù in giù):

$$E_+ = -\mu B \qquad E_- = \mu B \tag{16}$$

I relativi autostati

$$w_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \; ; \quad w_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \; . \tag{17}$$

3 Una rotazione antioraria di θ attorno all'asse y porta il versore dell'asse z sul versore $\mathbf{n}$, quindi lo stato descritto nel testo è

$$\psi = e^{-i\frac{\theta}{2}\sigma_y} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \tag{18}$$

Verifichiamo che lo stato è un autovalore di $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$ con autovalore $+1$

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \sin\theta\sigma_x + \cos\theta\sigma_z = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ \sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix}$$

quindi

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}\,\psi = \begin{pmatrix} \cos\theta\cos\frac{\theta}{2} + \sin\theta\sin\frac{\theta}{2} \\ \sin\theta\cos\frac{\theta}{2} - \cos\theta\sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \qquad \text{c.v.d.}$$

4 Si ha

$$\psi = \cos\frac{\theta}{2} w_+ + \sin\frac{\theta}{2}\, w_-$$

quindi l'evoluzione temporale è

$$\psi(t) = \cos\frac{\theta}{2} e^{i\mu B/\hbar t}\, w_+ + \sin\frac{\theta}{2}\, e^{-i\mu Bt/\hbar}\, w_- = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2}\, e^{i\mu B/\hbar t} \\ \sin\frac{\theta}{2}\, e^{-i\mu B/\hbar t} \end{pmatrix} \tag{19}$$

5 Si ha

$$\langle\psi|\sigma_z|\psi\rangle = \cos^2\frac{\theta}{2} - \sin^2\frac{\theta}{2} = \cos\theta \tag{20}$$

costante nel tempo, come aspettato.

Per le altre componenti, posto $\Omega = \mu B/\hbar$:

$$\langle\psi|\sigma_x|\psi\rangle = (\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\Omega t}, \sin\frac{\theta}{2}e^{i\Omega t}) \begin{pmatrix} \sin\frac{\theta}{2}\, e^{-i\Omega t} \\ \cos\frac{\theta}{2}\, e^{i\Omega t} \end{pmatrix} = \sin\theta\, \cos(2\Omega t)$$

$$\langle\psi|\sigma_y|\psi\rangle = (\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\Omega t}, \sin\frac{\theta}{2}e^{i\Omega t}) \begin{pmatrix} -i\, \sin\frac{\theta}{2}\, e^{-i\Omega t} \\ i\, \cos\frac{\theta}{2}\, e^{i\Omega t} \end{pmatrix} = -\sin\theta\sin(2\Omega t)$$

Come si vede si ha un moto di precessione orario. Questo è in accordo con la descrizione classica del moto per un momento magnetico. Classicamente si ha un momento delle forse $\boldsymbol{\mu}\wedge\mathbf{B}$ e quindi ($\hbar\mathbf{S}$ è il momento angolare)

$$\hbar\frac{d\mathbf{S}}{dt} = \boldsymbol{\mu}\wedge\mathbf{B} \tag{21}$$

con la nostra definizione

$$\boldsymbol{\mu} = \mu\,\boldsymbol{\sigma} = \frac{2\mu}{\hbar}\hbar\,\mathbf{s}$$

e quindi la (21) diventa

$$\frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt} = \frac{2\mu}{\hbar}\,\boldsymbol{\mu}\wedge\mathbf{B}$$

che è descrive appunto una precessione oraria con velocità angolare $2\mu B/\hbar = 2\,\Omega$