Prova Scritta di Meccanica Quantistica

09 gennaio 2013 (A.A. 12/13)

Per MQI, risolvere il Problema 1; per MQII o per il corso annulae di MQ, risolvere il Problema 2.

Tempo a disposizione: 3 ore

Problema 1.

Sia H_0 l'Hamiltoniana di una particella di spin zero in un potenziale a simmetria centrale $V(r)$, l'equazione di Schrödinger è

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H_0 \psi \, . \tag{1}$$

(i) Nel caso di un oscillatore armonico isotropo,

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\mathbf{r}^2, \tag{2}$$

si scrivano le energie e le degenerazioni dei primi due livelli del sistema.

Tornando al caso di generico $V(r)$, supponiamo ora di effettuare una trasformazione unitaria generica, dipendente dal tempo, $S(t) = S(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t)$:

$$\psi' = S(t)\,\psi \, , \qquad S S^\dagger = S^\dagger S = \mathbf{1} \, . \tag{3}$$

(ii) Si scriva l'equazione di Schrödinger per ψ'

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi' = H' \psi' \tag{4}$$

e si trovi la nuova Hamiltoniana H' in termini di H_0, $S(t)$ e $\frac{\partial}{\partial t} S(t)$.

(iii) Supponiamo di voler descrivere l'evoluzione del sistema in un sistema di riferimento che ruota con velocità angolare costante Ω, in senso antiorario, attorno all'asse z. In questo caso la trasformazione $S(t)$ è data da

$$S(t) = e^{i L_z \Omega t} \, . \tag{5}$$

Si trovi la corrispondente Hamiltoniana H'.

(iv) Il sistema di riferimento ruotato, descritto da H', resta a simmetria centrale o no? La parità è una simmetria del sistema?

(v) Ritornando al caso specifico dell'oscillatore armonico isotropo (2), si scrivano i corrispondenti autovalori di H' nel sistema di riferimento ruotato: come cambia lo spettro (dei primi stati di cui al punto (i))?

(vi) Ci si chiede se sia possibile, nel sistema ruotante, scegliere una velocità angolare Ω in modo tale che sullo stato fondamentale

$$\langle \psi_0 | x | \psi_0 \rangle \neq 0 \; :$$

x è la coordinata nel sistema ruotante.

Problema 2.

Una particella di massa m e carica e è si muove in un potenziale $V(r)$ che si annulla per $r > a$. Il potenziale ha uno stato legato la cui funzione d'onda, per $r > a$ ha la forma:

$$\psi_0(\mathbf{r}) = \left(\frac{\kappa}{2\pi}\right)^{1/2} \frac{e^{-\kappa r}}{r}, \qquad \kappa = \frac{\sqrt{-2mE_0}}{\hbar} \tag{6}$$

dove $E_0(< 0)$ è l'energia dello stato legato. Questo sistema è sottoposto ad un campo elettrico

$$\mathcal{E} = (\varepsilon \sin \omega t, 0, 0), \qquad \varepsilon = \text{cost.} \tag{7}$$

a partire da $t = 0$. Si vuole studiare la probabilità (per intervallo unitario di tempo) di ionizzazione in teoria delle perturbazioni, assumendo che lo stato finale possa essere approssimato con un'onda piana.

(i) Considerando solo la regione $r > a$ (dove $V \equiv 0$), giustificare la forma della funzione d'onda (6), data l'energia $E_0(< 0)$, e specificare il momento angolare dello stato.

(ii) Determinare la soglia per ω perché avvenga la ionizzazione.

(iii) Determinare la distribuzione angolare della particella emessa, utilizzando solo argomenti di simmetria (i.e., il teorema di Wigner-Eckart).

(iv) Calcolare la distribuzione in $\mathbf{p} = (p, \theta, \phi)$ utilizzando la regola di Fermi, e integrando, trovare il rate di ionizzazione. Commentare sulla distribuzione angolare della particella, paragonando il calcolo esplicito con la conclusione del punto (iii).

Nota: Per il calcolo del punto (iv), si assuma che la forma della funzione d'onda (6) sia valida per tutti i valori di r, $r > 0$. (Questo corrisponde al caso di un potenziale delta all'origine.)

Formulario

$$\int d^3r\, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \frac{e^{-\kappa r}}{r} = \frac{4\pi}{\mathbf{k}^2 + \kappa^2}\,. \tag{8}$$

$$dW_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{fi}|^2 \,\delta(E_f - E_i - \hbar\omega)\, d\Phi\,. \tag{9}$$

Densità di stati: per una particella libera tridimensionale, $\psi = e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}$

$$d\Phi = \frac{dp\, p^2\, d\Omega}{(2\pi\hbar)^3}, \tag{10}$$

Soluzione

Problema 1.

1. Le energie sono
$$E_{n_1,n_2,n_3} = \frac{3}{2}\hbar\omega + \hbar\omega(n_1+n_2+n_3) = \frac{3}{2}\hbar\omega + N\hbar\omega; \qquad \text{deg.} = \frac{1}{2}(N+1)(N+2) \tag{11}$$
$(N = n_1+n_2+n_3.)$

2. Derivando:
$$i\hbar\partial_t\psi' = SH_0\psi + i\hbar(\partial_t S)\psi = SH_0S^{-1}\psi' + i\hbar(\partial_t S)S^{-1}\psi'$$
quindi
$$H' = SH_0S^{-1} + i\hbar(\partial_t S)S^{-1} \tag{12}$$

3. Una rotazione antioraria del sistema di riferimento è equivalente ad una rotazione oraria degli stati, per cui
$$S(t) = \exp(iL_z\Omega t) \tag{13}$$
Per un potenziale centrale H_0 è invariante sotto rotazioni, i.e., H_0 commuta con S, quindi
$$H' = H_0 - \hbar\Omega L_z \tag{14}$$

4. La nuova Hamiltoniana è
$$H' = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 - \hbar\Omega L_z \tag{15}$$
che ha solo simmetria cilindrica, ed è invariante sotto parità.

5. I primi due livelli hanno funzioni d'onda proporzioanli a
$$\exp(-\alpha r^2)\ (1, z, x+iy, x-iy)$$
con L_z rispettivamente $(0,0,1,-1)$. Quindi il livello fondamentale resta invariato mentre il primo eccitato nel sistema ruotante si divide in 3
$$E'_0 = E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega \qquad E'_{1,0} = E_{1,0} = \frac{3}{2}\hbar\omega + \hbar\omega$$
$$E'_{1,1} = \frac{3}{2}\hbar\omega + \hbar\omega - \hbar\Omega \qquad E'_{1,-1} = \frac{3}{2}\hbar\omega + \hbar\omega + \hbar\Omega$$

6. Per avere $\langle x\rangle \neq 0$ occorre avere una degenerazione fra stati a parità diversa. Vediamo che per $\Omega = \omega$ il livello fondamentale diventa degenere con la componente con $L_z = 1$ del primo eccitato. Una funzione d'onda del tipo, ad esempio
$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_0 + \psi_{1,1})$$
ammette un valor medio non nullo per x.

Problema 2.

(i)

$$\Delta H = \frac{e\varepsilon}{2i}\, x e^{i\omega t} + h.c. \tag{16}$$

L'ionizzazione richiede che l'energia finale, $\omega\hbar + E_0$ sia positiva:

$$\omega \geq -\frac{E_0}{\hbar} = \frac{\kappa^2\hbar}{2m}\,, \qquad (E_0 = -\frac{\kappa^2\hbar^2}{2m}).$$

(ii) Visto che lo stato iniziale è in onda S, mentre la perturbazione è

$$\propto x \propto T_{1,1} - T_{1,-1},$$

per il teorema di Wigner-Eckart lo stato finale è nella stessa combinazione di tensori sferici: la distribuzione angolare di $\mathbf{p}$ finale è data da:

$$\text{cost.}.\, d\Omega\, |Y_{1,1} - Y_{1,-1}|^2 = d\Omega\, \frac{3}{4\pi} \sin^2\theta \cos^2\phi = d\phi\, d\theta\, \frac{3}{4\pi}\, \sin^3\theta\, \cos^2\phi$$

$$\int d\Omega\, \frac{3}{4\pi} \sin^2\theta \cos^2\phi = 1\,.$$

(iii)

$$dw = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i - \omega\hbar) d\Phi;$$

Ponendo

$$\eta = \frac{e\varepsilon}{2i}, \tag{17}$$

$$\begin{aligned}
F_{fi} &= \eta \int d^3r\, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\, x \left(\frac{\kappa}{2\pi}\right)^{1/2} \frac{e^{-\kappa r}}{r} \\
&= \eta \left(\frac{\kappa}{2\pi}\right)^{1/2} i \frac{\partial}{\partial k_x} \int d^3r\, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \frac{e^{-\kappa r}}{r} \\
&= \eta \left(\frac{\kappa}{2\pi}\right)^{1/2} i \frac{\partial}{\partial k_x} \frac{4\pi}{\mathbf{k}^2 + \kappa^2} = -8\pi i \eta \left(\frac{\kappa}{2\pi}\right)^{1/2} \frac{k_x}{(\mathbf{k}^2 + \kappa^2)^2} \\
&= -8\pi\hbar^3\, \eta\, i \left(\frac{\kappa}{2\pi}\right)^{1/2} \frac{p_x}{(\mathbf{p}^2 + \kappa^2\hbar^2)^2}
\end{aligned} \tag{18}$$

$$d\Phi = \frac{dp\, p^2\, d\Omega}{(2\pi\hbar)^3}, \qquad \delta(E_f - E_i - \omega\hbar) = \frac{m}{p}\delta(p - p^*), \qquad p^* = \sqrt{2m(\omega\hbar + E_0)}\,.$$

Perciò

$$dw = \frac{2\pi}{\hbar} 64\pi^2\hbar^6 |\eta|^2 \frac{\kappa}{2\pi} \frac{p_x^2}{(p^2 + \kappa^2\hbar^2)^4} \delta(p - p^*) \frac{m\, p\, dp\, d\Omega}{(2\pi\hbar)^3}, \qquad p^* = \sqrt{2m(\omega\hbar + E_0)}.$$

La distribuzione in impulso è data da (a parte normalizzazione)

$$\frac{p_x^2}{(p^2 + \kappa^2\hbar^2)^4} \delta(p - p^*) \frac{m\, p\, dp\, d\Omega}{(2\pi\hbar)^3}, \qquad p^* = \sqrt{2m(\omega\hbar + E_0)}.$$

La distribuzione angolare $\propto p_x^2 \propto \sin^2\theta \cos^2\phi$ coincide con quella ottenuta al punto (ii); integrando su p usando la funzione delta, si ha

$$w = \frac{32\,\kappa\, |\eta|^2 \hbar^2\, m\, p^{*3}}{3\, (p^2 + \kappa^2\hbar^2)^4}, \qquad p^* = \sqrt{2m(\omega\hbar + E_0)}, \qquad |\eta| = \left|\frac{e\varepsilon}{2}\right|,$$