Prova Scritta di Meccanica Quantistica

Università di Pisa,

11 gennaio 2016 (A.A. 15/16)

Tempo a disposizione: 3 ore.

Problema 1

Due particelle di spin $\frac{1}{2}$ si muovono in una retta $(-\infty < z < \infty)$, interagendo tra loro con un potenziale dipendente da spin,

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + H' , \qquad H' = f\left[3(\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{r})(\mathbf{s}_2 \cdot \mathbf{r}) - (\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2)\mathbf{r}^2\right] , \tag{1}$$

dove $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 = (0, 0, z)$. $f > 0$.

(i) Considerando prima $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$, $\mathbf{r}$ (quindi z) come parametri fissi, e di conseguenza trascurando i termini cinetici, trovare gli autovalori e gli autostati di H'. Suggerimento: esprimete H' in termini di operatore di spin totale, $\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$.

(ii) Sempre considerando z come una costante, si trovi la probabilità che gli spin, inizialmente ($t = 0$) nello stato

$$\chi = |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle , \tag{2}$$

si trovino nello stato

$$\chi = |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle , \tag{3}$$

all'istante t.

(iii) Ora considerando z come una variabile dinamica, discutere lo spettro del sistema, (1).

N.B. Anche se il moto spaziale delle particelle è vincolato alla retta $(0, 0, z)$, $-\infty < z < \infty$, le variabili di spin hanno tre componenti, i.e., $\mathbf{s}_1 = (s_{1x}, s_{1y}, s_{1z})$.

Problema 2

Si considerino le transizioni tra i primi cinque livelli più bassi di Ca^+ $(Z = 20)$,

$$4s_{1/2}\,, 3d_{3/2}\,, 3d_{5/2}\,, 4p_{1/2}\,, 4p_{3/2}, \tag{4}$$

in ordine crescente dell'energia, dove gli indici stanno per il valore J.

Le interazioni tra il campo di radiazione elettromagnetica e un atomo sono descritte da:

$$H_I = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E} - \mu \cdot \mathbf{B} - \frac{1}{6} Q_{ij}\, \partial_i E_j + \ldots, \tag{5}$$

dove

$$\mathbf{d} = \sum_a e\, \mathbf{r}^a \; ; \qquad \mu = \sum_a \frac{e\hbar}{2mc} (\mathbf{L} + g\, \mathbf{s})^a \; ; \qquad Q_{ij} = \sum_a e\, (r_i^a r_j^a - \frac{1}{3} \delta_{ij} (r^a)^2\,) \tag{6}$$

sono operatori del dipolo elettrico, del dipolo magnetico e del quadrupolo elettrico, e il campo di radiazione è dato da

$$\mathbf{A} = A_0 \varepsilon\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\omega t} + c.c.\,, \qquad (\omega = kc)\,, \tag{7}$$

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = i\frac{\omega}{c}A_0\,\varepsilon\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-i\omega t} + h.c.\,; \qquad \mathbf{B} = \nabla\times\mathbf{A} = iA_0\,\mathbf{k}\times\varepsilon\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-i\omega t} + h.c.\,, \tag{8}$$

$$\partial_i E_j = -\frac{\omega}{c}A_0\,\varepsilon_i k_j\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-i\omega t} + h.c. \tag{9}$$

Il primo termine della (5) con l'approssimazione

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \simeq 1 \tag{10}$$

in (8) è responsabile per le transizioni di dipolo (elettrico). Il secondo e il terzo termini, con la stessa approssimazione in (8), (9), spiegano transizioni di dipolo magnetico e di quadrupolo elettrico. Denotiamo i rate (le probabilità di transizioni nell'intervallo unitario di tempo) nei tre casi genericamente con $w^{d.e.}$, $w^{d.m.}$, $w^{q.e.}$, rispettivamente.

(i) Come si giustifica l'approssimazione, (10)?

(ii) Stimare l'ordine di grandezza per i rates relativi

$$w^{d.m.}/w^{d.e.}\,; \quad w^{q.e.}/w^{d.e.} \tag{11}$$

tra i tre tipi di transizioni, al primo ordine di perturbazione in H_I, ed a parità di intensità A_0 e di scarto di energia (approssimativamente) nella transizione, $E_f \leftrightarrow E_i$.

(iii) Elencare le regole di selezioni su ΔJ, ΔL, ΔS e sulla parità, per i tre tipi di transizione, d.e., d.m., e q.e.

(iv) Tenendo conto di tali regole di selezione dire quale tipo di meccanismi d.e., d.m., o q.e. domina ciascuna delle dieci transizioni possibili, $f \leftrightarrow i$, dove i, f sono due qualsiasi dei livelli, (4).

Soluzione

1 Problema 1

$$H^{'} = \frac{f\,z^2}{2}\left[3(S_z^2 - \frac{\mathbf{1}}{2}) - (\mathbf{S}^2 - \frac{3}{4}\mathbf{1} - \frac{3}{4}\mathbf{1})\right] = \frac{f\,z^2}{2}\left(3S_z^2 - \mathbf{S}^2\right) \tag{12}$$

(i)

$$H^{'} = \frac{fz^2}{2}\left[3(S_z^2 - \frac{\mathbf{1}}{2}) - (\mathbf{S}^2 - \frac{3}{4}\mathbf{1} - \frac{3}{4}\mathbf{1})\right] = \frac{f\,z^2}{2}\left[3S_z^2 - \mathbf{S}^2\right]\ . \tag{13}$$

H' commuta con S_z e con $\mathbf{S}^2$: gli autostati e gli atutovalori sono

$$E_{1,\pm1} = \frac{f\,z^2}{2}\ ; \quad |S,S_z\rangle = |1,\pm1\rangle\ ; \tag{14}$$

$$E_{1,0} = -f\,z^2\ ; \quad |S,S_z\rangle = |1,0\rangle\ ; \tag{15}$$

$$E_{0,0} = 0\ ; \quad |S,S_z\rangle = |0,0\rangle\ ; \tag{16}$$

(ii)

$$\chi = |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,0\rangle + |0,0\rangle) \tag{17}$$

che evolve come

$$\chi \to \chi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{if\,z^2\,t/\hbar}|1,0\rangle + |0,0\rangle)) = e^{if\,z^2\,t/2\hbar}(\cos\tfrac{f\,z^2\,t}{2\hbar}\,|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle + i\,\sin\tfrac{f\,z^2\,t}{2\hbar}\,|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle) \tag{18}$$

$$P_{|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle} = \sin^2\tfrac{f\,z^2\,t}{2\hbar} \tag{19}$$

(iii) Visto che S_z e $\mathbf{S}^2$ commutano con H, si può analizzare lo spettro nella base di stati di spin, $|S,S_z\rangle = |1,\pm1\rangle$; $|S,S_z\rangle = |1,0\rangle$; $|0,0\rangle$;. Nello stato di $|S,S_z\rangle = |1,\pm1\rangle$, separando il C.M. (che esegue un moto libero), si ha, per il sistema relativo,

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{f\,z^2}{2}\ ; \qquad \mu = \frac{m}{2} \tag{20}$$

che è un oscillatore armonico, con i livelli di energia,

$$E_n = \omega\hbar(n + \frac{1}{2})\ , \qquad \omega = \sqrt{\frac{f}{\mu}} = \sqrt{\frac{2f}{m}}\ . \tag{21}$$

Nello stato di $|S,S_z\rangle = |1,0\rangle$, separando sempre il C.M., si ha,

$$H = \frac{p^2}{2\mu} - f\,z^2\ ; \tag{22}$$

che è un sistema instabile (non esiste uno stato fondamentale.) Le particelle si allontanano una dall'altra indefinitivamente.

Nello stato di $|S,S_z\rangle = |0,0\rangle$, invece, il sistema è

$$H = \frac{p^2}{2\mu}\ : \tag{23}$$

sia il moto di C.M. che il moto relativo è libero. Lo spettro del moto relativo è

$$E = \frac{p^2}{2\mu}\ , \qquad -\infty < p < \infty, \qquad \therefore \quad E \geq 0. \tag{24}$$

Il fatto che il sistema descrive due particelle libere (i.e., $H' = 0$) per lo stato di $S = 0$ può essere visto anche direttamente dalla (1), ponendo $\mathbf{s}_2 = -\mathbf{s}_1$.

Problema 2

(i) Prendendo

$$r \sim r_B \; ; \qquad k = \omega/c = \omega\hbar/c\hbar = \frac{|E_f - E_i|}{\hbar c} \sim \frac{e^2}{r_B \hbar c} \; , \tag{25}$$

si ha

$$kr \sim \frac{e^2}{\hbar c} = \alpha \sim O(10^{-2}) \; . \tag{26}$$

(ii) Secondo la formula di Fermi,

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} |\hat{F}_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i - \omega\hbar)\, d\Phi \; , \tag{27}$$

$w^{d.m.}/w^{d.e.}$ è perciò dato dal rapporto del quadrato dell'elemento di matrice quadrato,

$$\frac{|\langle f|\mu \cdot \mathbf{k} \times \varepsilon |i\rangle|^2}{|\langle f|\frac{\omega}{c} e\mathbf{r} \cdot \varepsilon |i\rangle|^2} \; . \tag{28}$$

dove il fattore comune di intensità è stata semplificata. Prendendo l'elemento di matrice r_i dell'ordine di grandezza di r_B, l'elemento di matrice $\mathbf{L} + g\,\mathbf{s}$ dell'ordine di grandezza di 1, si ha

$$w^{d.m.}/w^{d.e.} \sim \frac{(\frac{ke\hbar}{2mc})^2}{(\frac{e\omega r_B}{c})^2} = \frac{(\frac{\omega e\hbar}{2mc^2})^2}{(\frac{e\omega\hbar^2}{me^2c})^2} = (\frac{e^2}{2\hbar c})^2 = \frac{1}{4}\alpha^2 \sim O(10^{-4}) \; . \tag{29}$$

Analogamente

$$\partial_i E_j \propto \frac{\omega}{c} A_0 k_i \varepsilon_j \; ; \tag{30}$$

$$w^{q.e.}/w^{d.e.} \sim \frac{(\frac{e\omega r_B^2 kc}{c^2})^2}{(\frac{e\omega r_B}{c})^2} = \frac{(\frac{e\omega^2 r_B^2}{c^2})^2}{(\frac{e\omega\hbar^2}{me^2c})^2} = (\frac{\omega^2 r_B^2}{c})^2 \sim \alpha^2 \sim O(10^{-4}) \; ; \tag{31}$$

dove è stato usato

$$\omega = \frac{\omega\hbar}{\hbar} \sim \frac{e^2}{r_B \hbar} \; . \tag{32}$$

(iii) Per le transizioni d.e.,

$$\Pi_f = -\Pi_i \; , \qquad \Delta J = 0, \pm 1, \quad (J = 0 \nrightarrow J = 0) \; ; \qquad \Delta L = 0, \pm 1, \quad (L = 0 \nrightarrow L = 0) \; ; \tag{33}$$

Per le transizioni d.m.,

$$\Pi_f = \Pi_i \; , \qquad \Delta J = 0, \pm 1, \quad (J = 0 \nrightarrow J = 0) \; ; \qquad \Delta L = 0, \tag{34}$$

Per le transizioni q.e.,

$$\Pi_f = \Pi_i \; , \qquad \Delta J = 0, \pm 1, \pm 2 \quad (J = 0 \nrightarrow J = 0) \; ; \qquad \Delta L = 0, \pm 1, \pm 2 \; , \quad (L = 0 \nrightarrow L = 0) \; ; \tag{35}$$

e $\Delta S = 0$; per tutte le tre transizioni.

(iv)

$$4s_{1/2} \leftrightarrow 3d_{3/2} : \qquad q.e.$$
$$4s_{1/2} \leftrightarrow 3d_{5/2} : \qquad q.e.$$
$$4s_{1/2} \leftrightarrow 4p_{1/2} : \qquad d.e.$$
$$4s_{1/2} \leftrightarrow 4p_{3/2} : \qquad d.e.$$

$$3d_{3/2} \leftrightarrow 3d_{5/2}: \qquad d.m. \text{ oppure } q.e.$$

$$3d_{3/2} \leftrightarrow 4p_{1/2}: \qquad d.e.$$

$$3d_{3/2} \leftrightarrow 4p_{3/2}: \qquad d.e.$$

$$3d_{5/2} \leftrightarrow 4p_{1/2}: \qquad \text{proibita}$$

$$3d_{5/2} \leftrightarrow 4p_{3/2}: \qquad d.e.$$

$$4p_{1/2} \leftrightarrow 4p_{3/2}: \qquad d.m. \text{ oppure } q.e.$$