

Prova Scritta di Meccanica Quantistica

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

Tempo a disposizione: 3 ore

Per il Compitino II risolvere il Problema 2;

Per MQI, risolvere i Problemi 1 e 2;

Per MQII / MQ annuale, risolvere i Problemi 2 e 3, o in alternativa, 1 e 3.

Problema 1

Una particella di massa m si muove nella semiretta $x \in (0, \infty)$, sottoposta al potenziale

$$V(x) = \begin{cases} -g\delta(x-a), & x > 0, \\ \infty & x < 0. \end{cases} \quad (a > 0, g > 0) \quad (1)$$

Si vuole studiare lo spettro di questo sistema, in particolare, le proprietà di eventuali stati legati.

- (i) Scrivere le condizioni di continuità (o discontinuità) da imporre sulla funzione d'onda $\Psi(x)$, $\Psi'(x)$, a $x = a$.
- (ii) Per $E < 0$, scrivere la forma generale della funzione d'onda, tenendo conto solo della condizione al contorno a $x = +\infty$.
- (iii) Tenendo conto della condizione al punto (i) e della condizione al contorno a $x = 0$, trovare l'equazione implicita che determina l'energia di uno stato legato.
- (iv) Analizzando la detta equazione trovare il valore critico di a , $a = a_{cr}$, in termini di m, g, \hbar , dimostrando che il sistema ammette uno stato legato per $a > a_{cr}$; nessuno per $a \leq a_{cr}$.
- (v) Trovare approssimativamente l'energia dello stato legato, nei due limiti:
 - 1. a è appena al di sopra di a_{cr} , i.e., $(a - a_{cr})/a_{cr} \ll 1$.
 - 2. $a \gg a_{cr}$.
- (vi) Per quanto riguarda lo spettro continuo, $E \geq 0$, qual'è la degenerazione dei livelli?

Problema 2

Un sistema di due spin $\frac{1}{2}$ è descritto dalla funzione d'onda:

$$|\Psi\rangle = \frac{|\downarrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (2)$$

dove

$$s_z |\uparrow\rangle = \frac{1}{2} |\uparrow\rangle, \quad (3)$$

etc.

- (i) Esprimere lo stato (2) come una combinazione lineare di stati di spin totale, $|S_{tot}, S_{totz}\rangle$.
- (ii) Si misura

$$O = \mathbf{S}_{tot} \cdot \mathbf{B}, \quad (4)$$

dove $\mathbf{S}_{tot} = \mathbf{s}^{(1)} + \mathbf{s}^{(2)}$, $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ (\mathbf{B} è un vettore costante), nello stato di cui sopra. Dire quali sono i possibili risultati della misura, e con quali relative probabilità.

(iii) Si accende la seguente Hamiltoniana all'istante $t = 0$

$$H = f t \mathbf{s}^{(1)} \cdot \mathbf{s}^{(2)}, \quad (5)$$

(f è una costante). Determinare l'evoluzione temporale della funzione d'onda e trovare la probabilità che una misura di $s_z^{(1)}$ fatta ad un istante t ($t > 0$) dia il risultato $+\frac{1}{2}$.

Problem 3

Un atomo di idrogeno (carica dell'elettrone $= -e$) è immerso in un campo elettrico $\mathbf{E} = (0, 0, \mathcal{E})$ debole, dove \mathcal{E} è una costante.

(i) Scrivere il potenziale di perturbazione V corrispondente a tale campo esterno.

(ii) Dire quali elementi di matrice di V tra gli stati di $n = 2$,

$$|2, 0, 0\rangle, \quad |2, 1, 0\rangle, \quad |2, 1, 1\rangle, \quad |2, 1, -1\rangle, \quad (6)$$

sono non nulli. In quanti sottolivelli si divide il livello $n = 2$?

(iii) Calcolare le correzioni all'energia del livello $n = 2$ dovuto alla perturbazione V , al primo ordine in \mathcal{E} .

(iv) Dire come il campo elettrico di cui sopra influenza la riga di assorbimento della transizione

$$|n = 1\rangle \rightarrow |n = 2\rangle,$$

i.e., in quante linee questa linea (α di Lyman) si divide in generale, e con quale spostamento della lunghezza d'onda.

(v) In approssimazione di dipolo, dire come il numero delle righe cambia se

1. la luce ha la direzione di propagazione, $\hat{\mathbf{k}} = (0, 0, 1)$;
2. la luce non polarizzata ha la direzione di propagazione, $\hat{\mathbf{k}} = (0, 1, 0)$;
3. la luce ha la direzione di propagazione, $\hat{\mathbf{k}} = (0, 1, 0)$ ed è polarizzata linearmente con $\varepsilon = (0, 0, 1)$.

Formulario

$$\Psi_{(n,\ell,m)} = R_{n,\ell}(r) Y_{\ell,m}(\theta, \phi).$$

$$R_{1,0}(r) = 2 r_B^{-3/2} e^{-r/r_B},$$

$$R_{2,0}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2}} r_B^{-3/2} \left(2 - \frac{r}{r_B} \right) e^{-r/2r_B},$$

$$R_{2,1}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}} r_B^{-3/2} \frac{r}{r_B} e^{-r/2r_B}.$$

$$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}},$$

$$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta,$$

$$Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi},$$

$$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1),$$

$$Y_{2,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos \theta \sin \theta e^{\pm i\phi},$$

$$Y_{2,\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}.$$

Soluzioni

Problema 1.

(i) Il valore della funzione d'onda deve essere continuo,

$$\psi(a+) = \psi(a-) . \quad (7)$$

Integrando l'equazione di Schrödinger nell'intervallo $(a-\varepsilon, a+\varepsilon)$ si trova la condizione sulla derivata

$$\psi'(a+) - \psi'(a-) = -\frac{2mg}{\hbar^2} \psi(a) . \quad (8)$$

(ii)

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{\kappa x} + B e^{-\kappa x}, & 0 < x < a, \\ C e^{-\kappa x}, & x > a, \end{cases} \quad \kappa = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}} \quad (9)$$

(iii) La condizione al contorno a $x = 0$ è semplicemente $\psi(0) = 0$, i.e.,

$$A + B = 0 . \quad (10)$$

Le condizioni a $x = a$ sono:

$$A e^{\kappa a} + B e^{-\kappa a} = C e^{-\kappa a} ; \quad (11)$$

$$A e^{\kappa a} - B e^{-\kappa a} = -C e^{-\kappa a} \left(1 - \frac{2mg}{\kappa \hbar^2}\right) ; \quad (12)$$

La condizione perché (10)-(12) abbiano soluzioni non banali risulta

$$e^{-2\kappa a} + \frac{\kappa \hbar^2}{mg} - 1 = 0 . \quad (13)$$

Questa equazione determina κ quindi l'energia dello (eventuale) stato legato.

(iv) Dai grafici

$$y = e^{-2\kappa a}, \quad y = 1 - \frac{\kappa \hbar^2}{mg}, \quad (14)$$

si evince che per

$$a > a_{cr} = \frac{\hbar^2}{2mg} \quad (15)$$

i due grafici si intersecano a $\kappa > 0$ quindi il sistema ha uno stato legato; per

$$a \leq \frac{\hbar^2}{2mg} \quad (16)$$

l'unica intersezione è a $\kappa = 0$ quindi non ci sono stati legati.

(v) Dai grafici si vede che $\kappa \rightarrow 0+$ a $a \rightarrow a_{cr}+$, quindi κ è piccola per $(a - a_{cr})/a_{cr} \ll 1$. Sviluppando perciò la (13) in κ fino al secondo ordine, si ha

$$\kappa \simeq \frac{1}{2a^2} \left(2a - \frac{\hbar^2}{mg}\right) = \frac{1}{a^2} (a - a_{cr}) . \quad (17)$$

Nel limite opposto, il primo termine della (13) è piccola; la soluzione è vicina a

$$\kappa = \frac{mg}{\hbar^2} : \quad (18)$$

la soluzione del sistema senza la parete a $x = 0$. La prima correzione è data da

$$\kappa \simeq \frac{mg}{\hbar^2} (1 - e^{-2mga/\hbar^2}) . \quad (19)$$

- (vi) I livelli del continuo sono singoli. Utilizzando la condizione $\psi(0) = 0$, il teorema di non degenerazione nello spettro discreto (con $\psi \rightarrow 0$, a $x = \pm\infty$) può essere generalizzato in questi casi.

Problema 2.

i)

$$\Psi(0) = \frac{|\downarrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{|1,0\rangle - |0,0\rangle}{2} - \frac{|1,-1\rangle}{\sqrt{2}}; \quad (20)$$

ii)

$$O = \mathbf{S}_{tot} \cdot \mathbf{B} = B S_{tot,z}. \quad (21)$$

$$\Psi = \frac{|\downarrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{|S_{tot,z}=0\rangle - |S_{tot,z}=-1\rangle}{\sqrt{2}} \quad (22)$$

I possibili risultati della misura sono $S_{tot,z} = 0$ o $S_{tot,z} = -1$, con relative probabilità, $\frac{1}{2}$ per ambedue.

iii)

$$\mathbf{s}^{(1)} \cdot \mathbf{s}^{(2)} = \frac{1}{2} (\mathbf{S}_{tot}^2 - \frac{3}{4} - \frac{3}{4}) = \begin{cases} \frac{1}{4}, & S_{tot} = 1 \\ -\frac{3}{4}, & S_{tot} = 0. \end{cases} \quad (23)$$

L'equazione di Schrödinger è, per le componenti $S_{tot} = 1$ e $S_{tot} = 0$,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^{(1)}(t) = \frac{a}{4} t \Psi^{(1)}(t), \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^{(0)}(t) = -\frac{3a}{4} t \Psi^{(0)}(t). \quad (24)$$

Queste equazioni si risolvono facilmente introducendo la variable

$$T \equiv t^2 : \quad (25)$$

le equazioni sopra diventano

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial T} \Psi^{(1)}(t) = \frac{a}{8} \Psi^{(1)}(t), \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial T} \Psi^{(0)}(t) = -\frac{3a}{8} \Psi^{(0)}(t), \quad (26)$$

con la soluzione,

$$\Psi^{(1)}(t) = e^{-iat^2/8\hbar} \Psi^{(1)}(0), \quad \Psi^{(0)}(t) = e^{3iat^2/8\hbar} \Psi^{(0)}(0), \quad (27)$$

A $t = 0$

$$\Psi(0) = \frac{|\downarrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{|1,0\rangle - |0,0\rangle}{2} - \frac{|1,-1\rangle}{\sqrt{2}}; \quad (28)$$

all'istante t la funzione d'onda è

$$\begin{aligned} \Psi(t) &= e^{iat^2/8\hbar} \left[\frac{e^{-iat^2/4\hbar} |1,0\rangle - e^{iat^2/4\hbar} |0,0\rangle}{2} - \frac{e^{-iat^2/4\hbar} |1,-1\rangle}{\sqrt{2}} \right] \\ &= e^{iat^2/8\hbar} \left[\frac{-i \sin \frac{at^2}{4\hbar} |\uparrow\downarrow\rangle + \cos \frac{at^2}{4\hbar} |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} - \frac{e^{-iat^2/4\hbar} |\downarrow\downarrow\rangle}{\sqrt{2}} \right]. \end{aligned} \quad (29)$$

La probabilità richiesta è:

$$P(s_z^1 = \frac{1}{2}) = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{at^2}{4\hbar}. \quad (30)$$

Problema 3.

(i)

$$V = e\mathcal{E}z \quad (31)$$

(ii) V è un tensore sferico di rango 1,

$$\sim T_0^1.$$

Dal teorema di Wigner-Eckart si evince che gli unici elementi di matrice non nulli sono tra $|2,0,0\rangle$ e $|2,1,0\rangle$,

$$\langle 2,0,0|V|2,1,0\rangle, \quad \langle 2,1,0|V|2,0,0\rangle. \quad (32)$$

(iii) Secondo la teoria delle perturbazioni degenerare al primo ordine, le correzioni sono dati dagli autovalori della matrice

$$\langle 2,\ell,m|V|2,\ell',m'\rangle. \quad (33)$$

Ora

$$\begin{aligned} \langle 2,0,0|V|2,1,0\rangle &= e\mathcal{E} \int dr r^2 R_{2,0} r R_{2,1} \int d\cos\theta d\phi Y_{0,0}^* \cos\theta Y_{1,0} \\ &= -3e\mathcal{E} r_B = \langle 2,1,0|V|2,0,0\rangle \end{aligned} \quad (34)$$

$$\Delta E = \pm 3e\mathcal{E} r_B, \quad |\Psi_{1,2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2,1,0\rangle \pm |2,0,0\rangle), \quad (35)$$

$$\Delta E = 0, \quad |\Psi_{3,4}\rangle = |2,1,\pm 1\rangle \quad (36)$$

(iv) Il livello $n = 1$, $|\Psi_0\rangle = |\Psi_{1,0,0}\rangle$ non è corretto al primo ordine in \mathcal{E} . La riga $n = 1 \rightarrow n = 2$ si divide in tre righe con le lunghezze d'onda

$$\frac{hc}{E_2 - E_1}, \quad |\Psi_0\rangle \rightarrow |\Psi_{3,4}\rangle, \quad (37)$$

$$\frac{hc}{E_2 - E_1 + \Delta E}, \quad |\Psi_0\rangle \rightarrow |\Psi_2\rangle, \quad \frac{hc}{E_2 - E_1 - \Delta E}, \quad |\Psi_0\rangle \rightarrow |\Psi_1\rangle, \quad (38)$$

(v) L'ampiezza di transizione è proporzionale a

$$\langle \Psi_{finale} | \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{r} | \Psi_{iniziale} \rangle :$$

segue che il numero delle righe N è:

1. $N = 1$ se la luce ha la direzione di propagazione, $\hat{\mathbf{k}} = (0,0,1)$, poiché le uniche transizioni possibili sono $|\Psi_0\rangle \rightarrow |\Psi_{3,4}\rangle$;
2. $N = 3$ se la luce non polarizzata ha la direzione di propagazione, $\hat{\mathbf{k}} = (0,1,0)$ perché in questo caso le polarizzazioni sono in direzioni $\boldsymbol{\varepsilon} = (1,0,0), (0,0,1)$: transizioni sono possibili su tutti gli stati $\Psi_{1,2,3,4}$;
3. $N = 2$ se la luce ha la direzione di propagazione, $\hat{\mathbf{k}} = (0,1,0)$ ed è polarizzata linearmente in direzione $\boldsymbol{\varepsilon} = (0,0,1)$, poiché le uniche transizioni possibili sono $|\Psi_0\rangle \rightarrow |\Psi_{1,2}\rangle$.