Prova Scritta di Meccanica Quantistica

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

MQI e il compitino mensile del corso annuale: risolvere il Problema 1 e il Problema 2, (i), (ii), (vi).
MQII o il corso annulae di MQ: risolvere il Problema 2.

Tempo a disposizione: 3 ore

Problema 1.

Una particella di massa m si muove in una dimensione, sottosposta ad una forza costante, F.

(i) Si scriva l'Hamiltoniana del sistema.

(ii) Lo stato della particella a $t = 0$ è descritto da una funzione d'onda $\psi(x) = \psi(x, 0)$ reale, con $\langle x \rangle = 0$, che decresce rapidamente a $x \to \pm\infty$. Si dimostri che necessariamente (a $t = 0$)

$$\langle p \rangle = 0 \,, \qquad \langle xp + px \rangle = 0 \tag{1}$$

dove $\langle ... \rangle$ indica il valor medio sullo stato ψ.

(iii) Si scrivano le equazioni di Heisenberg per $x_H(t)$ e $p_H(t)$ e le si risolvano.

(iv) Si calcolino in funzione di tempo t i valori di aspettazione di x, p all'istante t

$$\langle x \rangle = \langle \psi(t) | x | \psi(t) \rangle, \qquad \langle p \rangle = \langle \psi(t) | p | \psi(t) \rangle, \tag{2}$$

usando il risultato dei punti precedenti.

(v) Si calcolino in funzione di tempo t i valori di aspettazione di

$$(\Delta x)^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle, \qquad (\Delta p)^2 = \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle, \tag{3}$$

usando i risultati precedenti, ed esprimendo il risultato in termini di $(\Delta x)_0$, $(\Delta p)_0$ (indeterminazione al tempo $t = 0$) e t. Si valuti il prodotto $\Delta x \cdot \Delta p$ per grandi t.

Problema 2

Il positronio è uno stato legato di un elettrone (carica $-e$ e massa m_e) e di un positrone (antielettrone, carica $+e$ e massa m_e). Le parità intrinseche delle due particelle sono opposte.

(i) Determinare in approssimazione non relativistica le energie degli stati legati del sistema ed indicare le parità degli stati.

Le correzioni relativistiche dipendenti dallo spin hanno la forma

$$V = V_1 + V_2 + V_3 \tag{4}$$

con

$$V_1 = 6\mu_0^2 \frac{1}{r^3} \mathbf{L}\cdot\mathbf{S}\,; \quad V_2 = 4\pi\mu_0^2 \frac{14}{3} \mathbf{s}_1\cdot\mathbf{s}_2\, \delta^3(\mathbf{r})\,; \quad V_3 = 6\mu_0^2 \frac{1}{r^3} \left(\frac{(\mathbf{S}\cdot\mathbf{r})(\mathbf{S}\cdot\mathbf{r})}{r^2} - \frac{1}{3}\mathbf{S}^2 \right) \tag{5}$$

dove si è posto $\mu_0 = e\hbar/(2m_e c)$, e

$$\mathbf{S} \equiv \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2\,. \tag{6}$$

N.B. Il potenziale V_3 è presente solo negli stati con $L \neq 0$.

(ii) Spiegare perché è lecito classificare i livelli del positronio in parapositronio ($S = 0$) e ortopositronio ($S = 1$).

(iii) Calcolare l'effetto della perturbazione (4) sul livello fondamentale $1s$.

(iv) Calcolare l'effetto dei termini V_1 e V_2 per i livelli $2s$ e $2p$.

(v) Dire se V_3 commuta con

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}\,. \tag{7}$$

Spiegare su quale dei livelli $2s, 2p$ ha effetto il termine V_3 al primo ordine della perturbazione, giustificando la risposta (N.B. non è richiesto il calcolo di ΔE.)

(vi) Limitatamente al livello $1s$, e ritenendo solo il potenziale V_2 in V, considerare l'effetto di un campo magnetico esterno costante uniforme, $\mathbf{B} = (0,0,B)$. L'Hamiltoniana in questo caso è ($\mu = m_e/2$)

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r} + 4\pi\mu_0^2 \frac{14}{3} \mathbf{s}_1\cdot\mathbf{s}_2\, \delta^3(\mathbf{r}) + \frac{eB}{m_e c}\,(s_{1z} - s_{2z}) \tag{8}$$

Dire se $\mathbf{S}^2$ commuta con H. Dire se S_z è conservato. Discutere lo stato di spin nello stato fondamentale, nei due limiti di grande e piccolo B.

Formulario (con $r_B = 1$)

$$\int_0^\infty dr\, r^2 R_{2,0}^2 = \int_0^\infty dr\, r^2 R_{2,1}^2 = 1; \qquad \int_0^\infty dr\, r R_{2,0}^2 = \int_0^\infty dr\, r R_{2,1}^2 = 1/4, \tag{9}$$

$$\int_0^\infty dr\, R_{2,0}^2 = 1/4, \quad \int_0^\infty dr\, R_{2,1}^2 = 1/12; \qquad \int_0^\infty dr\, \frac{1}{r} R_{2,0}^2 = \infty, \quad \int_0^\infty dr\, \frac{1}{r} R_{2,1}^2 = 1/24\,. \tag{10}$$

$$\psi_{1s}(\mathbf{r}) = \psi_{100}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}; \qquad \psi_{2s}(\mathbf{r}) = \psi_{200}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} (2-r) e^{-r/2}; \tag{11}$$

Soluzione

Problema 1.

(i)

$$H = \frac{p^2}{2m} - F\,x\,. \tag{12}$$

(ii) p, $xp+px$ sono operatori Hermitiani: il loro valor medio in uno stato qualsiasi è reale. Ma per ψ reale, sia $\langle p\rangle$ che $\langle xp+px\rangle$ sono chiaramente numeri immaginari puri. L'unico numero simultaneamente reale e immaginario puro è 0. Per dimostrarlo esplicitamente, per ψ reale, vale

$$\langle p\rangle = \int dx\,\psi^*(x)\,(-i\hbar)\frac{\partial}{\partial x}\psi(x) = -\frac{i\hbar}{2}\int dx\,\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)^2 = 0\,; \tag{13}$$

$$\langle xp+px\rangle = \int dx\,\psi^*(x)\,[x(-i\hbar)\frac{\partial}{\partial x} + (-i\hbar)\frac{\partial}{\partial x}x]\,\psi(x) = -i\hbar\int dx\,\frac{\partial}{\partial x}(x\,\psi^2) = 0 \tag{14}$$

per una funzione d'onda che tende a zero sufficientemente rapidamente.

(iii)

$$H = \frac{p_H^2}{2m} - F\,x_H \tag{15}$$

$$\dot{x}_H = \frac{1}{i\hbar}[x_H, H] = \frac{p_H}{m}; \qquad \dot{p}_H = \frac{1}{i\hbar}[p_H, H] = F. \tag{16}$$

La soluzione è

$$p_H(t) = p + F\,t; \qquad x_H(t) = x + \frac{p}{m}\,t + \frac{F}{2m}\,t^2\,. \tag{17}$$

(iv)

$$\bar{p}(t) = \langle\psi(t)|p|\psi(t)\rangle = \langle\psi(0)|p_H(t)|\psi(0)\rangle = F\,t; \tag{18}$$

$$\bar{x}(t) = \langle\psi(t)|x|\psi(t)\rangle = \langle\psi(0)|x_H(t)|\psi(0)\rangle = \frac{F}{2m}\,t^2 \tag{19}$$

(v)

$$\begin{aligned}(\Delta p(t))^2 &= \langle\psi(t)|(p-\bar{p}(t))^2|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t)|p^2|\psi(t)\rangle - \bar{p}(t)^2 = \langle\psi(0)|p_H(t)^2|\psi(0)\rangle - \bar{p}(t)^2\\ &= \langle\psi(0)|(p+F\,t)^2|\psi(0)\rangle - \bar{p}(t)^2 = \langle p^2\rangle = (\Delta p)_0^2\,;\end{aligned} \tag{20}$$

$$\begin{aligned}(\Delta x(t))^2 &= \langle\psi(t)|(x-\bar{x}(t))^2|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t)|x^2|\psi(t)\rangle - \bar{x}(t)^2 = \langle\psi(0)|x_H(t)^2|\psi(0)\rangle - \bar{x}(t)^2\\ &= \langle\psi(0)|(x+\frac{p}{m}\,t+\frac{F}{2m}\,t^2)^2|\psi(0)\rangle - \bar{x}(t)^2 = \langle x^2\rangle_0 + \langle p^2\rangle_0\,\frac{t^2}{m^2} = (\Delta x)_0^2 + (\Delta p)_0^2\,\frac{t^2}{m^2}\,.\end{aligned} \tag{21}$$

Quindi a t grande

$$\Delta p(t)\cdot\Delta x(t) = (\Delta p)_0\cdot\sqrt{(\Delta x)_0^2 + (\Delta p)_0^2\,\frac{t^2}{m^2}} \simeq (\Delta p)_0^2\,\frac{t}{m} \tag{22}$$

Problema 2.

(i) Nell'approssimazione non-relativistica il sistema è identico a quello di un atomo di idrogeno, a parte la sostituzione protone → positrone, quindi $m_e \to \mu = m_e/2$. Il raggio di Bohr è sostituito da:

$$r_B \to \tilde{r} = \frac{\hbar^2}{\mu\, e^2} \simeq 2\, r_B. \tag{23}$$

I livelli di energia sono

$$E_n = -\frac{e^2}{2n^2\tilde{r}} = -\frac{e^2}{4n^2 r_B}, \qquad L = 0, 1, \ldots, n-1, \tag{24}$$

gli stati con L hanno la parità,

$$-(-)^L = (-)^{L+1}. \tag{25}$$

(ii) Perché l'operatore $\mathbf{S}^2$ commuta con H. Il fatto che $\mathbf{S}^2$ commuta con V_1 e V_3 è ovvio se ricordiamo che $\mathbf{S}^2$ commuta con ciascuna componente S_i. Per q riguarda V_2, basta scrivere

$$\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 = \frac{\mathbf{S}^2 - \mathbf{s}_1^2 - \mathbf{s}_2^2}{2} = \frac{\mathbf{S}^2 - \frac{3}{2}}{2} \tag{26}$$

per verificare $[V_2, \mathbf{S}^2] = 0$.

(iii) L'effetto di V_1 si annulla poiché $L = 0$. V_3 è assente per lo stato $1s$.

Per quanto riguarda il potenziale V_2, l'effetto al primo ordine è semplicemente

$$2\pi\mu_0^2\, \frac{14}{3}\, [\mathbf{S}^2 - \mathbf{s}_1^2 - \mathbf{s}_2^2]\, |\psi_{1s}(0)|^2 = 2\pi\mu_0^2\, \frac{14}{3}\, [\mathbf{S}^2 - \frac{3}{2}]\, |\psi_{1s}(0)|^2 = \begin{cases} \pi\mu_0^2\, \frac{14}{3}\, |\psi_{1s}(0)|^2 & S = 1, \\ -3\pi\mu_0^2\, \frac{14}{3}\, |\psi_{1s}(0)|^2 & S = 0. \end{cases} \tag{27}$$

Più esplicitamente, V_3 commuta con

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}, \qquad \mathbf{S}^2, \quad \mathbf{L}^2\, ; \tag{28}$$

(iv) Consideriamo prima V_2. ΔH è non nullo solo per $2s$. Il calcolo è analogo al caso dello stato $1s$; l'unico cambiamento è

$$|\psi_{1s}(0)|^2 \to |\psi_{2s}(0)|^2. \tag{29}$$

L'operatore V_1 ha parità positiva, perciò ha un elemento non nullo solo tra due stati di $2s$ o tra due stati $2p$. D'altra parte, V_1 commuta con

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + S \tag{30}$$

per cui ha elemento di matrice non nullo solo tra gli stati dello stesso (J, J_z). Gli stati $|J, L, S\rangle$ che si possono formare a partire da $2s$, $2p$ sono ($4 \times 4 = 16$ stati)

$$|2s; 1, 0, 1\rangle; \quad |2s; 0, 0, 0\rangle; \tag{31}$$

$$|2p; 2, 1, 1\rangle; \quad |2p; 1, 1, 1\rangle; \quad |2p; 0, 1, 1\rangle; \quad |2p; 1, 1, 0\rangle\ . \tag{32}$$

Gli elementi di matrice tra gli stati $2s$ si annullano

$$\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}|L=0\rangle = 0. \tag{33}$$

D'altronde l'elemento di matrice dell'operatore

$$\mathbf{L}\cdot\mathbf{S} = \frac{1}{2}\left[\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2\right] \tag{34}$$

tra gli stati di $|J,L,S\rangle$ sono semplicemente

$$\langle 2,1,1|\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}|2,1,1\rangle = 1, \qquad \langle 1,1,1|\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}|1,1,1\rangle = -1, \qquad \langle 0,1,1|\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}|0,1,1\rangle = -2, \tag{35}$$

per cui

$$\langle 2p;2,1,1|V_1|2p;2,1,1\rangle = 6\mu_0^2 \int dr\, R_{2,1}^2 \frac{1}{r} = \frac{\mu_0^2}{4\tilde{r}^3}, \tag{36}$$

$$\langle 2p;1,1,1|V_1|2p;1,1,1\rangle = -6\mu_0^2 \int dr\, R_{2,1}^2 \frac{1}{r} = -\frac{\mu_0^2}{4\tilde{r}^3}, \tag{37}$$

$$\langle 2p;0,1,1|V_1|2p;0,1,1\rangle = -12\mu_0^2 \int dr\, R_{2,1}^2 \frac{1}{r} = -\frac{\mu_0^2}{2\tilde{r}^3}, \tag{38}$$

(v) Si' V_3 commuta con $\mathbf{J}$. V_3 commuta anche con $\mathbf{S}^2$. Esso commuta anche con la parità. Inoltre V_3 annichila uno stato di $S=0$. Infine, V_3 è un tensore sferico simmetrico di rango 2, ripetto al momento angolare orbitale $\mathbf{L}$, come e' ovvio scrivendo

$$x_i x_j = (x_i x_j - \frac{\delta_{ij}}{3} r^2) + \frac{\delta_{ij}}{3} r^2. \tag{39}$$

Intanto possiamo considerare tra gli stati di $n=2$, $|2L;J,L,S\rangle$, solo gli stati di spin $S=1$ e $L\neq 0$:

$$|2p;2,1,1\rangle; \quad |2p;1,1,1\rangle; \quad |2p;0,1,1\rangle; \tag{40}$$

e l'effetto di V_3 è solo in elementi diagonali tra gli stati $|J,J_z\rangle$

$$\langle 2p;2,1,1|V_3|2p;2,1,1\rangle, \quad \langle 2p;1,1,1|V_3|2p;1,1,1\rangle, \quad \langle 2p;0,1,1|V_3|2p;0,1,1\rangle. \tag{41}$$

(vi) $\mathbf{S}^2$ non commuta con il termine con il campo magnetico, quindi non commuta con H. S_z invece commuta con H, come si vede riscrivendo

$$\mathbf{s}_1\cdot\mathbf{s}_2 = \frac{\mathbf{S}^2 - \mathbf{s}_1^2 - \mathbf{s}_2^2}{2} = \frac{\mathbf{S}^2 - \frac{3}{2}}{2} \tag{42}$$

Dunque, l'autoscatto di H è in generale un autostato di S_z ma non di $\mathbf{S}^2$.

Nel limite di grande B domina l'ultimo termine per cui lo stato fondamentale è uno stato di spin,

$$\simeq |\downarrow\uparrow\rangle = \frac{|S=1,S_z=0\rangle - |S=0,S_z=0\rangle}{\sqrt{2}}\ ; \tag{43}$$

mentre per piccolo B il termine di spin-spin è dominante, per cui lo stato fondamentale è circa

$$\simeq |S=0,S_z=0\rangle = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}\ . \tag{44}$$