

Soluzione dell'esame di FISICA QUANTISTICA del 27 gennaio 2023

(1) Possiamo separare l'hamiltoniana

$$H_0 = \frac{\vec{p}_1^2}{2m} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m} - \frac{e^2}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} + (\vec{x}_1 + \vec{x}_2)\vec{E} \quad (1)$$

in due parti commutanti tramite le seguenti variabili:

$$\vec{R} = \frac{\vec{x}_1 + \vec{x}_2}{2}, \quad (2)$$

$$\vec{r} = \vec{x}_1 - \vec{x}_2, \quad (3)$$

$$\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2, \quad (4)$$

$$\vec{p} = \frac{\vec{p}_1 - \vec{p}_2}{2}; \quad (5)$$

$$M = 2m, \quad (6)$$

$$\mu = \frac{m}{2}. \quad (7)$$

Utilizzando queste definizioni si ottiene

$$H_0 = H_R + H_r; \quad (8)$$

$$H_R = \frac{\vec{P}^2}{2M} + 2\vec{R}\vec{E}, \quad (9)$$

$$H_r = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{|\vec{r}|}. \quad (10)$$

(2) I commutatori da calcolare sono

$$\left[R^i, P^j \right] = \left[\frac{x_1^i + x_2^i}{2}, p_1^j + p_2^j \right] = \frac{1}{2} \left(\left[x_1^i, p_1^j \right] + \left[x_2^i, p_2^j \right] \right) = i\hbar\delta^{ij}, \quad (11)$$

$$\left[r^i, p^j \right] = \left[x_1^i - x_2^i, \frac{p_1^j - p_2^j}{2} \right] = \frac{1}{2} \left(\left[x_1^i, p_1^j \right] + \left[x_2^i, p_2^j \right] \right) = i\hbar\delta^{ij}, \quad (12)$$

$$\left[r^i, P^j \right] = \left[x_1^i - x_2^i, p_1^j + p_2^j \right] = \left[x_1^i, p_1^j \right] - \left[x_2^i, p_2^j \right] = 0, \quad (13)$$

$$\left[R^i, p^j \right] = \left[\frac{x_1^i + x_2^i}{2}, \frac{p_1^j - p_2^j}{2} \right] = \frac{1}{4} \left(\left[x_1^i, p_1^j \right] - \left[x_2^i, p_2^j \right] \right) = 0, \quad (14)$$

che, come atteso, riproducono le regole di commutazione canoniche.

(3) Con $\vec{E} = 0$ si ha

$$H_R = \frac{\vec{P}^2}{2M}, \quad (15)$$

$$H_r = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{|\vec{r}|}. \quad (16)$$

Quindi, la parte baricentrale contribuisce all'energia con

$$E_R = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2M}, \quad (17)$$

mentre la parte relativa è una hamiltoniana di un atomo di idrogeno e, pertanto, contribuisce con

$$E_r^n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2 n^2}. \quad (18)$$

L'energia totale è quindi

$$E = \frac{\vec{P}^2}{2M} - \frac{\mu e^4}{2\hbar^2 n^2}. \quad (19)$$

Lo spettro Eq. (17) della hamiltoniana baricentrale è continuo, mentre lo spettro Eq. (18) della hamiltoniana relativa è discreto. La degenerazione dello spettro Eq. (18) della hamiltoniana relativa è data da tutti i valori di l e l_z permessi per fisso n , da cui l'energia non dipende. Considerando che dato n , $l < n$ e, dato l , $-l \leq l_z \leq l$, si ottiene una degenerazione di n^2 .

(4)

Per $\vec{E} \neq 0$ si ha

$$H_0 = H_R + H_r, \quad (20)$$

$$H_R = \frac{\vec{P}^2}{2M} + 2\vec{R}\vec{E}, \quad (21)$$

$$H_r = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{|\vec{r}|}, \quad (22)$$

e dobbiamo scrivere le equazioni

$$\frac{d}{dt}O = \frac{i}{\hbar}[H_0, O] \quad (23)$$

con $O \in [\vec{P}, \vec{R}, \vec{p}, \vec{r}]$.

Dobbiamo calcolare quindi i commutatori

$$\frac{i}{\hbar}[H_0, P^i] = \frac{i}{\hbar}[H_R, P^i] = \frac{i}{\hbar}E^j[R^j, P^i] = \frac{i}{\hbar}E^j(i\hbar\delta^{ij}) = -2E^i, \quad (24)$$

$$\frac{i}{\hbar}[H_0, R^i] = \frac{i}{\hbar}[H_R, R^i] = \frac{i}{\hbar}\frac{1}{2M}[P^j P^j, R^i] = \frac{i}{2M\hbar}(-2i\hbar\delta^{ij}P^j) = \frac{P^i}{M}, \quad (25)$$

$$\frac{i}{\hbar}[H_0, p^i] = \frac{i}{\hbar}[H_r, p^i] = -\frac{i}{\hbar}e^2\left[1/|\vec{r}|, p^i\right] = -\frac{ie^2}{\hbar}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial r^i}\frac{1}{|\vec{r}|}\right) = -e^2\frac{r^i}{r^3}, \quad (26)$$

$$\frac{i}{\hbar}[H_0, r^i] = \frac{i}{\hbar}[H_r, r^i] = \frac{i}{\hbar}\frac{1}{2\mu}[p^j p^j, r^i] = \frac{i}{2\mu\hbar}(-2i\hbar\delta^{ij}p^j) = \frac{p^i}{\mu}. \quad (27)$$

(5)

Poichè nei punti precedenti abbiamo separato l'hamiltoniana come somma di due hamiltoniane commutanti in Eq. (15,16), rispettivamente l'hamiltoniana di una particella libera di massa M e quella di un atomo di idrogeno di massa μ , possiamo scrivere la funzione d'onda come prodotto delle rispettive autofunzioni

$$\psi(\vec{R}, \vec{r}) = \psi_{free}(\vec{R})\psi_{hydro}(\vec{r}) = \frac{e^{-i\vec{K}\cdot\vec{R}}}{\sqrt{2\pi}}Y_{lm}(\theta, \phi)\phi_{nl}(|\vec{r}|) \quad (28)$$

Lo stato fondamentale è quella in cui il baricentro è a riposo, ossia

$$\vec{K} = 0, \quad (29)$$

e la funzione d'onda dell'atomo di idrogeno è nello stato fondamentale $n = 1$, $l = 0$, cioè

$$\psi_{hydro}^0(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-\frac{r}{a_0}} \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{e^2\mu}. \quad (30)$$

(6)

Vedere paragrafo 11.3 (pag. 239) del libro di testo.

(7)

Dobbiamo calcolare $\langle\psi|r|\psi\rangle$, dove $|\psi\rangle$ è lo stato fondamentale dell'atomo di idrogeno, dato dalla Eq. (30). Non si prende in considerazione la parte baricentrale perchè non dipende da r , dunque una misura del valor medio di r non dipende da essa. Quindi dobbiamo calcolare

$$\begin{aligned} \langle\psi|r|\psi\rangle &= \int d\vec{r}d\vec{r}'\psi^*(\vec{r}')\langle r\theta\phi|r|\theta\phi\rangle\psi(\vec{r}) = \int dr r^2 dr' r'^2 d\Omega d\Omega' \psi^*(r)r\delta(r-r')\delta(\theta-\theta')\delta(\phi-\phi')\psi(r) \\ &= 4\pi \int dr r^3 |\psi(r)|^2 = \frac{4\pi}{\pi a_0^3} \int_0^\infty dr r^3 e^{-2r/a_0} = \frac{a_0}{4} \int_0^\infty dr r^{4-1} e^{-r} = \frac{a_0}{4} \Gamma(4) = \frac{a_0}{4} 3! = \frac{3a_0}{2}, \end{aligned} \quad (31)$$

dove nel terzo passaggio dell'ultima riga abbiamo fatto il cambio di variabile $r \rightarrow 2r/a_0$.

Nel caso in cui $\vec{E} \neq 0$ la hamiltoniana baricentrale cambia. Visto che, come si è detto, il valor medio di r non dipende da essa, il risultato resta invariato.

(8)

La hamiltoniana può essere riscritta come

$$H_0 + \frac{B}{2\hbar^2} (J^2 - L^2 - S^2) + \frac{\lambda}{2\hbar^2} (S^2 - S_1^2 - S_2^2), \quad (32)$$

quindi l'autovalore diventa

$$E_{njl_s} = \frac{\hbar^2 |\vec{k}|^2}{2M} - \frac{\mu e^4}{2\hbar^2 n^2} + \frac{B}{2} (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)) + \frac{\lambda}{2} (s(s+1) - \frac{3}{2}), \quad (33)$$

dove j è il momento angolare totale, j_z la sua componente lungo z , l il momento angolare orbitale e s lo spin totale. Gli autostati sono

$$|\vec{k}, n, j, j_z, l, s\rangle \quad (34)$$

con \vec{k} un generico vettore tridimensionale a componenti reali e

$$n = 1, 2, 3, \dots; \quad (35)$$

$$s = 0, 1; \quad (36)$$

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots, \text{ con } l \leq n - 1; \quad (37)$$

$$|l - s| \leq j \leq l + s; \quad (38)$$

$$-j \leq j_z \leq j. \quad (39)$$

L'energia dipende da tutti questi tranne che da j_z .

(9)

Visto che ora $B = 0$, gli autostati della hamiltoniana di spin imperturbata possono essere scelti come autostati di $\frac{\lambda}{2\hbar^2} (S^2 - S_1^2 - S_2^2)$, e dunque dello spin totale, ovvero

$$|s, s_z, s_1, s_2\rangle = |s, s_z, 1/2, 1/2\rangle \quad (40)$$

con

$$|s, s_z\rangle = |1, 1\rangle, |1, -1\rangle, |1, 0\rangle, |0, 0\rangle. \quad (41)$$

Quindi in particolare gli stati con $s = 1$ hanno tutti la stessa energia, ma lo stato con $s = 0$ ha energia diversa.

Possiamo scegliere l'asse z lungo la direzione del vettore \vec{k} . Osserviamo che la perturbazione trasforma lo stato di tripletto con $s_z = 0$ nello stato di singoletto e viceversa. Tuttavia nel sottospazio degenerare la perturbazione è diagonale e si ha

$$\langle 1, s_z | \frac{\kappa}{\hbar} \sigma_1^z | 1, s'_z \rangle = \frac{\kappa}{\hbar} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (42)$$

Si ha inoltre

$$\langle 0, 0 | \frac{\kappa}{\hbar} \sigma_1^z | 0, 0 \rangle = 0. \quad (43)$$

In conclusione troviamo

$$\Delta E^{11} = \frac{\kappa}{\hbar} \quad (44)$$

$$\Delta E^{1,0} = 0 \quad (45)$$

$$\Delta E^{1,-1} = -\frac{\kappa}{\hbar} \quad (46)$$

$$\Delta E^{0,0} = 0. \quad (47)$$

(10) Poichè siamo in uno stato con $s = 1$ e $s_z = 0$ abbiamo che lo stato al tempo $t = 0$ è

$$|\psi\rangle_0 = |10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right). \quad (48)$$

La probabilità richiesta è

$$P = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right| + \left\langle -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right| \right) e^{-\frac{it}{\hbar^2} \vec{\kappa} \cdot \vec{\sigma}_1} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right) \right|^2. \quad (49)$$

Se κ è diretto lungo l'asse z , $\vec{\kappa} \cdot \vec{\sigma} = \kappa \sigma_1^z$. Quindi troviamo

$$P = \left| \frac{1}{2} \left(\left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right| + \left\langle -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right| \right) \left(e^{-\frac{i\kappa t}{\hbar^2}} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + e^{\frac{i\kappa t}{\hbar^2}} \left| -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right) \right|^2 = \left| \frac{1}{2} \left(e^{\frac{i\kappa t}{\hbar^2}} + e^{-\frac{i\kappa t}{\hbar^2}} \right) \right|^2 = \cos^2 \left(\frac{\kappa t}{\hbar^2} \right). \quad (50)$$

Se $\vec{\kappa}$ è diretto lungo un asse qualsiasi il risultato resta invariato. Questo può essere visto osservando che l'operatore di evoluzione temporale è dato da

$$e^{-\frac{it}{\hbar^2} \vec{\kappa} \cdot \vec{\sigma}_1} = \cos \left(\frac{\kappa t}{\hbar^2} \right) + i \vec{\kappa} \cdot \vec{\sigma}_1 \sin \left(\frac{\kappa t}{\hbar^2} \right) \quad (51)$$

e

$$\left(\left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right| + \left\langle -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right| \right) \vec{\kappa} \cdot \vec{\sigma}_1 \left(\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right) = 0. \quad (52)$$

Il risultato può anche essere dimostrato sfruttando l'invarianza dello stato dato per rotazioni attorno all'asse z .

(11) Come si è detto al punto (8) e come si vede dalla Eq. (33) il livello energetico dipende da tutti i numeri quantici tranne j_z , quindi la degenerazione di un livello energetico generico è $d = 2j_z + 1$. Tuttavia, in alcuni casi la degenerazione è maggiore. In particolare

- Per tutti i livelli per cui $s = 0$ si ha $j = l$. In tal caso

$$E_{njls} = \frac{\vec{P}^2}{2M} - \frac{\mu e^4}{2\hbar^2 n^2} - \frac{B}{2} s(s+1) + \frac{\lambda}{2} \left(s(s+1) - \frac{3}{2} \right), \quad (53)$$

quindi ora l'autovalore non dipende da j e l . Visto che tutti i valori di $l = j$ con $l \leq n-1$ e $-j \leq j_z \leq j$ sono permessi, la degenerazione è la stessa di quella dell'atomo di idrogeno, ossia n^2 .

- Per tutti i livelli per cui $s = 1$, j può prendere i tre valori $j = l-1, l, l+1$. Per tutti i livelli aventi $s = 1$ ma $j = l$ valgono le considerazioni fatte al punto precedente, e la degenerazione dunque è n^2