

# Esame scritto di meccanica quantistica

## traccia di soluzione

11 Luglio 2013

**Esercizio 1.** Ciascuna particella considerata singolarmente ha autofunzioni dell'energia

$$\psi_{n_1, n_2, n_3}(\vec{r}) = \psi_{n_1, a_1}(x) \psi_{n_2, a_2}(y) \psi_{n_3, a_3}(z), \quad (1)$$

dove

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{a}} \cos \frac{n\pi}{2a} x, & \text{se } n \text{ dispari} \\ \sqrt{\frac{1}{a}} \sin \frac{n\pi}{2a} x, & \text{se } n \text{ pari} \end{cases} \quad (2)$$

con autovalori di energia

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m} \left( \frac{n_1^2}{a_1^2} + \frac{n_2^2}{a_2^2} + \frac{n_3^2}{a_3^2} \right). \quad (3)$$

Considerando il caso di particelle non identiche, le autofunzioni sono

$$\Psi_{S, S_z}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_n(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \cdot \chi_{S, S_z}, \quad (4)$$

dove  $\chi_{S, S_z}$  è la parte di spin totale della funzione d'onda (tripletto di spin 1 o singoletto spin 0).

Per lo stato fondamentale

$$\psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_{1,1,1}(\vec{r}_1) \psi_{1,1,1}(\vec{r}_2), \quad (5)$$

con energia

$$E_0 = 2E_{1,1,1}, \quad (6)$$

e degenerazione  $deg = 4$ .

Poiché  $a_1 > a_2$  la prima eccitazione si ottiene esclusivamente aumentando il numero quantico  $n_1$  per una delle due particelle, e quindi si ha

$$\psi_1(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \begin{cases} \psi_{2,1,1}(\vec{r}_1) \psi_{1,1,1}(\vec{r}_2) \\ \psi_{1,1,1}(\vec{r}_1) \psi_{2,1,1}(\vec{r}_2) \end{cases} \quad (7)$$

associati a  $E_1 = E_{2,1,1} + E_{1,1,1}$ , con  $deg = 8$ .

Poiché  $|a_1 - a_2| \ll a_2$  ne segue che  $E_{1,1,2} = E_{1,2,1} < E_{3,1,1}$ . Pertanto il secondo livello eccitato corrisponde agli stati

$$\psi_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \begin{cases} \psi_{1,2,1}(\vec{r}_1) \psi_{1,1,1}(\vec{r}_2) \\ \psi_{1,1,1}(\vec{r}_1) \psi_{1,2,1}(\vec{r}_2) \\ \psi_{1,1,2}(\vec{r}_1) \psi_{1,1,1}(\vec{r}_2) \\ \psi_{1,1,1}(\vec{r}_1) \psi_{1,1,2}(\vec{r}_2) \end{cases} \quad (8)$$

entrambi associati a  $E_2 = E_{1,2,1} + E_{1,1,1}$ , con degenerazione totale  $deg = 16$ .

**Esercizio 2.** Considerando ora un sistema di particelle identiche, l'autofunzione dello stato fondamentale è

$$\Psi_{S,S_z}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \cdot \chi_{0,0}, \quad (9)$$

associata  $E_0 = 2E_{1,1,1}$ , con  $deg = 1$  (non degenera)

Per il primo livello eccitato l'autofunzione è

$$\Psi_{S,S_z}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \begin{cases} \psi_1^+(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi_{0,0} \\ \psi_1^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi_{1,-1} \\ \psi_1^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi_{1,0} \\ \psi_1^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi_{1,1} \end{cases} \quad (10)$$

dove

$$\psi_1^+(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{1,1,1}(\vec{r}_1)\psi_{2,1,1}(\vec{r}_2) + \psi_{2,1,1}(\vec{r}_1)\psi_{1,1,1}(\vec{r}_2)], \quad (11)$$

$$\psi_1^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{1,1,1}(\vec{r}_1)\psi_{2,1,1}(\vec{r}_2) - \psi_{2,1,1}(\vec{r}_1)\psi_{1,1,1}(\vec{r}_2)], \quad (12)$$

con  $E_1 = E_{1,1,1} + E_{2,1,1}$  e  $deg = 4$ .

Per il secondo livello eccitato l'autofunzione è

$$\Psi_{S,S_z}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \begin{cases} \psi_2^+(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi_{0,0} & \psi_2^{++}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi_{0,0} \\ \psi_2^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi_{1,-1} & \psi_2^{--}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi_{1,-1} \\ \psi_2^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi_{1,0} & \psi_2^{--}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi_{1,0} \\ \psi_2^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi_{1,1} & \psi_2^{--}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi_{1,1} \end{cases} \quad (13)$$

dove

$$\psi_2^+(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{1,2,1}(\vec{r}_1)\psi_{1,1,1}(\vec{r}_2) + \psi_{1,1,1}(\vec{r}_1)\psi_{1,2,1}(\vec{r}_2)], \quad (14)$$

$$\psi_2^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{1,2,1}(\vec{r}_1)\psi_{1,1,1}(\vec{r}_2) - \psi_{1,1,1}(\vec{r}_1)\psi_{1,2,1}(\vec{r}_2)], \quad (15)$$

$$\psi_2^{++}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{1,1,2}(\vec{r}_1)\psi_{1,1,1}(\vec{r}_2) + \psi_{1,1,1}(\vec{r}_1)\psi_{1,1,2}(\vec{r}_2)], \quad (16)$$

$$\psi_2^{--}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{1,1,2}(\vec{r}_1)\psi_{1,1,1}(\vec{r}_2) - \psi_{1,1,1}(\vec{r}_1)\psi_{1,1,2}(\vec{r}_2)], \quad (17)$$

con  $E_2 = E_{1,2,1} + E_{1,1,1}$  e  $deg = 8$ .

**Esercizio 3.** Possiamo scrivere il termine aggiunto all'hamiltoniana come

$$H_S = \vec{B} \cdot (\vec{s}_1 + \vec{s}_2) = \vec{B} \cdot \vec{S} = B_z S_z. \quad (18)$$

Pertanto, gli autostati dell'hamiltoniana devono ora essere anche autostati della componente dello spin totale lungo l'asse  $z$ .

Lo stato fondamentale è

$$\Psi_{S,S_z}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_{1,1,1}(\vec{r}_1) \psi_{1,1,1}(\vec{r}_2) \chi_{1,-1}, \quad (19)$$

con  $E_0 = 2E_{1,1,1} - \hbar B_z$  con  $deg = 1$  (non degenera).

Poiché  $|\vec{B}| \ll 1/a_1$  la separazione di livelli dovuta allo spin è sempre molto minore di quella dovuta alle eccitazioni spaziali. Pertanto ogni livello di energia si separa in più livelli aventi diverse energie di spin, ma senza che l'energia di spin modifichi l'ordinamento dei livelli di energia dovuto alla parte spaziale.

Per il primo stato eccitato si ha quindi

$$\Psi_{S,S_z}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \begin{cases} \psi_{1,1,1}(\vec{r}_1) \psi_{1,1,1}(\vec{r}_2) \chi_{0,0} \\ \psi_{1,1,1}(\vec{r}_1) \psi_{1,1,1}(\vec{r}_2) \chi_{1,0} \end{cases} \quad (20)$$

con  $E_1 = 2E_{1,1,1}$  e  $deg = 2$ .

E per il secondo stato eccitato

$$\Psi_{S,S_z}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_{1,1,1}(\vec{r}_1) \psi_{1,1,1}(\vec{r}_2) \chi_{1,1}, \quad (21)$$

associati a  $E_2 = 2E_{1,1,1} + \hbar B_z$ , con  $deg = 1$ .

**Esercizio 4.** Nella base canonica  $|i\rangle$  scriviamo lo stato

$$\langle i|S, S_x = 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ i \end{pmatrix}. \quad (22)$$

autovettore dell'operatore

$$\langle S_x \rangle = -i\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (23)$$

corrispondente all'autovalore  $\lambda = +\hbar$ .

Poiché viene misurato solo lo spin, l'evoluzione temporale dovuta all'hamiltoniana spaziale non ha alcun effetto sul risultato della misura, in seguito all'unitarietà dell'evoluzione temporale stessa. L'evoluzione temporale della funzione d'onda di spin è data da

$$\langle i|e^{-\frac{i}{\hbar}B_z S_z t}|S, S_x = 1\rangle = \begin{pmatrix} \cos B_z t & -\sin B_z t & 0 \\ \sin B_z t & \cos B_z t & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ i \end{pmatrix}. \quad (24)$$

La probabilità è dunque

$$P = |\langle S, S_x = 1|e^{-\frac{i}{\hbar}B_z S_z t}|S, S_x = 1\rangle|^2 = \frac{1}{4} (1 + \cos B_z t)^2. \quad (25)$$

**Esercizio 5.** Come si è visto al punto (3), lo stato fondamentale è un autostato di spin totale avente  $S_z = -1$ . Pertanto, dopo la misura di energia il sistema si trova sempre nello stato

$$\langle i|S, S_z = -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix} \quad (26)$$

La probabilità richiesta è quindi

$$P = |\langle S, S_x = 1|S, S_z = -1\rangle|^2 = \frac{1}{4}. \quad (27)$$

**Esercizio 6.** Definiamo

$$H_\epsilon = \epsilon \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} \vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2. \quad (28)$$

Per ciascuno stato trovato nel punto 2 calcoliamo

$$\langle \Psi | H_\epsilon | \Psi \rangle = \epsilon \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma_1^4} \langle \Psi | \vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2 | \Psi \rangle = \epsilon \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma_1^4} \langle \psi | (x_1 x_2 + y_1 y_2 + z_1 z_2) | \psi \rangle. \quad (29)$$

Nello stato fondamentale

$$\langle \psi_0 | (x_1 x_2 + y_1 y_2 + z_1 z_2) | \psi_0 \rangle = \langle x_1 \rangle \langle x_2 \rangle + \langle y_1 \rangle \langle y_2 \rangle + \langle z_1 \rangle \langle z_2 \rangle = 0 : \quad (30)$$

i valori medi sono tutti nulli per simmetria.

Per determinare la perturbazione al primo livello eccitato occorre diagonalizzare la matrice della perturbazione nello spazio di stati degeneri. Poiché non viene misurato lo spin, solo le due funzioni d'onda spaziali Eq. (11-12) sono rilevanti, e si deve quindi determinare la matrice  $2 \times 2$  della perturbazione rispetto a questi stati.

Gli elementi non-diagonali della matrice si annullano tutti. Per quanto riguarda gli elementi diagonali, gli integrali lungo gli assi  $y$  e  $z$  sono tutti banali (nulli o pari ad uno per normalizzazione). L'unico integrale non nullo e non banale è

$$\langle \psi_1^\pm | x_1 x_2 | \psi_1^\pm \rangle = \int_{-a_1}^{a_1} dx_1 dx_2 x_1 x_2 [\psi_1(x_1) \psi_2(x_2) \pm \psi_2(x_1) \psi_1(x_2)]^2 \quad (31)$$

$$= \pm 2 \left[ \int_{-a_1}^{a_1} dx x \psi_1(x) \psi_2(x) \right]^2 = \pm 2 \left( \frac{32a_1}{9\pi^2} \right)^2, \quad (32)$$

e quindi

$$\langle \psi_1^\pm | H_\epsilon | \psi_1^\pm \rangle = \pm \epsilon \frac{\hbar^2}{\pi^2 m a_1^2} \left( \frac{16}{9} \right)^2. \quad (33)$$

Ne segue che la matrice della perturbazione è già diagonale, pertanto questi due elementi di matrice forniscono direttamente la correzione al primo ordine all'energia dei due livelli dati.