ESAME SCRITTO DI MECCANICA QUANTISTICA

26 Febbraio 2015

Traccia di soluzione

(1) L'hamiltoniana H_0 è la somma di due hamiltoniane idrogenoidi con Z=2. L'energia dello stato fondamentale si ottiene quando entrambi gli elettroni si trovano nello stato fondamentale:

$$E_0 = E_0^1 + E_0^2 = -\frac{4me^4}{2\hbar^2} - \frac{4me^4}{2\hbar^2} = -8\frac{me^4}{2\hbar^2} \tag{1}$$

La funzione d'onda spaziale dello stato fondamentale è data dal prodotto delle funzioni d'onda di stato fondamentale idrogenoide per le due particelle:

$$\Psi_0(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \psi_{100}(\vec{x}_1)\,\psi_{100}(\vec{x}_2) \tag{2}$$

dove per la singola particella abbiamo:

$$\psi_{100}(\vec{x}_i) = Y_{00}(\theta_i, \phi_i)\phi_{10}(r_i) \tag{3}$$

$$\phi_{10}(r_i) = Ne^{-r_i/a} \qquad a = \frac{a_0}{2} = \frac{1}{2}\frac{\hbar^2}{me^2} \tag{4}$$

dove a_0 è il raggio di Bohr.
La normalizzazione (non richiesta) si può ottenere imponendo:

$$N^2 \int_0^{+\infty} dr\, r^2 e^{-2r/a} = 1 \tag{5}$$

Da cui si ottiene:

$$N^2 = \frac{1}{2}\left(\frac{2}{a}\right)^3 \tag{6}$$

L'energia del primo stato eccitato è:

$$E_1 = E_0^1 + E_1^2 = -\frac{m(\sqrt{2}e)^4}{2\hbar^2} - \frac{m(\sqrt{2}e)^4}{8\hbar^2} = -5\frac{me^4}{2\hbar^2} \tag{7}$$

(2) Per via della forma della $\Psi_0(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$ e indicando $|\vec{x}_i| = r_i$, si ha $\langle r_1\rangle = \langle r_2\rangle$. Si calcola quindi:

$$\langle r_1\rangle = \langle 100|r_1|100\rangle\langle 100|100\rangle = \langle 100|r_1|100\rangle = \int d\Omega |Y_{10}|^2 \int dr\, r^2\, r|\phi_{10}(r)|^2 = \tag{8}$$

$$= N^2 \int dr\, r^3\, e^{-2r/a} = -N^2\frac{a}{2}r^3 e^{-2r/a}|_0^{+\infty} + N^2\,\frac{a}{2}\int_0^{+\infty} dr\, 3r^2 e^{-2r/a} \tag{9}$$

Il primo termine è nullo, il secondo si integra ancora per parti due volte, fino ad ottenere:

$$\langle r_1 \rangle = N^2\, 6 \left(\frac{a}{2}\right)^4 = \frac{1}{2}\left(\frac{2}{a}\right)^3 \; 6 \left(\frac{a}{2}\right)^4 = 3\,\frac{a}{2} \tag{10}$$

(3) La funzione d'onda dello stato fondamentale $\Psi_0(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \psi_{100}(\vec{x}_1)\,\psi_{100}(\vec{x}_2)$ è simmetrica per scambio di $\vec{x}_1$ e $\vec{x}_2$. Nel caso di particelle identiche, perciò, la funzione d'onda di spin è quella associata allo stato di singoletto di spin 0: χ_{00}, antisimmetrica.

La funzione d'onda spaziale del primo stato eccitato si può scrivere come combinazione lineare simmetrica o antisimmetrica, da combinare poi con le opportune funzioni d'onda di spin:

$$\Psi^{\pm}_{1,lm}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{100}(\vec{x}_1)\psi_{2lm}(\vec{x}_2) \pm \psi_{2lm}(\vec{x}_1)\psi_{100}(\vec{x}_2)\right) \tag{11}$$

La funzione d'onda di spin può a suoa volta essere simmetrica o antisimmetrica, rispettivamente χ_{1s_Z} e χ_{00}; pertanto la funzione d'onda totale antisimmetrica può essere data dalle due combinazioni:

$$\Psi_{11} = \Psi^{-}_{1,lm}(\vec{x}_1, \vec{x}_2)\chi_{1s_Z} \tag{12}$$

$$\Psi_{10} = \Psi^{+}_{1,lm}(\vec{x}_1, \vec{x}_2)\chi_{00} \tag{13}$$

Se le particelle vengono trattate come identiche, i risultati della domanda (1) non cambiano, poiché l'hamiltoniana non dipende dallo spin.

(4) Lo stato fondamentale è non degenere.
Il primo stato eccitato ha degenerazione spaziale 4 e degenerazione di spin pari a 3 oppure 1, a seconda che la funzione d'onda di spin sia quella di tripletto o di singoletto. Perciò la degenerazione totale dello stato è: 12+4 = 16.

(5) La correzione all'energia dello stato fondamentale per effetto della perturbazione è al primo ordine:

$$E_0^{(1)} = \langle \Psi_0 | \frac{2e^2}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} | \psi_0 \rangle = \langle \psi_{100}\psi_{100} | \frac{2e^2}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} | \psi_{100}\psi_{100} \rangle \langle \chi_{1s_Z} | \chi_{1s_Z} \rangle = \tag{14}$$

$$= \int d\Omega_1 d\Omega_2 \int dr_1 dr_2 |Y_{00}(\theta_1, \phi_1)|^2 |Y_{00}(\theta_2, \phi_2)|^2 \frac{2e^2}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} |\phi_{10}(r_1)|^2 |\phi_{10}(r_2)|^2 \rangle \; > 0 \tag{15}$$

La correzione è positiva (perturbazione repulsiva).

(6) Poiché lo stato fondamentale ha momento angolare orbitale e spin nulli, é autostato di tutte le componenti di $\vec{L}$ e $\vec{S}$ con autovalore nullo:

$$(\vec{L}_1 + \vec{L}_2)\psi_{100}(\vec{x}_1)\psi_{100}(\vec{x}_2) = 0 \tag{16}$$

$$(\vec{S}_1 + \vec{S}_2)\chi_{00} = 0. \tag{17}$$

Si ha quindi
$$\langle\Psi_0|\vec{\mu}|\Psi_0\rangle = 0 \tag{18}$$

Inoltre, il fatto che non solo il valor medio $\langle\Psi_0|\vec{\mu}|\Psi_0\rangle = 0$, ma anche $\vec{\mu}|\Psi_0\rangle = 0$, implica che tutte le correzione all'energia a ordini superiori saranno nulle, poiché ogni correzione dipende da elementi di matrice tipo $\langle...|\vec{\mu}|\Psi_0\rangle$.

(7) Se $l = 0$, la eq. (11) diviene:

$$\Psi^{\pm}_{1,00}(\vec{x}_1,\vec{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{100}(\vec{x}_1)\psi_{200}(\vec{x}_2) \pm \psi_{200}(\vec{x}_1)\psi_{100}(\vec{x}_2)\right) = \tag{19}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}}Y_{00}(\theta_1,\phi_1)Y_{00}(\theta_2,\phi_2)\left(\phi_{10}(r_1)\phi_{20}(r_2) \pm \phi_{20}(r_1)\phi_{10}(r_2)\right) \tag{20}$$

In questo caso la degenerazione totale dello stato, compresa la parte di spin, è pari a 4. La perturbazione H_{12} agisce solo sulla parte spaziale. Nel corrispondente sottospazio degenere, di dimensione 2, la perturbazione, scritta nella base sopra, è già diagonale. Infatti:

$$\langle\Psi^+_{1,00}|H_{12}|\Psi^-_{1,00}\rangle = \langle\Psi^+_{1,00}|\frac{2e^2}{|\vec{x}_1-\vec{x}_2|}|\Psi^-_{1,00}\rangle = \tag{21}$$
$$= \int d^3\vec{x}_1 d^3\vec{x}_2 \frac{2e^2}{|\vec{x}_1-\vec{x}_2|}\Psi^+_{1,00}(\vec{x}_1,\vec{x}_2)\Psi^-_{1,00}(\vec{x}_1,\vec{x}_2) = 0 \tag{22}$$

perché è l'integrale di una funzione dispari su dominio dispari.
La correzione al prim'ordine agli stati $|\Psi^{\pm}_{1,00}\rangle$ è quindi data da:

$$E_1^{(1)\pm} = \langle\Psi^{\pm}_{1,00}|H_{12}|\Psi^{\pm}_{1,00}\rangle = \int d\Omega_1 d\Omega_2 \int dr_1 dr_2 |Y_{00}(\theta_1,\phi_1)|^2|Y_{00}(\theta_2,\phi_2)|^2\frac{2e^2 r_1^2 r_2^2}{|\vec{x}_1-\vec{x}_2|}\times \tag{23}$$
$$\times\left[|\phi_{10}(r_1)\phi_{20}(r_2)|^2 + |\phi_{20}(r_1)\phi_{10}(r_2)|^2 \pm 2\phi_{10}(r_1)\phi_{20}(r_2)\phi_{10}(r_2)\phi_{20}(r_1)\right] \tag{24}$$

Questo significa che la degenerazione spaziale è rimossa, perché la perturbazione distingue lo stato con parte spaziale simmetrica (non degenere di spin) da quello con parte spaziale antisimmetrica (3 volte degenere di spin).

(8) La funzione d'onda al tempo $t = 0$ sarà data da

$$\begin{aligned}\Psi(\vec{x}_1,\vec{x}_2,t=0) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Bigg(\psi_{100}(\vec{x}_1)\psi_{200}(\vec{x}_2)\chi^{(1)}_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}\\ &- \psi_{200}(\vec{x}_1)\psi_{100}(\vec{x}_2)\chi^{(1)}_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}\chi^{(2)}_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}\Bigg)\end{aligned} \tag{25}$$

che può essere scritta in termini delle autofunzioni in eq.(11)

$$\Psi(\vec{x}_1,\vec{x}_2,t=0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\Psi^-_{1,00}(\vec{x}_1,\vec{x}_2)\chi_{1,0} + \Psi^+_{1,00}(\vec{x}_1,\vec{x}_2)\chi_{0,0}\,.\right) \tag{26}$$

Lo stato al tempo t si ottiene osservando che lo stato dato è un autostato di H_0 con autovalore E_1 Eq. (7), che la parte proporzionale a $\vec{L}$ della perturbazione non ha effetto poiché $l = 0$, e che $\chi_{1,0}$ e $\chi_{0,0}$ sono autostati della perturbazione che quindi agisce come una rotazione finita:

$$\begin{aligned}
|\Psi, t\rangle &= \exp\{-\frac{i}{\hbar}(H_0 + H')\}|\Psi, t=0\rangle \\
&= \exp\{-\frac{i}{\hbar}E_1\}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\Psi^-_{1,00}\rangle \exp\{-\frac{i}{\hbar}(\kappa B_x S_x)\}|1,0\rangle + |\Psi^+_{1,00}\rangle|0,0\rangle\right) \\
&= \exp\{-\frac{i}{\hbar}E_1\}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\Psi^-_{1,00}\rangle|\tilde{\chi}\rangle + |\Psi^+_{1,00}\rangle|0,0\rangle\right) \qquad (27)
\end{aligned}$$

dove $|\tilde{\chi}\rangle$ è l'autostato $|1,0\rangle$ ruotato attorno all'asse x (ossia nel piano yz) di un angolo $\theta = \kappa B_x$. Nella base cartesiana $\langle i|\tilde{\chi}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \sin\theta \\ \cos\theta \end{pmatrix}$.