

Esame Scritto di Meccanica Quantistica

Traccia di soluzione

28 Febbraio 2017

1. Sull'hamiltoniana data

$$H = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} - \frac{e^2}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} + \frac{1}{2}m_1\omega^2\vec{x}_1^2 + \frac{1}{2}\frac{m_2^2}{m_1}\omega^2\vec{x}_2^2 + m_2\omega^2\vec{x}_1 \cdot \vec{x}_2 \quad (1)$$

si esegue il seguente cambio di variabili per passare in coordinate baricentriche e relative:

$$\vec{X} = \frac{m_1\vec{x}_1 + m_2\vec{x}_2}{m_1 + m_2} \quad \vec{x}_1 = \vec{X} + \frac{m_2}{m_2 + m_1}\vec{x} \quad \vec{p}_1 = \frac{m_1}{m_1 + m_2}\vec{P} + \vec{p} \quad (2)$$

$$\vec{x} = \vec{x}_1 - \vec{x}_2 \quad \vec{x}_2 = \vec{X} - \frac{m_1}{m_2 + m_1}\vec{x} \quad \vec{p}_2 = \frac{m_2}{m_1 + m_2}\vec{P} - \vec{p}. \quad (3)$$

Sostituendo si ottiene

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{|\vec{x}|} + \frac{1}{2}M\Omega^2\vec{X}^2 \quad (4)$$

avendo indicato con

$$M = m_1 + m_2 \quad (5)$$

$$\mu = \frac{m_1m_2}{m_1 + m_2} \quad (6)$$

$$\Omega^2 = \frac{M}{m_1}\omega^2 \quad (7)$$

rispettivamente la massa totale e ridotta del sistema.

La hamiltoniana globale Eq. (4) si è quindi separata nella somma di due hamiltoniane H_B e H_r , dipendenti rispettivamente solo dalle variabili baricentriche e relative:

$$H = H_B + H_r. \quad (8)$$

Pertanto, le autofunzioni si possono scrivere come prodotto e gli autovalori come somma di quelli delle due hamiltoniane in cui il problema è stato separato.

In particolare, l'energia dello stato fondamentale è

$$E^0 = E_B^0 + E_r^0 \quad (9)$$

dove, indicando con E_{nlm} i rispettivi autovalori, si ha

$$E_B^0 = E_{0,0,0}^{\text{osc.arm}} = \frac{3}{2}\hbar\Omega, \quad (10)$$

$$E_r^0 = E_{1,0,0}^{\text{hydro}} = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \quad (11)$$

2. L'hamiltoniana è ora

$$H_1 = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{|\vec{x}|} + \lambda\vec{J} \cdot \vec{S}. \quad (12)$$

Utilizzando la definizione di $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ con semplici manipolazioni otteniamo

$$H_1 = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{|\vec{x}|} + \lambda \left(\vec{L} \cdot \vec{S} + \vec{S}^2 \right) \quad (13)$$

$$= \frac{\vec{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{|\vec{x}|} + \frac{\lambda}{2} \left(\vec{J}^2 - \vec{L}^2 + \vec{S}^2 \right). \quad (14)$$

Si vede quindi che la hamiltoniana data è diagonale nella base $|n, j, m_j, l, s\rangle$.

Lo spettro di autovalori di energia è quindi dato da

$$E_{n,j,l} = -\frac{\mu e^4}{2n^2 \hbar^2} + \frac{\lambda \hbar^2}{2} \left(j(j+1) - l(l+1) + \frac{3}{4} \right) \quad (15)$$

dove abbiamo posto $s = \frac{1}{2}$ e

- (a) n è un intero $n \geq 1$;
- (b) l è un intero $l \leq n - 1$;
- (c) per $l = 0$, $j = \frac{1}{2}$, e per ogni $l \geq 1$, j può assumere i valori $j = l - \frac{1}{2}$ oppure $j = l + \frac{1}{2}$.

3. Vedere le Eq. (13.19)-(13.24) nella sezione 13.1.1 degli appunti.
4. Conviene passare nelle coordinate che disaccoppiano il problema e scegliere coordinate sferiche. La densità di probabilità di posizione per lo stato fondamentale della hamiltoniana Eq. (4) è in tal modo data da

$$\rho(R, r) d^3x_r d^3x_B = R^2 |\psi_{B,0,0,0}(R)|^2 r^2 |\psi_{r,1,0,0}(r)|^2 dr dR d\cos\theta_r d\cos\theta_B d\phi_r d\phi_B \quad (16)$$

avendo indicato con (R, θ_R, ϕ_B) e (r, θ_r, ϕ_r) le coordinate sferiche del baricentro e relative, e quindi in particolare con R e r le componenti radiali della coordinata baricentrale e relativa rispettivamente; $\psi_{B,0,0,0}$ è la funzione d'onda dello stato fondamentale dell'oscillatore armonico tridimensionale, e $\psi_{r,1,0,0}$ è la funzione d'onda dello stato fondamentale dell'atomo d'idrogeno.

Il valore della distanza fra le due particelle per cui la densità di probabilità di posizione è massima si trova determinando i punti in cui si annulla la derivata della densità di probabilità Eq. (16) rispetto al modulo della coordinata relativa:

$$\left. \frac{\partial \rho(R, r)}{\partial r} \right|_{r=r_{\max}} = \left. \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 |\psi_{r,1,0,0}(r)|^2 \right) \right|_{r=r_{\max}} = 0. \quad (17)$$

Ricordando la funzione d'onda dello stato fondamentale dell'atomo di idrogeno

$$\psi_{r,1,0,0}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \quad (18)$$

con $a_0 = \frac{\hbar^2}{m e^2}$ il raggio di Bohr dato nel testo, possiamo calcolare la derivata rispetto a r ottenendo

$$\frac{\partial}{\partial r} r^2 |\psi_{r,1,0,0}(r)|^2 = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} 2 \left(r - \frac{r^2}{a_0} \right). \quad (19)$$

Questa derivata si annulla in $r = 0$ e $r = a_0$. Si vede facilmente che il massimo cercato corrisponde alla soluzione $r = a_0$.

5. La prima identità può essere derivata ricordando che z è invariante per rotazioni rispetto all'asse z cioè commuta con L_z :

$$[L_z, z] = 0 \quad (20)$$

da cui discende che

$$0 = \langle l'm' | [L_z, z] | lm \rangle = \langle l'm' | L_z z - z L_z | lm \rangle = (m' - m) \langle l'm' | z | lm \rangle. \quad (21)$$

Quindi $\langle l'm' | z | lm \rangle = 0 \forall m' \neq m$ da cui discende la prima identità riportata nel testo e cioè

$$\langle l'm' | z | lm \rangle = \delta_{mm'} \langle l'm | z | lm \rangle. \quad (22)$$

Il risultato si può equivalentemente ottenere usando l'espressione esplicita di z in coordinate sferiche, osservando che non dipende da ϕ , e calcolando gli integrali.

Per verificare invece la seconda identità ricordiamo l'azione su z dell'operatore parità. In particolare

$$-z = \mathcal{P}^{-1} z \mathcal{P} \quad (23)$$

da cui discende che

$$\langle l'm' | -z | lm \rangle = \langle l'm' | \mathcal{P}^{-1} z \mathcal{P} | lm \rangle = (-1)^{l'+l} \langle l'm' | z | lm \rangle \quad (24)$$

dove nell'ultimo passaggio è stata usata l'azione dell'operatore parità sulle armoniche sferiche

$$\mathcal{P} | lm \rangle = (-1)^l | lm \rangle. \quad (25)$$

6. La hamiltoniana imperturbata è

$$H_r = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{|\vec{x}|}, \quad (26)$$

cioè quella dell'atomo di idrogeno. Il primo stato eccitato ha $n = 2$ ed è quattro volte degenere: $l = 0, M = 0$, oppure $l = 1, m = -1, 0, 1$.

Per determinare la perturbazione occorre quindi diagonalizzare la matrice quattro per quattro

$$\mathcal{E}' = D \langle 2l'm' | z | 2lm \rangle \quad (27)$$

dove $l, m, l'm'$ assumono i valori sopra elencati.

Utilizzando le identità dimostrate al punto precedente si vede immediatamente che tutti gli elementi di questa matrice si annullano, eccetto $\langle 210 | z | 200 \rangle$ ed il suo aggiunto. La matrice si riduce quindi a

$$\mathcal{E}_1 = D \begin{pmatrix} 0 & -3a_0 \\ -3a_0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (28)$$

avendo utilizzato il suggerimento. Gli autovalori di questa matrice sono

$$E' = \pm 3a_0 D \quad (29)$$

da cui discende che il primo livello eccitato E_2 si separa in tre livelli aventi energia

$$E_2^\pm = -\frac{\mu e^4}{8\hbar^2} \pm 3Da_0, \quad (30)$$

$$E_2^0 = -\frac{\mu e^4}{8\hbar^2}, \quad (31)$$

$$(32)$$

di cui l'ultimo è doppiamente degenere.

7. Osserviamo innanzitutto che il valor medio dell'operatore \vec{x} nello stato fondamentale dell'atomo di idrogeno è nullo, come si può vedere ad esempio sfruttando l'invarianza per rotazioni, o notando che è dato da un integrale di funzione dispari su dominio pari. Quindi nel caso imperturbato il valor medio dato è zero.

Introducendo la correzione al primo ordine allo stato si ha

$$\begin{aligned}\langle \vec{x} \rangle &= \langle \psi_0 | \vec{x} | \psi_0 \rangle = \left(\langle 100 | + D \langle \psi_0^{(1)} | \right) \vec{x} \left(| 100 \rangle + D | \psi_0^{(1)} \rangle \right) + \mathcal{O}(D^2) \\ &= D \left(\langle 100 | \vec{x} | \psi_0^{(1)} \rangle + \langle \psi_0^{(1)} | \vec{x} | 100 \rangle \right) + \mathcal{O}(D^2),\end{aligned}\quad (33)$$

dove abbiamo usato il fatto che, come si è detto $\langle 100 | \vec{x} | 100 \rangle = 0$.

La correzione al primo ordine dello stato $|\psi_0^{(1)}\rangle$ è data da

$$|\psi_0^{(1)}\rangle = \sum_{n,l,m \neq 1,0,0} \frac{\langle nlm | z | 100 \rangle}{E_0 - E_{nlm}} |nlm\rangle \quad (34)$$

Sostituendo nell'Eq. (33) otteniamo

$$\langle \vec{x} \rangle = 2D \sum_{n,l,m \neq 1,0,0} \frac{\langle 100 | \vec{x} | nlm \rangle \langle nlm | z | 100 \rangle}{E_0 - E_{nlm}}. \quad (35)$$

Possiamo semplificare ulteriormente questa espressione osservando che $\langle 100 | \vec{x} | nlm \rangle$ è diverso da zero solo quando \vec{x} è diretto lungo l'asse z e $m = m'$, che si dimostra ad esempio eseguendo una rotazione attorno all'asse z . Sfruttando il fatto che \vec{x} è un operatore hermitiano otteniamo quindi

$$\langle \vec{x} \rangle = 2D \sum_{n,l,m \neq 1,0,0} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{|\langle 100 | z | nlm \rangle|^2}{E_0 - E_{nlm}} \end{pmatrix}. \quad (36)$$