Compitino 2 di Meccanica Quantistica (A-B)

22 Marzo 2018 - Università di Pisa

(tempo a disposizione: 2 ore)

Problema 1

Il positrone è l'antiparticella dell'elettrone, ha la stessa massa, m, e carica opposta. Il sistema legato elettrone-positrone, ovvero $e^+ - e^-$, si chiama *positronio*. Nel limite non relativistico è un sistema idrogenoide.

a) [2pt]
Si scriva l'energia dello stato fondamentale $1s$.

Le due particelle hanno una interazione spin-spin (analoga all'interazione iperfine dell'idrogeno)

$$H_I = \frac{14}{3}\pi \left(\frac{e\hbar}{mc}\right)^2 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\, \mathbf{s_1} \cdot \mathbf{s_2} \tag{1.1}$$

b) [5pt]
Si scriva come si separa il livello $1s$ a causa dell'interazione (1.1).

Il sistema è sottoposto ad un campo magnetico B diretto lungo l'asse z. Le due particelle hanno momento magnetico *opposto*

$$\boldsymbol{\mu}_e = -\frac{e\hbar}{mc}\,\mathbf{s}_e\,; \quad \mu_p = +\frac{e\hbar}{mc}\,\mathbf{s}_p$$

($\mathbf{s}_e, \mathbf{s}_p$ sono gli operatori di spin dell'elettrone e del positrone).

c) [5pt]
Si dica come si presenta l'effetto Zeeman per $\mu_B B \ll \Delta$, dove Δ è la separazione di struttura iperfine calcolata sopra.

d) [7pt]
Si dica come cambia la risposta precedente, cioè si scrivano i livelli energetici in funzione di B, se $\mu_B B$ e Δ sono dello stesso ordine.

Problema 2

Si consideri un atomo di idrogeno e, per semplicità, si trascuri completamente lo spin dell'elettrone. L'atomo è nel livello $n = 2$ (n è il numero quantico principale) ed è immerso in un campo magnetico $\mathbf{B}$ diretto lungo l'asse z. Si usi come potenziale vettore il valore in gauge radiale

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \wedge \mathbf{r}$$

a) [4pt]
Si scrivano i livelli energetici del sistema, al primo ordine in B.

In aggiunta al campo $\mathbf{B}$ è presente un campo elettrico $\mathbf{E}$ diretto lungo l'asse x.

b) [8pt]
Si scrivano i livelli energetici del sistema in presenza di entrambi i campi, in teoria perturbativa.

c) [7pt]
I livelli energetici non devono dipendere dalla gauge scelta. Si consideri di nuovo il caso del solo campo magnetico. Si usi la teoria perturbativa con il potenziale vettore in gauge di Landau

$$A_x = 0\,; \quad A_y = Bx\,; \quad A_z = 0$$

e si verifichi la validità dell'affermazione.

Formule utili

$$\int_0^{\pi} \sin^4\theta \sin\theta \, d\theta = \frac{16}{15}\,; \quad \int_0^{2\pi} \cos^2\varphi \sin^2\varphi \, d\varphi = \frac{\pi}{4}\,; \quad \int_0^{\infty} z^n e^{-z} dz = n!$$

$$R_{1s}(r) = \frac{2}{a^{3/2}} e^{-r/a}$$

$$R_{2s}(r) = \frac{1}{\sqrt{2}a^{3/2}} e^{-\frac{r}{2a}} \left(1 - \frac{r}{2a}\right)\,; \quad R_{2p}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}a^{5/2}} r e^{-\frac{r}{2a}}$$

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\,; \quad Y_{10} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos\theta\,; \quad Y_{1,\pm1} = \mp\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}} e^{\pm i\varphi} \sin\theta$$

Soluzioni

Soluzione problema 1

a) La massa ridotta vale $\mu = m/2$, il corrispondente raggio caratteristico è

$$a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} = 2a_B$$

e quindi per l'energia si ha

$$E_n = -\frac{1}{2n^2}\frac{e^2}{a} = -\frac{1}{4n^2}\frac{e^2}{a_B}$$

b) Le due particelle hanno entrambe spin 1/2 quindi per lo spin totale S si ha $S = 0, 1$. Il valor medio dell'interazione si scrive

$$\frac{14}{3}\pi 4\mu_B^2 \left|\psi(0)\right|^2 \, \frac{1}{2}(S(S+1) - \frac{3}{2})$$

Quindi il livello si suddivide in un tripletto ed un singoletto con separazione

$$\Delta = \frac{14}{3}\pi 4\mu_B^2 \left|\psi(0)\right|^2 \frac{1}{2}2 = \frac{7}{3}8\mu_B^2\frac{1}{a^3} = \frac{7}{3}\frac{\mu_B^2}{a_B^3} \tag{1.2}$$

c) L'interazione magnetica è ($\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2$ sono gli spin di elettrone e positrone)

$$H_B = \frac{e\hbar}{mc}(\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2)\mathbf{B} = \frac{e\hbar}{mc}(s_{1,z} - s_{2,z})B \tag{1.3}$$

antisimmetrica per scambio $1 \leftrightarrow 2$. Siccome gli stati di tripletto e singoletto sono rispettivamente simmetrici e antisimmetrici rispetto a questa simmetria, non si hanno elementi di matrice diagonali, in altre parole non c'è effetto Zeeman lineare.

d) L'hamiltoniana (1.3) commuta con S_z quindi può mischiare solo gli stati $|1,0\rangle$ e $|0,0\rangle$ (con notazione $|S, S_z\rangle$). L'elemento di matrice si calcola immediatamente

$$\langle 0,0|H_B|1,0\rangle = \frac{1}{2}\frac{e\hbar}{mc}B[\langle +|\langle -| - \langle -|\langle +|](s_{1,z} - s_{2,z})[|+\rangle|-\rangle + |-\rangle|+\rangle]$$
$$= \frac{1}{2}\frac{e\hbar}{mc}B[\langle +|\langle -| - \langle -|\langle +|]\frac{1}{2}\left\{(|+\rangle|-\rangle - |-\rangle|+\rangle) - (-|+\rangle|-\rangle + |-\rangle|+\rangle)\right\}$$
$$= \frac{1}{2}\frac{e\hbar}{mc}B[\langle +|\langle -| - \langle -|\langle +|][\langle +|\langle -| - \langle -|\langle +|] = \frac{e\hbar}{mc}B = 2\mu_B B$$

Contando le energie a partire dal singoletto la matrice di perturbazione si scrive allora

	$\|1,1\rangle$	$\|1,0\rangle$	$\|1,-1\rangle$	$\|0,0\rangle$
$\langle 1,1\|$	Δ	0	0	0
$\langle 1,0\|$	0	Δ	0	$2\mu_B B$
$\langle 1,-1\|$	0	0	Δ	0
$\langle 0,0\|$	0	$2\mu_B B$	0	0

con autovalori

$$E = (\Delta, \Delta, \frac{1}{2}(\Delta \pm \sqrt{\Delta^2 + 16\mu_B^2 B^2})$$

Per $B \to 0$ si riottiene la usuale struttura iperfine, mentre per $B \to \infty$ (o meglio $\Delta \to 0$) si ha

$$E \to \{0, 0, -2\mu_B B, 2\mu_B B\} = \left\{0, 0, -\frac{e\hbar}{mc}B, \frac{e\hbar}{mc}B\right\}$$

Questo è im pratica l'effetto Pashen-Back: i due autovalori non nulli corrispondono agli autostati

$$|-\rangle|+\rangle\,; \quad |+\rangle|-\rangle$$

mentre i due autovalori nulli corrispondono agli stati $|+\rangle|+\rangle$ e $|-\rangle|-\rangle$.

Soluzione problema 2

a) L'Hamiltoniana del sistema si scrive, al primo ordine in B e sfruttando $\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{A} = 0$:

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m}(\mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A})^2 - \frac{e^2}{r} = \frac{1}{2m}\mathbf{p}^2 - \frac{e^2}{r} + \frac{e}{mc}\mathbf{A}\cdot\mathbf{p} + \mathcal{O}(B^2) = \\ &\frac{1}{2m}\mathbf{p}^2 - \frac{e^2}{r} + \frac{e}{2mc}(\mathbf{B}\wedge\mathbf{r})\cdot\mathbf{p} + \mathcal{O}(B^2) = \frac{1}{2m}\mathbf{p}^2 - \frac{e^2}{r} + \frac{e\hbar}{2mc}\mathbf{B}\cdot\boldsymbol{\ell} + \mathcal{O}(B^2) \end{aligned} \tag{1.4}$$

$\mu_B = e\hbar/2mc$ è il magnetone di Bohr, si trascura nel seguito l'ordine B^2, quindi, per un campo diretto lungo z:

$$H = \frac{1}{2m}\mathbf{p}^2 - \frac{e^2}{r} + \mu_B B\ell_z \equiv H_0 + \mu_B B\ell_z \tag{1.5}$$

L'energia imperturbata è

$$E_2 = -\frac{1}{8}\frac{e^2}{a_B}$$

Il livello $2s$ resta invariato, il livello $2p$ si scinde in 3 sotto livelli con

$$E_{2p,m_L} = E_2 + \mu_B B\, m_L\,; \qquad m_L = 0, \pm 1 \tag{1.6}$$

b) la presenza di un campo elettrico esterno introduce una perturbazione $-\mathbf{d}\cdot\mathbf{E}$, quindi per un campo diretto lungo x

$$H_E = ex\mathcal{E}$$

Scrivendo

$$x = \frac{1}{2}(x+iy) + \frac{1}{2}(x-iy)$$

si vede che i due termini possono indurre solo elementi di matrice con $\Delta m_L = \pm 1$ e con cambio di parità, quindi solo $2s \to 2p_1$ e $2s \to 2p_{-1}$. Il totale della matrice di perturbazione ha quindi la forma (usando la notazione $|\ell, m_L\rangle$ per gli stati)

	$\|1,1\rangle$	$\|1,0\rangle$	$\|1,-1\rangle$	$\|0,0\rangle$
$\langle 1,1\|$	$\mu_B B$	0	0	b_+
$\langle 1,0\|$	0	0	0	0
$\langle 1,-1\|$	0	0	$-\mu_B B$	b_-
$\langle 0,0\|$	b_+^*	0	b_-^*	0

dove

$$b_\pm = \frac{1}{2}e\mathcal{E}\langle 1,\pm 1|x \pm iy|0,0\rangle$$

Si vede che lo stato $|1,0\rangle$ resta un autostato con autovalore 0.

Utilizzando la forma delle funzioni d'onda ed effettuando gli integrali

$$b_\pm = \pm\frac{1}{2}e\mathcal{E}3\sqrt{2}a_B = \pm\frac{3}{\sqrt{2}}e\mathcal{E}\,a_B \tag{1.7}$$

Posto

$$\xi = \frac{1}{\mu_B B}\frac{3}{\sqrt{2}}e\mathcal{E}\,a_B$$

si può raccogliere μ_B e risolvere l'equazione secolare

$$\det\begin{pmatrix} 1-\lambda & 0 & 0 & \xi \\ 0 & -\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda-1 & -\xi \\ \xi & 0 & -\xi & -\lambda \end{pmatrix} = 0$$

cioè

$$\lambda^2(1+2\xi^2-\lambda^2) = 0$$

che dà luogo ai quattro autovalori (shift per E_2):

$$0\,;(deg.2)\,; \quad \pm\mu_B B\sqrt{1+2\xi^2} \tag{1.8}$$

Per $\mathcal{E} \to 0$ (quindi $\xi \to 0$) si riottiene il caso dell'effetto Zeeman. Per $B \to 0$ (cioè $\xi \to \infty$) si ottiene

$$0\,;(deg.2)\,; \quad \pm\sqrt{2}\mu_B B\xi = \pm 3e\,\mathcal{E} a_B$$

che è l'usuale risultato per l'effetto Stark linear sul livello $n = 2$ dell'atomo di idrogeno.

c) In questa gauge vale ancora div$\mathbf{A} = 0$ quindi l'Hamiltoniana al primo ordine in B si può scrivere

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{e}{mc}\mathbf{A}\mathbf{p} - \frac{e^2}{r} = H_0 - i2\mu_B Bx\frac{\partial}{\partial y}$$

Non avendo nessuna simmetria sotto rotazione conviene scrivere le funzioni d'onda p non in termini di armoniche sferiche ma di coordinate cartesiane, nella forma

$$f_x = xF(r)\,; \quad f_y = yF(r)\,; \quad f_z = zF(r)$$

L'ultima coincide con la funzione d'onda solita (proporzionale a Y_{10})

$$f_z = z \cdot \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\frac{1}{r}R_{2p} \tag{1.9}$$

Le altre si ottengono rimpiazzando z con x, y rispettivamente. Per parità l'operatore di pertubazione può mescolare solo stati che siano di parità opposta sia in x che in y. Quindi gli stati $2s$ e $2p_z$ non vengono toccati dalla perturbazione e per gli altri due la matrice ha la forma

$$V = \begin{pmatrix} 0 & \delta \\ \delta^* & 0 \end{pmatrix}\,; \qquad \text{autovalori} = \pm|\delta|$$

dove

$$\delta = \int d^3\mathbf{x} f_y \left(-2i\mu_B Bx\frac{\partial}{\partial y}\right) f_x = -2i\mu_B B\left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\right)^2 \int d^3\mathbf{x}\left(\frac{1}{a^{5/2}}\frac{1}{2\sqrt{6}}\right)^2 e^{-r/2a}yx\frac{\partial}{\partial y}xe^{-r/2a}$$

$$= 2i\mu_B B\left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\right)^2 \int d^3\mathbf{x}\left(\frac{1}{a^{5/2}}\frac{1}{2\sqrt{6}}\right)^2 e^{-r/2a}yx^2\frac{1}{2a}\frac{y}{r}e^{-r/2a} =$$

$$2i\mu_B B\left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\right)^2\left(\frac{1}{a^{5/2}}\frac{1}{2\sqrt{6}}\right)^2\frac{1}{2a}\int r^2 drd\Omega\; r^3\sin^4\theta\cos^2\varphi\sin^2\varphi e^{-r/a}$$

$$= 2i\mu_B B\frac{3}{4\pi}\frac{1}{24}\frac{1}{2}\left[120\right]_r\left[\frac{16}{15}\right]_\theta\left[\frac{\pi}{4}\right]_\varphi = i\mu_B B$$

Gli autovalori della matrice sono quini $\pm\mu_B B$ ed assieme ai due autovalori nulli riproducono l'usuale effetto Zeeman.