Meccanica Quantistica

4 settembre 2018 (A.A. 17/18)

Tempo a disposizione: 3 ore

Problema 1

Una particella di massa m si muove in un potenziale unidimensionale armonico

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \,. \tag{1}$$

La particella all'istante $t = 0$ si trova nello stato fondamentale.

1) Si supponga che istantaneamente il potenziale cambi, in modo che la nuova frequenza sia ω_1. Qual è la probabilità di osservare la particella nello stato fondamentale del nuovo sistema subito dopo il cambiamento?

   Si scriva il risultato esatto e la sua espressione nel caso $\omega_1^2 = \omega^2 + \xi$, al secondo ordine in ξ.

2) Questa probabilità cambia se la misura viene effettuata ad un tempo $t > 0$?

Il cambiamento precedente si può effettuare in modo più controllato aggiungendo alla Hamiltonian di partenza una perturbazione del tipo

$$V = \frac{1}{2} m(\omega_1^2 - \omega^2)(1 - e^{-t/\tau})\, x^2 \equiv \frac{1}{2} m\, \xi (1 - e^{-t/\tau})\, x^2 \tag{2}$$

3) Usare la teoria perturbativa al primo ordine in ξ e calcolare qual è la probabilità di trovare il sistema in uno stato eccitato al tempo $t \to \infty$.

4) Si verifichi che per $\tau \to 0$ si riottiene il risultato per piccoli ξ del punto 1).

Problema 2

Descriviamo approssimativamente un atomo, per i nostri scopi, come un sistema che fornisce uno stato fondamentale con energia E_0 per un singolo elettrone. Consideriamo ora tre atomi identici, che si dispongono in modo simmetrico a forma di triangolo equilatero. Il sistema, per il singolo elettrone, può essere schematizzato da una hamiltoniana effettiva

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & -A & -A \\ -A & E_0 & -A \\ -A & -A & E_0 \end{pmatrix} \tag{3}$$

Il parametro $A > 0$ descrive l'ampiezza, per un elettrone, di passare da un atomo all'altro.

1) Si scrivano gli autovalori della Hamiltoniana (3).

2) Supponiamo ora che siano presenti tre elettroni, non interagenti fra loro, quindi uno per ogni atomo. Gli atomi "lontani" fra di loro sono supposti contenere ognuno un singolo elettrone. Tenendo conto del principio di Pauli qual'è l'energia del sistema? È un sistema legato, cioè si può formare una molecola?

Formule utili

Le funzioni d'onda dei primi autostati di un oscillatore armonico sono

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\ell^{1/2}} \frac{1}{\pi^{1/4}} \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{x^2}{\ell^2}\right) \; ; \quad \psi_1(x) = \frac{1}{\ell^{1/2}} \frac{1}{\pi^{1/4}} 2\frac{x}{\ell} \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{x^2}{\ell^2}\right)$$
$$\psi_2(x) = \frac{1}{\ell^{1/2}} \frac{1}{\pi^{1/4}} \left(4\frac{x^2}{\ell^2} - 2\right) \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{x^2}{\ell^2}\right) \; ; \qquad \ell^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \, .$$

Integrale di una gaussiana

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-\alpha x^2) = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \tag{4}$$

Soluzione 1

1)
L'ampiezza è data da $\mathcal{A} = \langle 0|0'\rangle$, dove $|0\rangle$ e $|0'\rangle$ sono il vecchio ed il nuovo stato fondamentale. Il nuovo stato fondamentale $\tilde{\psi}_0(x)$ ha la stessa forma di quello vecchio a parte la sostituzione $\ell \to \ell_1$, con $\ell_1^2 = \hbar/(m\omega^2)$, quindi

$$\mathcal{A} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0(x)\tilde{\psi}_0(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\pi^{1/2}\ell^{1/2}\ell_1^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}x^2(\frac{1}{\ell^2}+\frac{1}{\ell_1^2})\right) = \sqrt{2}\sqrt{\frac{\ell\ell_1}{\ell^2+\ell_1^2}}$$

L'integrale è stato effettuato usando la (4). La probabilità è quindi

$$P = |\mathcal{A}|^2 = \frac{2\ell\ell_1}{\ell^1+\ell^2} = \frac{2}{\sqrt{\omega_1\omega}}\frac{1}{\omega^{-1}+\omega_1^{-1}} = \frac{2\sqrt{\omega\omega_1}}{\omega+\omega_1} \tag{5}$$

Per $\omega_1^2 \simeq \omega^2 + \xi$ sviluppando in serie

$$P \simeq 1 - \frac{\xi^2}{32\omega^4} \tag{6}$$

2)
Lo stato $|0\rangle$ è sviluppabile in serie degli autostati della nuova Hamiltoniana

$$|0\rangle = \sum_n c_n|n'\rangle$$

Al tempo t

$$|0\rangle_t = \sum_n c_n e^{-i\tilde{E}_n t/\hbar}|n'\rangle$$

e la probabilità è

$$P = \left|c_0 e^{-i\tilde{E}_0 t/\hbar}\right|^2 = |c_0|^2$$

La probabilità *non cambia nel tempo.*

3)
La perturbazione non va a zero all'infinito, quindi secondo quanto studiato nel corso l'ampiezza di transizione per passare da uno stato i ad uno stato f si scrive

$$\mathcal{A}_{fi} = \frac{1}{\hbar\omega_{fi}}\int_0^{\infty} e^{i\omega_{fi}t}\frac{\partial V_{fi}}{\partial t}dt \tag{7}$$

Lo stato di partenza è il fondamentale e la perturbazione è proporzionale a x^2, per le regole di selezione sull'oscillatore armonico solo il secondo stato eccitato può essere raggiunto, quindi nel caso in esame

$$\omega_{fi} = 2\omega\,; \qquad \frac{\partial V_{fi}}{\partial t} = \frac{1}{2}\frac{m\xi}{\tau}\langle 2|x^2|0\rangle e^{-t/\tau}$$

Usando la relazione

$$x = \frac{\ell}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger)$$

si ha subito

$$\langle 2|x^2|0\rangle = \frac{\ell^2}{2}\sqrt{2} = \frac{1}{\sqrt{2}}\ell^2$$

e quindi l'ampiezza diventa

$$\mathcal{A}_{20} = \frac{1}{2\hbar\omega}\int_0^\infty e^{2i\omega t}\frac{1}{2}\frac{m\xi}{\tau}\frac{\ell^2}{\sqrt{2}}dt = e^{-t/\tau}dt =$$
$$= \frac{\xi}{4\tau\omega^2}\int_0^\infty e^{2i\omega t}e^{-t/\tau}dt = \frac{\xi}{4\sqrt{2}\,\omega^2}\frac{1}{1 - 2\,i\,\tau\omega}$$

e quindi la probabilità è

$$P_{0\to 2} = \frac{\xi^2}{32\omega^4}\frac{1}{1 + 4\tau^2\omega^2}$$

4)
La probabilità di permanenza nel fondamentale è quindi

$$P_{0\to 0} = 1 - P_{0\to 2} = 1 - \frac{\xi^2}{32\omega^4}\frac{1}{1 + 4\tau^2\omega^2}$$

che nel limite $\tau \to 0$ (accensione istantanea) si riduce alla (6).

Soluzione 2

1)
Gli autovalori sono

$$E_1 = E_0 - 2A\,; \quad E_2 = E_3 = E_0 + A \tag{8}$$

2)
Per il principio di Pauli in ogni orbitale (stato orbitale) si possono inserire al massimo due elettroni quindi si possono mettere due elettroni nel livelo E_1 ed il restante nel livello eccitato, per una energia

$$E = 2(E_0 - 2A) + (E_0 + A) = 3E_0 - 3A$$

il sistema ha quindi una energia minore di quella dei sistemi separati ($3E_0$) ed è quindi legato.